

Analyse eines Spinsystems mit  
eingefrorener Unordnung mittels der  
Ortsraum-Renormierungsgruppe

Dissertation zur Erlangung des  
Doktorgrades  
des Fachbereichs Physik  
der Universität Hamburg

vorgelegt  
von  
Andreas Rothe\*  
aus  
Rheinfelden (Baden)

29. Juli 2005

<b>Gutachter der Dissertation :</b>	Dr. A. Chudnovskiy/Prof.Dr. D. Pfannkuche Doz. Dr. S. Kettemann
<b>Gutachter der Disputation :</b>	Dr. A. Chudnovskiy Prof. Dr. A. Lichtenstein
<b>Datum der Disputation:</b>	08.07.2005
<b>Vorsitzende des Prüfungsausschusses:</b>	Prof. Dr. Wolfgang Hansen
<b>Vorsitzende des Promotionsausschusses:</b>	Dr. Dirk Grundler
<b>Dekan des Fachbereichs Physik:</b>	Prof. Dr. Günter Huber

für Gabriele

# Kurzfassung

Das Ziel dieser Dissertation besteht darin, das Verständnis von ungeordneten Spin-Systemen in einer Dimension zu verbessern.

Magnetische Systeme mit eingefrorener Unordnung werden seit langem intensiv untersucht. Berühmte Beispiele hierfür sind Spingläser oder der Ferromagnetismus in verdünnten magnetischen Halbleitern (DMS), die in zukünftigen Spin-Bauelementen eine gewichtige Rolle spielen könnten.

Um die Rolle von Unordnung in hoch korrelierten Systemen verstehen zu können, sind einfache Modelle sehr hilfreich, welche die wesentlichen physikalischen Eigenschaften widerspiegeln.

Trotz der exponentiell anwachsenden Rechenleistung von Computern geben analytisch lösbare Modelle immer noch den tiefsten Einblick in die grundlegenden Eigenschaften physikalischer Systeme.

Die Sparte an lösbaeren Modellen ist natürlich beschränkt. Einige der bekannteren Spin-Modelle sind das Kirkpatrick Modell der Spingläser und das eindimensionale Ising Modell mit zufälligem, transversalem Magnetfeld. Letzteres ist vielleicht das einfachste Modell mit eingefrorener Unordnung, welches einen Quantenphasenübergang aufweist.

Das hier betrachtete Modell besteht aus einer Spinkette aus lokalisierten Ising Spins  $S_i$  mit zufälligen lokalen Potentialen  $V_i$ . Die Korrelation zwischen diesen Spins wird durch bewegliche Löcher vermittelt, die an der Kette entlang hüpfen. Die anti-ferromagnetische Kopplung  $J_i$  und die Hüpfmatrixelemente werden ebenfalls als zufällig angenommen.

Der zugehörige Kondo-Gitter-artige Hamilton Operator wird mittels der Ortsraum Renormierungsgruppe analysiert. Wegen der Unordnung ist man mehr an den Verteilungen als an den Kopplungen selbst interessiert. In Erwartung eines Quanten-kritischen Punktes erhält man die so genannten kritischen Verteilungen mit Hilfe des Renormierungsschemas. Man gewinnt die dazugehörigen Flussgleichungen, die durch weitere Näherungen analytisch gelöst werden können. Mit Hilfe der kritischen Verteilungen berechnet man die Spin-Spin-Korrelationsfunktion und die Korrelationslänge.

# Abstract

The aim of this thesis is to improve the understanding of disordered spin systems in one dimension.

Magnetic systems with quenched disorder have been under intensive studies for a long time. Famous examples are spin glasses or the ferromagnetism in diluted magnetic semiconductors (DMS) which may play an important role in future spintronic devices.

To understand the role of disorder in highly correlated systems one greatly benefits from simple models which capture the essential physical properties.

Despite exponentially growing computer power analytically solvable models give the deepest insight into basic properties of physical systems.

The range of solvable models is limited of course. Some well known spin models are the Kirkpatrick model for spin glasses and the Ising model with random transverse field in one spatial dimension. The latter one is perhaps the simplest model featuring quenched disorder which exhibits a quantum phase transition.

The model under consideration here consists of a spin chain of localized Ising spins  $S_i$  with random on site energies  $V_i$ . The correlation between these spins is mediated by itinerant holes with spin  $s_i$  hopping along the chain. The anti-ferromagnetic interaction strength  $J_i$  and the hopping amplitude  $t_i$  are chosen to be random also.

The corresponding Kondo-lattice like Hamiltonian is analyzed using the formalism of real space renormalization group. Because of the randomness one is more interested in the distributions of couplings rather than the couplings themselves. Expecting a quantum critical point, the so called critical distributions are obtained via the renormalization scheme. One obtains the corresponding flow equations which can be solved analytically using some further approximations. With the help of the critical distributions one calculates the spin correlation function and correlation length.

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>1</b>
1.1	Ziel der Arbeit . . . . .	1
1.2	Motivation und Hintergrund . . . . .	1
1.3	(Ga,Mn)As als typischer DMS . . . . .	3
1.4	Unordnung und eindimensionale Spin-Systeme . . . . .	5
1.5	Struktur der Arbeit . . . . .	8
<b>2</b>	<b>Das Modell</b>	<b>11</b>
2.1	Die 3 Terme des Modells . . . . .	12
<b>3</b>	<b>Renormierung</b>	<b>16</b>
3.1	Die Idee der Renormierung . . . . .	16
3.2	Ausintegration eines Kettengliedes . . . . .	19
3.2.1	Seltene Ereignisse . . . . .	20
3.3	Die Zustandssumme . . . . .	21
3.4	Renormierung von $V_i$ . . . . .	24
3.5	Renormierung von $t_i$ . . . . .	29
3.6	Renormierung von $J_i$ . . . . .	33
3.6.1	Bestimmung der Hilfsfelder . . . . .	35
<b>4</b>	<b>Die kritischen Verteilungen</b>	<b>40</b>
4.1	Notation . . . . .	40
4.2	Die Verteilung $P(\alpha, \Gamma)$ . . . . .	42
4.2.1	Lösung von $P(\alpha, \Gamma)$ . . . . .	43
4.3	Die Verteilung $R(\delta, \Gamma)$ . . . . .	47
4.3.1	Lösung von $R(\delta, \Gamma)$ . . . . .	49
4.3.2	Lösung von $c(\Gamma)$ . . . . .	50
4.4	Die Verteilung $Q(\rho, \Gamma)$ . . . . .	53
4.4.1	Lösung von $Q(\rho, \Gamma)$ . . . . .	56
4.5	Numerische Lösung von $c(\Gamma)$ . . . . .	60
4.6	Bestimmung der Spin-Spin-Korrelationslänge $\xi$ . . . . .	61
4.6.1	Die Verteilung der Längen in $R(\delta, l, \Gamma)$ . . . . .	61
4.6.2	Die Verteilung der Cluster . . . . .	66

<b>5 Die Korrelationsfunktion</b>	<b>70</b>
5.1 Die Überlebenswahrscheinlichkeit $s$ . . . . .	73
5.2 Berechnung von $\langle S_i S_j \rangle$ . . . . .	75
5.2.1 Integration über $J$ . . . . .	77
<b>6 Fazit</b>	<b>80</b>
<b>A Der Pfadintegralformalismus</b>	<b>81</b>
A.1 Einteilchen Zustandssumme als Pfadintegral . . . . .	81
A.2 Vielteilchen Pfadintegral . . . . .	82
A.3 Das chemische Potential $\mu_S$ . . . . .	85
A.4 Matsubarafrequenzen . . . . .	86
<b>B Rechnen mit Grassmannvariablen</b>	<b>88</b>
<b>C Laplace-Transformation</b>	<b>90</b>
<b>D Eindimensionale Systeme</b>	<b>92</b>
D.1 Griffiths-Singularitäten . . . . .	92
D.1.1 Kritische Größen . . . . .	93
D.2 Magnetisierung und Korrelationsfunktionen . . . . .	96
D.3 Die fermionische Kette . . . . .	98
<b>E Norm von <math>Q(\rho, \Gamma)</math></b>	<b>99</b>
<b>Abkürzungen</b>	<b>101</b>
<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>102</b>
<b>Selbständigkeitserklärung</b>	<b>111</b>

# Abbildungsverzeichnis

1.1	Schema eines Spin-Transistors . . . . .	2
1.2	Gitterstruktur von (Ga,Mn)As . . . . .	4
1.3	(Ga,Mn)As Nanodraht . . . . .	8
1.4	Kohlenstoff Nanoröhrchen . . . . .	9
2.1	Lokalisierte und delokalisierte Löcher . . . . .	12
2.2	Modell der Spinkette . . . . .	14
2.3	Percolationsmodell in DMS Systemen . . . . .	14
3.1	Schematische Darstellung der Renormierung . . . . .	19
3.2	Seltene Ereignisse . . . . .	21
3.3	Renormierung einer Kopplung $J_i$ oder $V_i$ . . . . .	24
3.4	Renormierung einer Kopplung $t_i$ . . . . .	29
4.1	Kritische Verteilung $P$ (Herleitung) . . . . .	43
4.2	Die Verteilung $P_0$ . . . . .	46
4.3	$P$ für diverse Ausgangsverteilungen . . . . .	47
4.4	$P_0$ für diverse Ausgangsverteilungen . . . . .	47
4.5	Die Verteilung $R$ (Herleitung) . . . . .	48
4.6	$c(\Gamma)$ für diverse Ausgangsverteilungen . . . . .	51
4.7	$R_0$ für diverse Ausgangsverteilungen . . . . .	52
4.8	Breite von $R$ . . . . .	53
4.9	Die Verteilung $Q^\infty(\rho, \Gamma)$ (1) . . . . .	59
4.10	Die Verteilung $Q^\infty(\rho, \Gamma)$ (2) . . . . .	59
4.11	$c(\Gamma)$ für diverse Verteilungen von $Q^\infty$ . . . . .	60
4.12	Fit für $\nu$ . . . . .	68
5.1	Anregung der Kette durch ein externes Feld . . . . .	71
5.2	Überlebenswahrscheinlichkeit $s(\Gamma)$ und $s(\Omega)$ (1) . . . . .	75
5.3	Überlebenswahrscheinlichkeit $s(\Gamma)$ und $s(\Omega)$ (2) . . . . .	76
5.4	Die Energieskala . . . . .	76
5.5	Korrelator $\overline{\langle S_i S_j \rangle}(\omega)$ . . . . .	79
D.1	Definition von $G(\beta, x, \Gamma)$ . . . . .	97
D.2	Dezimierung eines Spinclusters . . . . .	97



# 1 Einleitung

## 1.1 Ziel der Arbeit

Ziel dieser Arbeit ist die theoretische Untersuchung einer Spinkette mit eingefrorener (engl. *quenched*) Unordnung. Zur Analyse des Modells wird die Ortsraum-Renormierungsgruppe herangezogen. Dabei kommt ein ähnliches Prozedere zur Anwendung, wie bei der Ortsraum Renormierungsgruppen-Analyse der Isingkette mit zufälligem, transversalem Magnetfeld von Daniel S. Fisher [40].

Als wesentliches Ergebnis der Rechnungen erhält man die frequenzabhängige Spin-Spin-Korrelationsfunktion und die Energieabhängigkeit der Korrelationslänge.

Die Arbeit soll dabei helfen, mehr Einsichten in die Natur ungeordneter Spin-Systeme in einer Dimension zu erhalten, mit möglichen Anwendungen in der theoretischen Beschreibung von Spin-Systemen wie den verdünnten magnetischen Halbleitern.

## 1.2 Motivation und Hintergrund

Magnetische Phänomene und die Untersuchung magnetischer Materialien sind ein wichtiges Arbeitsgebiet der modernen Festkörperphysik. Mit der Quantentheorie und der sich daraus entwickelnden Theorie der kondensierten Materie wurde im letzten Jahrhundert die Grundlage für das Verständnis magnetischer Phänomene auf mikroskopischer Ebene entwickelt.

Die zentrale mikroskopische Größe der magnetischen Theorie ist der Spin, ein quantenmechanischer Drehimpuls ohne klassisches Analogon. Dieser Spin sorgt nicht nur für ein magnetisches Moment<sup>1</sup>, sondern unterteilt den Mikrokosmos in 2 Klassen: Teilchen mit ganzzahligem (Bosonen) und halbzahligem Spin (Fermionen).

Spin-Modelle, wie die nach ihren Autoren benannten Ising- und Heisenberg-Hamilton Operatoren, lieferten die Grundlage für erste Einsichten in Para-, Ferro- und Antiferromagnetismus.

Die Auswirkungen von Spin-Effekten sind von mannigfaltiger Natur. Von den exotischen Eigenschaften der Spingläser, die mögliche Realisierung eines Spins als Qbit [23] für revolutionäre Quantencomputer, über das weite und faszinierende Feld der Kondo Physik bis hin zu bereits etablierten technischen Anwendungen wie Supraleitung oder dem GMR(*giant magneto resistance*)-Effekt, der hinter der Funktionsweise der Leseköpfe moderner Festplatten steckt.

---

<sup>1</sup>Wenn in Zukunft von Momenten die Rede ist, sind damit immer magnetische Momente gemeint.

## 1 Einleitung

Insbesondere die praktisch nutzbaren Anwendungsmöglichkeiten sind eine stetige Motivation für den Grundlagenforscher. Insbesondere die boomende Chip Industrie profitiert von den Arbeiten der Material-Wissenschaft und Grundlagenforschung.

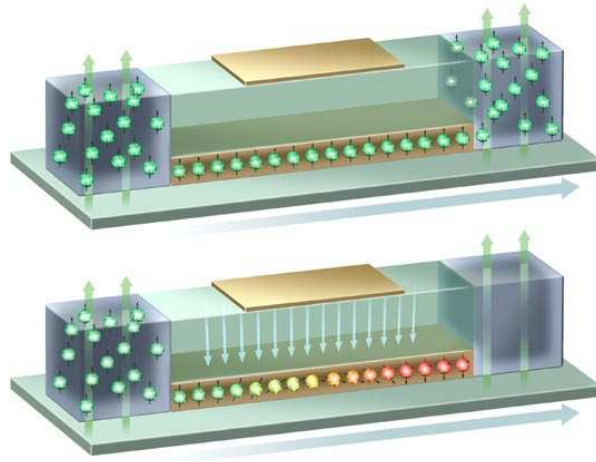


Abbildung 1.1: Funktionsschema eines Spin-Transistors [27]. *Source* und *Drain* (links und rechts) bestehen aus einem ferromagnetischen Material. Im Idealfall ist dies ein ferromagnetischer Halbleiter, um hohe Spininjektionsraten zu gewährleisten. Durch die aufgebrachte *Gate*-Elektrode (oben) kann mittels Spin-Orbit-Kopplung (Rashba-Effekt) [13] die Spinpolarisierung der Ladungsträger im 2DEG ( *two dimensional electron gas*, braun) beeinflusst werden. Nur bei passender Spinpolarisierung fließt ein endlicher Strom.

Kamen bislang in der Computerindustrie magnetische Materialien vor allem in Massenspeichern zum Einsatz, so ist seit mehreren Jahren die *Spintronic* ein beliebtes *Buzzword* geworden.

Hier wird versucht, den Spin zusätzlich zum elektronischen Freiheitsgrad zu nutzen. Bei Computern der Zukunft [3] könnte man Rechen- und Speicherbereich in ein Bauteil zusammenfassen, was natürlich zahlreiche Vorteile böte<sup>2</sup>.

Der Bau von Spin-Transistoren, wie sie von Datta und Das vorgeschlagen wurden [27, 76], und anderen Spinbauelementen bereitet allerdings auch nach Jahren immer noch Probleme [63]. So fehlen noch geeignete Materialien und die Möglichkeit Spininjektion [101] und Polarisation [13, 37] hinreichend gut zu kontrollieren.

Eine viel versprechende Materialklasse sind die verdünnten<sup>3</sup> magnetischen Halbleiter (*di-*

<sup>2</sup>Mehr Komfort für den Anwender z.B. durch *Magnetic Random Access Memory* (MRAM) und natürlich neue Absatzmärkte für eine vom Fortschritt abhängige Branche.

<sup>3</sup>Im Gegensatz zu vielen anderen Spin-Systemen ist die Zahl der zum Magnetismus beitragenden Momente sehr klein.

*luted magnetic semiconductors*, in Zukunft mit DMS abgekürzt). Allerdings gibt es auch hier neben praktischen Problemen (Curie-Temperatur deutlich unter 300K oder Probleme bei der Massenproduktion) auch etliche theoretische Verständnislücken.

Man ist sich inzwischen sicher, dass Ladungsträger im *host material* die magnetische Ordnung zwischen lokalisierten magnetischen Ionen (Verunreinigungen) vermitteln. Die Anordnung dieser lokalen magnetischen Momente ist dabei zufällig und die Qualität der Probe und der magnetischen Eigenschaften ist stark von Herstellungsverfahren und dem anschließenden *annealing* (dt. Ausglühen. Erhitzen der Probe und anschließendes Abkühlen um Anspannungen und Fehler im Material zu reduzieren) abhängig [75, 110, 119]. Dies deutet stark darauf hin, dass die Realisierung der Unordnung in der Probe eine nicht zu unterschätzende Bedeutung besitzt.

### 1.3 (Ga,Mn)As als typischer DMS

Der in der Literatur lange Zeit populärste und wohl bestuntersuchteter Vertreter der DMS Materialien ist Mangan dotiertes Galliumarsenid ( $\text{Ga}_{1-x}\text{Mn}_x$ )As. Die Schreibweise ist so zu lesen, dass Galliumionen durch Manganionen ersetzt werden<sup>4</sup>, wobei x die Konzentration letzterer angibt.

Die Mangankonzentration ist niedrig und liegt typischerweise bei wenigen Prozent. Da in dieser Arbeit die explizite Abhängigkeit von der Mangankonzentration nicht weiter interessiert, entfällt im folgenden der Index.

1996 produzierten H. Ohno [90] und dessen Mitarbeiter dieses Material mittels Niedrig-Temperatur- Molekularstrahlepitaxie.

Da (Ga,Mn)As sich relativ leicht in andere GaAs Heterostrukturen einbringen lässt, ist es aus Sicht möglicher technischer Anwendungen ein interessanter Kandidat für die Spintronic.

Im Gegensatz zu bereits bekannten DMS, die antiferromagnetisches oder Spinglas-Verhalten zeigten [67], war die Probe ferromagnetisch. Die Curie-Temperatur lag bei 60K. Bemerkenswert hoch also, da die niedrige Ladungsträgerdichte und der vorherrschende Superaustausch zwischen lokalen Momenten normalerweise kaum Ferromagnetismus hervorbringt.

Verbesserte Methoden und Erfahrungen führten zu ferromagnetischen Proben, deren Curie-Temperatur bei etwas über 100K lag. Zwar noch einen Faktor 3 von der magischen Grenze 300K (als Synonym für Raumtemperatur) entfernt, aber die Jagd nach halbleitenden Hochtemperaturmagneten war eröffnet.

Einen guten Übersichtsartikel über Herstellung und Eigenschaften von (Ga,Mn)As findet man bei [93] und aktueller bei [85], welches weitere Übersichtsartikel referenziert.

Die Mangan-Konzentration ist wie bereits erwähnt bei allen Proben ausgesprochen klein (meist 4-7%), und wegen der niedrigen Temperaturen ( $<300^\circ$ ) beim Wachstum enthalten die Proben viele (zufällige) Defekte.

---

<sup>4</sup>Genauere Untersuchungen zeigen, dass auch die AS-Gitterplätze von Mangan eingenommen werden können[140], oder überschüssige Mn-Ionen sich zufällig an Plätzen verteilen, die nicht mit der Zinkblendstruktur von GaAs kommensurabel sind ([45] und Abbildung 1.2).

## 1 Einleitung

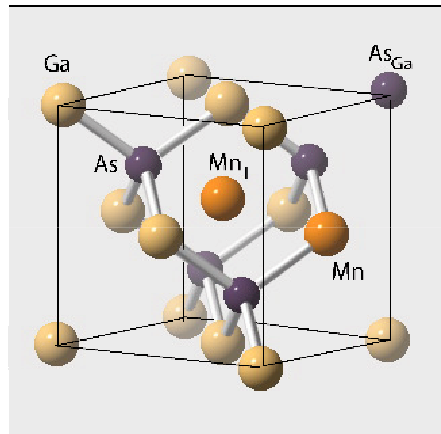


Abbildung 1.2: Gitterstruktur von (Ga,Mn)As. Einheitszelle mit typischen Defekten. Rechts oben (dunkelblau) ein *anti site* Defekt: ein As-Ion auf einem Gallium-Gitterplatz ( $As_{Ga}$ ), in der Mitte (orange) ein *interstitial* Mn-Ion ( $Mn_I$ ). Die Grafik stammt von A. H. MacDonald *et al.* [85] (online unter [86]).

Relativ hohe kritische Temperatur trotz Unordnung und geringer Dotierung?

Die Frage nach den mikroskopischen Vorgängen in (Ga,Mn)As und verwandten DMS beschäftigt die Theoretiker bis heute.

Relativ schnell war etabliert, dass ein Ladungsträger induzierter Mechanismus für die magnetische Ordnung in Frage kam [91].

Erste Arbeiten benutzen die RKKY<sup>5</sup>-Wechselwirkung [118], Autoren späterer Arbeiten [14, 25, 72] stellten die Gültigkeit des RKKY-Mechanismus jedoch in Frage<sup>6</sup>. Eine Vielzahl von Veröffentlichungen auf *mean-field*-Basis lieferten gute Übereinstimmung mit der gemessenen Curie-Temperatur. Allerdings reicht dies allein nicht aus, um die verwendete Theorie zu bestätigen. Rechnungen mit gegensätzlichen Grundannahmen konnten experimentelle Daten gleich gut bestätigen.

Während beispielsweise einige Autoren von freien Löchern ausgingen [31], begannen andere Gruppen mit fast lokalisierten Ladungsträgern [109] oder studierten an Mn gebundene Polaronen (BMP *Bound Magnetic Polaron*) im Percolationsbild (siehe Abbildungen 2.1 und 2.3 im anschließenden Kapitel).

Erschwerend dazu kam noch die starke Präsenz von Unordnung in den Proben (Abbildung 1.2). Oft wurde in früheren Arbeiten die Rolle der Unordnung nicht oder nur unzureichend betrachtet [8, 20, 21].

<sup>5</sup>Nach den Begründern der Methode Ruderman, Kittel, Kasuya und Yosida.

<sup>6</sup>Die RKKY Theorie gilt, wenn die Austauschenergie klein im Vergleich zur Fermienergie ist, was wegen der geringen Lochkonzentration in (Ga,Mn)As nicht der Fall ist

## 1 Einleitung

Sowohl experimentelle als auch theoretische Arbeiten betonten in den folgenden Jahren die Bedeutung von Unordnung für dieses System [94, 112, 127] als einen essentiellen, nicht vernachlässigbaren Faktor. Die Resultate der verschiedenen Arbeiten waren hingegen nicht immer einheitlich.

Auch eine relativ einfache Frage, ob Unordnung die magnetische Ordnung favorisiert [8] oder ihr entgegenwirkt [107], wurde und wird in der Literatur unterschiedlich beantwortet.

In (Ga,Mn)As findet man gleich mehrere Typen von (zufälligen) Verunreinigungen [56], wobei diese noch teilweise stark korreliert sind [96].

Die Bandbreite der verwendeten Methoden um DMS zu untersuchen weist folglich nahezu alles auf, was in der Werkzeugkiste des modernen Festkörperphysikers zu finden ist.

Ohne Messungen waren inzwischen von anderen Gruppen bestätigt worden, und weitere DMS-Materialien rückten ins Licht der Experimentatoren. Inzwischen erreicht man in (Ga,Mn)As Curie-Temperaturen von bis zu 140K [44], wobei damit anscheinend die Grenze des Machbaren erreicht ist [45, 47].

Andere Substanzen (etwas (Ga,Mn)N [58] oder GaMnP [132]) haben die „Schallmauer“ der Raumtemperatur allerdings schon durchbrochen und sind deswegen heiße Kandidaten für praktische Anwendungen. Die bisher gewonnenen Einsichten in die Physik von ungeordneten magnetischen Halbleitern erweisen sich bei der theoretischen Beschreibung DMS ähnlicher [66, 87] Substanzen dabei als äußerst nützlich [64].

### 1.4 Unordnung und eindimensionale Spin-Systeme

Das Verständnis von magnetischen Systemen mit eingefrorener Unordnung<sup>7</sup> ist für sehr konkrete technische Fragestellungen also von grundlegender Wichtigkeit [122]. Abgesehen von möglichen praktischen Anwendungen jedoch, sind ungeordnete magnetische Systeme für die Grundlagenforschung von hohem Interesse [120].

Jedes in der Natur (und im Labor) beobachtbare System besitzt zufällige Verunreinigungen oder Defekte. Zwar ist es mit wachsender Rechenleistung möglich, immer kompliziertere Systeme numerisch zu behandeln, die beste Einsicht in grundlegende Fragen bieten aber analytisch rechenbare Modelle.

Die Auswahl an rechenbaren und gleichzeitig nicht trivialen Modellen ist jedoch beschränkt. In der Literatur bekannte Beispiele sind das *strip random* Ising Modell in 2 Dimensionen von McCoy und Wu [81], oder die Beschreibung von Spingläsern durch Sherrington-Kirkpatrick [106, 115, 116].

Ein weiteres – schon seit den 1960’ern bekanntes [48]– *Toymodel* wurde 1992 von Daniel

---

<sup>7</sup>Da später insbesondere die Situation bei  $T = 0$  betrachtet wird, ist Unordnung im weiteren Verlauf immer im Sinne von *quenched disorder* zu verstehen. Auf die Rolle der thermischen Unordnung (Stichwort Entropie) wird nicht weiter eingegangen werden.

## 1 Einleitung

Fisher [39] mit Hilfe der Ortsraum-Renormalisierungsgruppe (ORG)<sup>8</sup> [39] untersucht. Das Modell beschreibt eine ungeordnete Spinkette mit transversalem Feld, in der Literatur bekannt als *random transverse-field Ising spin model* kurz RTISM. Der Hamilton Operator für dieses eindimensionale System ist ( $\sigma^{x,z}$  stehen für die entsprechenden Pauli Spin Matrizen):

$$\mathcal{H} = - \sum J_i \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z - \sum h_i \sigma_i^x - H \sum \sigma_i^z . \quad (1.1)$$

Alle Kopplungen (oder Bindungen)  $J_i$  wie auch die Felder  $h_i$  sind zufällig und Realisierungen der dazugehörigen Zufallsverteilungen.

Die ORG wurde in den folgenden Jahren auch von einigen anderen Autoren (beispielsweise [4, 59, 134]) erfolgreich zur weiteren Analyse dieses Modells benutzt.

Die RTISM ist das einfachste, nicht triviale Spin-System<sup>9</sup> mit eingefrorener Unordnung, welches einen Quantenphasenübergang (QPÜ) aufweist [18, 71], also einen rein durch Quantenfluktuationen dominierten Phasenübergang bei  $T = 0$  [126].

Normalerweise würde man von einem „reinen“<sup>10</sup> Spin-System (z.B. Ising oder Heisenberg Modell) erwarten, dass man am absoluten Temperatur-Nullpunkt eine geordnete Phase<sup>11</sup> vorfindet, da hier thermische Spin-Anregungen abwesend sind.

In Anwesenheit von Unordnung kann diese Phase jedoch zerstört werden, vorausgesetzt dass die Unordnung „stark“ genug ist.

Im oben angegebenen RTISM drückt sich die Unordnung durch die zufälligen Kopplungen  $J_i$  und  $h_i$  aus<sup>12</sup>. Der Ordnungsparameter dieses Systems ist

$$\delta = \frac{[\ln h]_{av} - [\ln J]_{av}}{\text{var}[\ln h] + \text{var}[\ln J]} ,$$

wobei  $[\dots]_{av}$  die Mittlung bzgl. der Unordnung bezeichnet.  $\text{var}(\dots)$  ist die Varianz der Wahrscheinlichkeitsverteilungen.

Der QPÜ zeigt sich beim Übergang von  $\delta < 0$  (ferromagnetisch) zu  $\delta > 0$  (Quantenparamagnetisch bzw. ohne Spin-Ordnung)<sup>13</sup>. Die Präsenz der Unordnung zerstört also die magnetische Ordnung bei  $T = 0$ .

Am Quanten-kritischen Punkt<sup>14</sup> wächst die Breite der Verteilungen der Kopplungskonstanten über alle Grenzen beim Übergang zu immer niedrigeren Energieskalen in der Renormierungsgruppen Analyse<sup>15</sup>. Mit den breiter werdenden Verteilungen wächst auch

<sup>8</sup>Eine kurze Einführung in die Theorie der Renormierung bildet den Anfang von Kapitel 3.

<sup>9</sup>Ein Beispiel für ein spinloses, eindimensionales Modell mit Quantenphasenübergang ist das *Holstein* Modell [5].

<sup>10</sup>d.h. keine Störstellen oder sonstige Verunreinigungen

<sup>11</sup>Die Art der magnetischen Ordnung hängt von der Art (Vorzeichen) der Spin-Spin-Kopplung ab.

<sup>12</sup>Beispiele für Quantenphasenübergänge durch Verunreinigungen findet man in [55, 126, 128, 141]

<sup>13</sup>Weitere Eigenschaften und Resultate der ORG Behandlung des eben geschilderten Modells finden sich in Anhang D.

<sup>14</sup>Dieser Begriff ist reserviert für einen stetigen Phasenübergang im Gegensatz zu einem QPÜ erster Ordnung [126]. Im weiteren Verlauf werden nur Phasenübergänge der erstgenannten Art betrachtet.

<sup>15</sup>Siehe (D.12) in Anhang D.

## 1 Einleitung

die Rolle der Unordnung für das System<sup>16</sup>.

Dies hat letztendlich die erfreuliche Konsequenz, dass in diesem Grenzwert die perturbative Renormierungsmethode exakt wird. Die analytisch gewonnenen Ergebnisse wurden später auch numerisch verifiziert [134].

Mit der Einführung eines nichtlinearen Kontrollparameters kann sogar für die gesamte *Griffiths-Phase*<sup>17</sup> gezeigt werden, dass die Renormierungsgruppe asymptotisch exakt ist [60]. Diese Erfolge motivieren natürlich, verwandte Probleme mittels Renormierungsverfahren anzugehen. So wurde das RTISM in 2 Dimensionen untersucht, hier allerdings nur numerisch [42].

A. L. Chudnovskiy [18] erweiterte das RTISM auf eine fermionische Kette. Statt den Paulimatrizen  $\sigma_i^z$  aus (1.1) treten nun Spin-Operatoren

$$\hat{S}_i = a_{im}^\dagger \sigma_{mn}^z a_{in} = a_{i\uparrow}^\dagger a_{i\uparrow} - a_{i\downarrow}^\dagger a_{i\downarrow}$$

in Erscheinung<sup>18</sup>.

Diese Erweiterung in den fermionischen Raum wird es in Kapitel 2.1 erlauben, eine Brücke zu den oben beschriebenen DMS Systemen zu schlagen, da herkömmliche Methoden und Modelle für Spin-Systeme wegen der starken Verdünnung nicht unmittelbar oder überhaupt nicht anwendbar sind.

Diese Arbeit konzentriert sich auf ein eindimensionales, fermionisches Spin-System, welches mit der oben erwähnten Renormierungsgruppe behandelt werden wird.

Natürlich sind eindimensionale oder quasi eindimensionale Systeme nicht nur eine Beschäftigung für den theoretischen Physiker. (Ungeordnete) Polymere [10], Biomoleküle (DNA) [12, 15], Carbonnanoröhrchen [35, 124, 139, 142] oder optische Gitter<sup>19</sup> [38] sind Anwendungsbeispiele für die theoretischen Modelle der Quantendrähte und eindimensionaler (Spin-) Gitter bzw. Ketten. Diese Systeme sind aktuelle Forschungsschwerpunkte vieler Gruppen im Bereich nanostrukturierter Materie [74, 133], Spintronic [83] oder Biotechnologie [111].

Eine ganz entscheidende Rolle in diesen niederdimensionalen Strukturen spielt das Phänomen der *Anderson Lokalisierung*<sup>20</sup>. Mit der Erkenntnis, dass ungeordnete Systeme in 1D lokalisiert sind, ist das Thema noch lange nicht abgeschlossen [68].

Insbesondere die Auswirkungen von magnetischen Verunreinigungen auf die Transporteigenschaften ist noch aktuelles Forschungsgebiet [9, 77].

Ein Beispiel für Transporteigenschaften durch Nanostrukturen mit magnetischen Verunreinigungen ist in Abbildung 1.3 zu sehen, Bei der Probe handelt es sich um einen

---

<sup>16</sup>Der dazugehörige Fixpunkt wird deshalb auch *infinite randomness fixed point* IRFP genannt [60].

<sup>17</sup>Eine Teil des Zustandsraumes der von seltenen Ereignissen dominiert wird, siehe Anhang D.

<sup>18</sup>Siehe Kapitel 2 für die im folgenden verwendete Notation.

<sup>19</sup>Als Atomfalle beispielsweise für Bose Einstein Kondensate

<sup>20</sup>Wenn im weiteren Verlauf dieser Arbeit von Lokalisierung die Rede ist, wird immer dieser Typus gemeint sein.

## 1 Einleitung

(Ga,Mn)As Quantendraht [43], womit eine Brücke zu den oben beschriebenen DMS geschlagen ist.

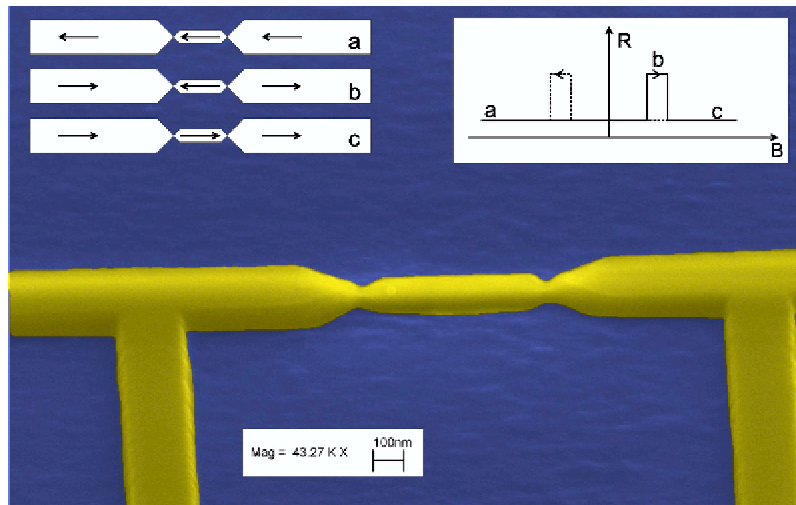


Abbildung 1.3: Falschfarben SEM-Bild. Seitenansicht einer (Ga,Mn)As Probe. Die Einblendung links oben zeigt die relative Magnetisierung. Bild und weitere Details finden sich in [43].

Eine weitere mögliche Realisierung von magnetisch ungeordneten Systemen im Experiment sind Ketten aus (magnetischen) Quantenpunkten [51, 79] oder die bereits erwähnten Kohlenstoff Nanoröhrchen (*carbon nano tubes*) als quasi eindimensionale Strukturen. Die Röhrchen werden mit Fullerenen gefüllt [139], in welche Metall Atome eingebracht werden [142], wie in Abbildung 1.4 zu sehen ist.

### 1.5 Struktur der Arbeit

Diese Doktorarbeit ist wie folgt organisiert:

- In Kapitel 2 wird das in dieser Arbeit behandelte Modell vorgestellt. Es handelt sich um einen Kondogitter-Hamilton Operator mit 3 Typen von zufälligen Kopplungskonstanten (*tJV-Model*). Es folgt eine kurze Diskussion des Modells.
- Kapitel 3 beinhaltet eine kurze Einführung in die Theorie der Renormierungsgruppe. Das in dieser Arbeit verwendete Renormierungsschema, bei dem seltene Ereignisse die Physik dominieren, wird erläutert. Es werden 3 Fälle der Renormierung unterschieden und für alle 3 Fälle die renormierten Kopplungskonstanten berechnet. Die Renormierung und die Analyse des Modells orientiert sich dabei an der Untersuchung des oben eingeführten *random transverse Ising Spin model* (RTISM) in [39] und [40, 41].



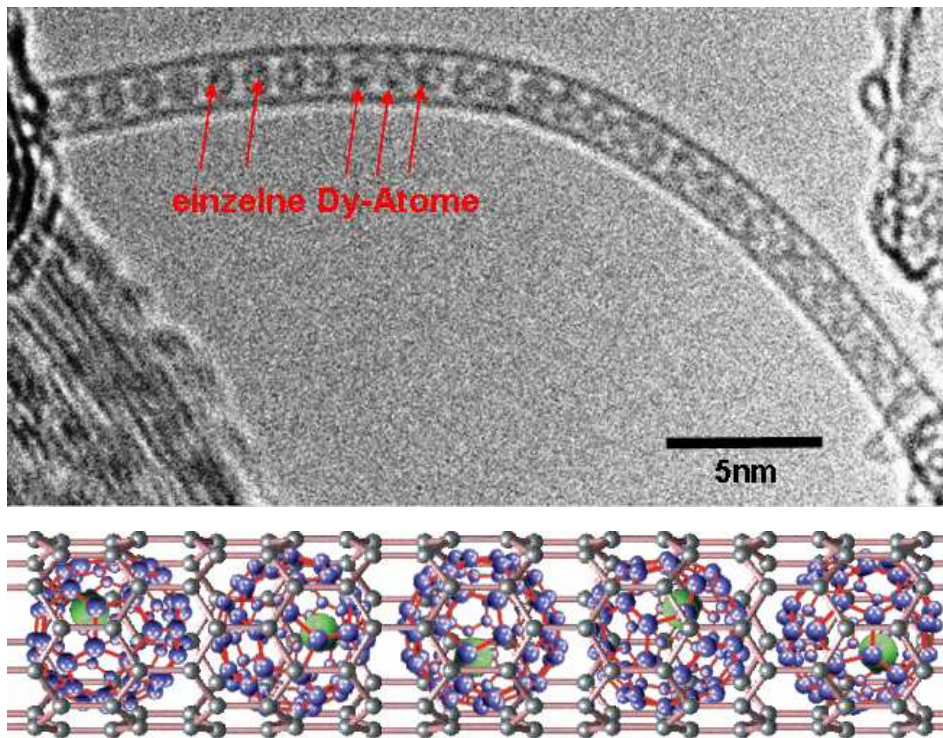


Abbildung 1.4: Kohlenstoff-Nanoröhrchen als Beispiel für ein eindimensionales, magnetisches System. **Oben:** C82-Fullerene gefüllt mit dem seltenen Erd-Element Dysprosium (Schreibweise Dy@C82). Diese werden dann in einwandige Carbonnanoröhrchen (SWNT) eingebracht und bilden eine so genannte *peapod* Struktur (Erbsenschote). **Unten:** Die Molekülstruktur des *peapod* Nanoröhrchens. Bilder mit freundlicher Genehmigung von [142].

- In Kapitel 4 werden Differentialgleichungen für die renormierten Wahrscheinlichkeitsverteilungen der Kopplungen hergeleitet. Diese partiellen, gekoppelten Differentialgleichungen werden für einfache Anfangsverteilungen analytisch gelöst. Des weiteren wird die Energieabhängigkeit der Korrelationslänge des Modells für einen einfachen Fall berechnet.
- In Kapitel 5 wird die Spin-Spin-Korrelationsfunktion besprochen und eine Berechnungsmethode aufgezeigt, die an das Renormierungsschema angepasst ist. Mit den in Kapitel 4 gewonnenen Verteilungsfunktionen wird die Spin-Korrelationsfunktion und damit die magnetische Suszeptibilität als Funktion der Frequenz berechnet.
- In den Anhängen findet sich eine geraffte Herleitung des Pfadintegralkalküls. Es wird der Zusammenhang eines Funktionalintegrals in imaginärer Zeit mit der Zustandssumme aufgezeigt. Die dafür benötigten Grassmannzahlen werden besprochen und einige wichtige Rechenregeln für letztere aufgelistet. Des weiteren fin-

## 1 *Einleitung*

det man die Definition der Laplace-Transformation, die in Kapitel 4 zum Einsatz kommt, sowie die Laplace-Transformierten einiger häufig vorkommender Funktionen. Ein weiterer Teil des Anhangs beschäftigt sich mit eindimensionalen Spin-Systemen, der Griffiths-Phase und stellt einige Ergebnisse der Analyse des RTISM zusammen.

Eine Liste der in der Arbeit häufig verwendeten Abkürzungen findet man auf Seite 101.

## 2 Das Modell

In dieser Arbeit wird ein eindimensionales Spin-Modell mit *eingefrorener* Unordnung betrachtet. Die einzelnen Glieder einer Spinkette bestehen aus lokalisierten Momenten mit zufälligem (Ising-) Spin. Die Wechselwirkung zwischen den Kettengliedern vermitteln *itinerante*, d.h. bewegliche Ladungsträger, im folgendem Löcher<sup>1</sup> genannt. Diese mobilen Löcher bewegen sich entlang der Kette<sup>2</sup> und wechselwirken an jedem Kettenglied mit dem dort sitzenden Spin.

Eine aus diesen Momenten zusammengesetzte Kette mit  $N \gg 1$ <sup>3</sup> lokalen Spins  $S_i$  und itineranten Ladungsträgern mit Spin  $s_i$  kann in der Sprache der zweiten Quantisierung durch folgendes Modell beschrieben werden

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= \sum_i t_i (c_{i\sigma}^\dagger c_{i+1\sigma} + c_{i+1\sigma}^\dagger c_{i\sigma}) + \sum_i J_i S_i s_i + \sum_i V_i n_{i\sigma} \\ &= \sum_i t_i (c_{i\sigma}^\dagger c_{i+1\sigma} + c_{i+1\sigma}^\dagger c_{i\sigma}) + \sum_{imn} J_i a_{im}^\dagger \sigma_{mn}^z a_{in} c_{im}^\dagger \sigma_{mn} c_{in} + \sum_i V_i c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}. \end{aligned} \quad (2.1)$$

Dabei ist nach üblicher Notation

$$\begin{aligned} n_{i\sigma} &= c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} && \text{Teilchendichte am } i \text{ ten Kettenplatz} \\ c_i^\dagger / c_i &&& \text{Erzeugungs/Vernichtungsoperator für ein Teilchen mit Spin } s_i \\ a_i^\dagger / a_i &&& \text{Erzeugungs/Vernichtungsoperator für einen lokalen Spin } S_i \\ \sigma_{mn}^z &&& \text{Pauli Matrix für Spin } S_z = 1/2 \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (2.2)$$

Diese Art von Hamilton Operator findet in vielen Bereichen magnetischer und magnetisch ungeordneter Systeme seine Anwendung [77].

So zum Beispiel für das Kondo-Gitter-Modell [54], ebenso wie für Halbleiter vom Typ EuX (X=O, SE, TE) [89], Systeme mit lokalen magnetischen Momenten wie Gd, Tb oder

<sup>1</sup>Bei dem in der Einleitung motivierten Vorbild des Ladungsträger induzierten Magnetismus bei DMS Systemen sind die mobilen Teilchen tatsächlich Löcher. Für die weiteren Rechnungen spielt die Natur der itineranten Ladungsträger allerdings keine Rolle.

<sup>2</sup>Mit Kette ist immer die Menge der lokalen Spins gemeint. Im Prinzip könnte man das Lochband der itineranten Spins auch als „Kette“ ansehen. Allerdings könnte diese Art der Beschreibung zu irreführenden Assoziationen mit *spin ladder*-Systemen führen.

<sup>3</sup>Entweder betrachtet man periodische Randbedingungen oder wählt N hinreichend groß, so dass bei der im nächsten Kapitel beschriebenen Renormierung keine Probleme mit Randgliedern anfallen.

Dy oder als Doppelaustausch-Modell [2, 123] bei Manganoxiden (z.B.  $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{MnO}_3$ ) zur Berechnung des sogenannten *kolossalen* Magnetowiderstandes und als Gittermodell für das Verständnis des Ferromagnetismus in  $(\text{Ga,Mn})\text{As}$  [24, 25, 103, 122].

In den DMS vom  $(\text{Ga,Mn})\text{As}$ -Typ ist die Dichte der freien Ladungsträger klein, da hier die freien Löcher entweder von Akzeptoren gebunden, von der Unordnung lokalisiert oder von sogenannten *antisite*-Defekten gebunden werden [80]. Deswegen tritt kein Kondo Effekt auf [122].

Auch in dieser Arbeit wird immer angenommen, dass die Dichte der freien Ladungen nicht zur Bildung einer „Kondo-Wolke“ ausreicht, man sich also nicht im Kondo Regime befindet.

## 2.1 Die 3 Terme des Modells

Der erste Term des Modells beschreibt die kinetische Energie der an der Kette entlang „hüpfenden“ freien Ladungsträger im *tight-binding* Bild. Die Größe der Hüpfmatrixelemente  $t_i$  korrespondiert mit dem Abstand der Kettenglieder.

Sind 2 lokale Spins  $S_i$  und  $S_{i+1}$  räumlich nah beieinander, so ist auch der Überlapp der Wellenfunktion der itineranten Ladungsträger groß (s. Abbildung 2.1 rechts). Umgekehrt führt eine größere räumliche Separation zu kleineren Werten für  $t_i$ .

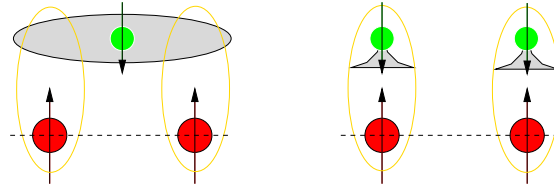


Abbildung 2.1: Skizze: Wechselwirkung zwischen lokalisierten Manganmomenten (rot) und Löchern (grün). Die Wellenfunktion der Löcher ist schematisch als schraffierter Bereich gezeigt. **Links** bilden delokalisierte Löcher [31, 32, 47, 83] eine Fermiflüssigkeit. **Rechts** formen die Ladungsträger ein fast lokalisiertes *tight-binding* Band [9, 25].

Die Wechselwirkung zwischen dem Spin  $s$  eines mobilen Lochs und einem lokalen Moment  $S_i$  besteht nur lokal (siehe Abbildung 2.2) am jeweiligen Platz  $i$  der Kette. Dies drückt sich im zweiten Term von (2.1) aus. Die Wechselwirkung sei antiferromagnetisch, also

$$J_i > 0 \forall i. \quad (2.3)$$

Die Hüpf- oder Tunnelmatrixelemente  $t_i$  sind hier ebenso zufällig wie die Kopplungskonstanten  $J_i$ <sup>4</sup> und werden aus Verteilungsfunktionen gezogen, über die zunächst noch

<sup>4</sup>Die  $J_i$  sind Zahlen und bilden im Gegensatz zum RKKY Modell eine diskretisierte Funktion.

## 2 Das Modell

nichts bekannt ist. Wegen des zentralen Grenzwertsatzes werden für praktische Rechnungen häufig Gaußverteilungen herangezogen, a priori kann man allerdings keine Aussagen über die Gestalt und insbesondere über die Breite der Wahrscheinlichkeitsverteilungen treffen. Auf die Rolle der Verteilungsfunktionen bei ungeordneten Systemen wird später noch eingegangen werden (s. 3.2 und Kapitel 4).

Der letzte Teil des Hamilton Operators (2.1) beschreibt die Abstoßung/Anziehung der Stärke  $V_i$ , wenn sich ein Loch einem bereits besetzten/freien Platz  $i$  der Kette nähert. In Ermangelung eines etablierten deutschen Begriffs wird für diese lokal wirkenden Potentiale der englische Begriff „*on-site* Energien“ verwendet<sup>5</sup>.

Ursprünglich war dieser Zusatz in einem möglichst einfachen, minimalen Modell gar nicht vorgesehen. Die Einbringung von zufälligen *on-site* Energien erwies sich jedoch als notwendig, damit die Renormierungsprozedur geschlossen werden kann. Wie später gezeigt wird, bilden sich Terme  $\propto c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}$  während der Renormierung, auch wenn man zu Beginn der RG

$$V_i = 0 \quad \forall i \tag{2.4}$$

setzt. Diese lokalen Potentiale können positives oder negatives Vorzeichen haben. Da sowohl die Coulomb-Abstoßung als auch die Größe des Spins an den jeweiligen Kettenmitgliedern unterschiedlich sein können, müssen nicht zwangsläufig identische, magnetische Verunreinigungen vorliegen.

Im Rahmen dieser Arbeit betrachten wir nur die möglichen Spineinstellungen  $1/2$  und  $-1/2$  oder „hoch“ und „runter“ (Ising Spin). In realen Systemen, wie den in der Anfangsmotivation eingebrachten DMS, sieht die Sache etwas komplizierter aus.

Die lokalen  $\text{Mn}^{2+}$  besitzen den Spin  $S = 5/2$ <sup>6</sup>, während die Löcher des Akzeptorbandes einen Spin  $F = 3/2$  besitzen und dementsprechend eine Spin-Spin-Wechselwirkung der Form  $S \cdot c_{im}^\dagger \underline{F}_{mn} c_{in}$  haben [26].

Allerdings hat man es nicht unbedingt mit einzelnen  $\text{Mn}^{2+}$ -Ionen zu tun. Numerische und experimentelle Arbeiten [11] weisen darauf hin, dass die Manganionen eine Tendenz zur Clusterbildung besitzen. Statt elementarer Ionen können sich schon bei endlicher Temperatur Cluster gewisser Größe gebildet haben, und die magnetische Ausrichtung dieser Spin Cluster erzeugt dann die magnetische Ordnung [25]. Dies kann man auch in einem Percolationsbild<sup>7</sup> schön visualisieren [85, 86] oder [25].

---

<sup>5</sup>Beispiele für Spin-Modelle mit zufälligen *on-site* Energien zum Studium von Unordnung finden sich in [29, 46] oder [77].

<sup>6</sup>Eine Analyse einer Spinkette mit *impurity* Spin  $S = 5/2$  findet man in [34].

<sup>7</sup>Percolation bedeutet in diesem Fall, dass endlich ausgedehnte Bereiche von orientierten Spins überlappen bis schließlich das gesamte Gebiet spin-ausgerichtet ist.

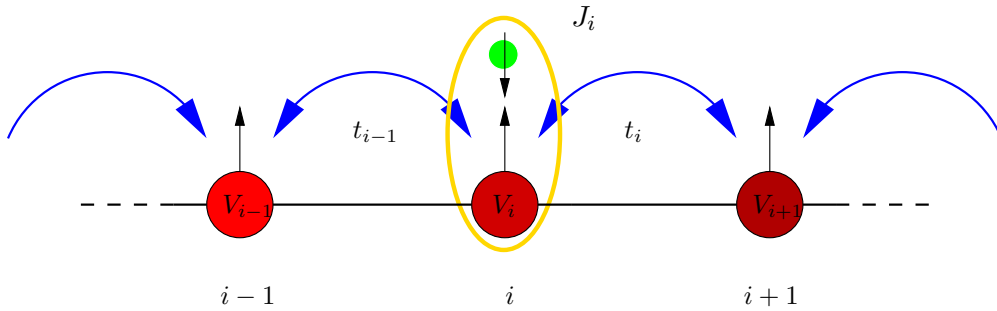


Abbildung 2.2: Ausschnitt der Spinkette mit magnetischen Momenten (große, rote Kreise) mit zufälligen Spin  $S_i$  und mobilen Elektronen/Löchern (grüne, kleine Kreise) mit Spin  $s_i$ . Letztere bewegen sich entlang der Kette und wechselwirken an jedem Glied (gelbes Ovale) mit den lokalen Momenten. In der Skizze liegen alle lokalen Momente äquidistant auseinander. Dies muss bei einer realen Probe nicht der Fall sein. Ein großes Hüpfmatrixelement bedeutet nahe beieinander liegende Momente, während ein kleines  $t$  eine große räumliche Entfernung widerspiegelt. Des weiteren müssen die lokalen Verunreinigungen in einer experimentellen Probe nicht alle gleich sein. Da der absolute Wert  $S_i^z$  in die Kopplungen  $J_i$  absorbiert wurde und die *on-site* Energien  $V_i$  für jedes Kettenglied variieren können (was durch die verschiedenen Farbtöne angedeutet werden soll) sind die einzelnen Kettenglieder nicht identisch.

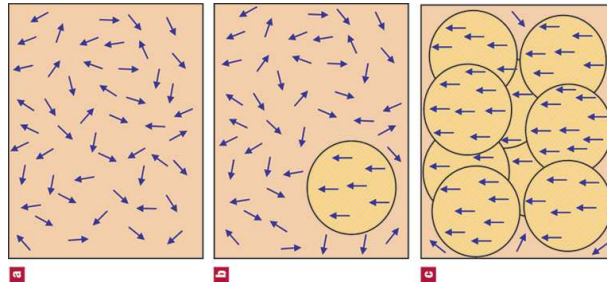


Abbildung 2.3: Bildung von Manganclustern (Percolationsbild). Freie Ladungsträger vermitteln innerhalb eines Radius (Bild b) eine magnetische Ordnung zwischen lokalen Momenten (Pfeile). Beim Absenken der Temperatur beginnen sich die gleich ausgerichteten Inseln zu überlappen (Bild c). Abbildung von A. H. MacDonald *et al* aus [85] und online unter [86].

## 2 *Das Modell*

Da die Verteilung der Ionen im Gitter zufällig ist, muss auch der Gesamtspin dieser Cluster eine Zufallsgröße sein.

Anstatt nun eine Wechselwirkung von Löchern mit zufälligen Spins zu beschreiben, wird der absolute Wert des Spins in die Kopplungskonstante absorbiert und man arbeitet mit zufälligen  $J_i$ , anstelle von zufälligen Spins.

Im Laufe der Renormierungsgruppe werden die einzelnen Spins  $S_i$  ohnehin zu Clustern zusammengefügt, so dass es keine Einschränkung für den Fluss der Kopplungskonstanten darstellt, gleich mit zufälligen Clustern, also zufälligen Kopplungen zu beginnen.

# 3 Renormierung

Die von Wilson [129, 130, 131] und Kadanoff [65] in die Festkörpertheorie eingebrachte Renormierungsgruppe (RG) ist inzwischen ein unverzichtbares Werkzeug im Repertoire des modernen Physikers geworden.

Eine ausführliche Einleitung zur Theorie und Geschichte der RG von Kenneth Wilson findet sich in [130], hier soll eine Kurzfassung genügen.

## 3.1 Die Idee der Renormierung

In einem thermodynamischen System lassen sich alle Informationen durch die freie Energie  $F$  bzw. die Zustandssumme  $\mathcal{Z}$  bestimmen

$$-F = \frac{1}{V} \ln \mathcal{Z} \tag{3.1}$$

mit

$$\mathcal{Z} = Sp e^{-\frac{\mathcal{H}}{kT}}, \tag{3.2}$$

wobei  $Sp$  für die Spurbildung steht.

In praktisch allen Fällen lässt sich  $F$  nur näherungsweise bestimmen, und auch die Berechnung von  $\mathcal{Z}$  ist in der Regel schwierig. Oft interessiert man sich jedoch gar nicht für eine mikroskopisch exakte Beschreibung.

Wenn man beispielsweise einen Kristall mit Licht bestrahlt, können keine Strukturen aufgelöst werden, die kleiner als die halbe Wellenlänge  $\lambda$  sind. Das externe Feld mittelt über die mikroskopischen Details. Für die theoretische Beschreibung dieses Experiments würde also eine effektive Hamiltonfunktion<sup>1</sup> ausreichen, die die Physik auf der durch  $\lambda$  gegebenen Längenskala beschreibt.

Statt der Längen- kann man auch die Energieskala betrachten und nach dem Niederenergieverhalten eines Systems fragen (beispielsweise weil höhere Energiezustände keinen großen Einfluss auf den gerade interessierenden Aspekt haben). Dabei korrespondieren hohe Energien mit kleinen Längen<sup>2</sup>.

Aber wie kann man systematisch zu einem gegebenen Modell  $\mathcal{H}$  einen effektiven Hamilton Operator  $\mathcal{H}'$  konstruieren ?

Hier setzt nun die Theorie der Renormierungsgruppe an. Das typische Renormierungsschema besteht aus 2 Schritten

---

<sup>1</sup>Im später eingeführten Pfadintegralformalismus wird aus  $\mathcal{H}$  eine klassische Hamiltonfunktion  $H$ .

<sup>2</sup>Am einfachsten zu sehen bei Teilchen ohne Wechselwirkung wo für die Energie  $E \sim k^2$  gilt und für den Impuls  $k \sim 1/l$ .



### 3 Renormierung

- Änderung aller linearen Längenskalen um einen konstanten Faktor  $b > 1$ .
- Ausintegration hochenergetischer Freiheitsgrade.

Diese Prozedur bzw. mehrfache Iteration des Renormierungsschemas liefert den im obigen Beispiel angesprochenen effektiven Hamilton Operator  $\mathcal{H}'$ . Die Renormierungsgruppe liefert somit einen systematischen Zugang für typische niederenergetische Eigenschaften (Infrarotverhalten) bzw. das Verhalten auf großen Längenskalen (*long wave length limit*).

Da die RG trotz ihres Namens nur eine Halbgruppe darstellt, ist die Prozedur nicht eindeutig umkehrbar. Eine große Klasse von Systemen kann somit zum selben  $\mathcal{H}'$  führen. Dies beobachtet man auch im Experiment. Viele mikroskopisch unterschiedliche Systeme zeigen dasselbe Infrarotverhalten, was als *Universalität* bezeichnet wird.

Phasenübergänge zweiter Ordnung sind das wohl beste physikalische Beispiel, bei denen sich universales Verhalten in der Natur zeigt.

Viele Theorien lassen sich zu *Universalitätsklassen* zusammenfassen. Charakteristisch für die verschiedenen Klassen sind die so genannten *kritischen Exponenten*, die das universale Verhalten von thermodynamischen Größen in der Nähe des Phasenübergangs beschreiben. Entsprechend kann man mit diesen Exponenten diverse Phasenübergänge klassifizieren.

Ein Beispiel für einen kritischen Exponenten<sup>3</sup> ist das Verhalten der Korrelationslänge  $\xi$

$$\xi(T) \propto (T - T_C)^\nu . \quad (3.3)$$

Hierbei ist  $T_C$  die kritische Temperatur<sup>4</sup> und  $\nu$  der besagte kritische Exponent. Die Definition in Bezug auf die Temperatur ist in der Literatur beliebt, aber keineswegs notwendig. Im Fall eines Quantenphasenübergangs ( $T = 0$ ) wird beispielsweise anstelle der Temperatur ein geeigneter Kontrollparameter verwendet (s. Anhang ab Seite 93). Für das Modell (2.1) wird das typische Skalenverhalten der Korrelationslänge in Kapitel 4.6.2 berechnet.

Da bei *mean field*-Methoden Fluktuationen vernachlässigt werden, liefert die Renormierungsgruppe in aller Regel bessere Vorhersagen für die kritischen Exponenten. Darüber hinaus kann man mittels Skalierungsüberlegungen auch Beziehungen zwischen den Exponenten ableiten [17, 50], beispielsweise<sup>5</sup>

$$2 - \alpha = 2\beta + \gamma = \beta(\delta + 1) \quad (3.4)$$

$$2 - \alpha = d\nu . \quad (3.5)$$

---

<sup>3</sup>Die Definition der in der Literatur üblichen Exponenten findet man im Anhang auf Seite 93.

<sup>4</sup>Beispielsweise die Curie-Temperatur bei ferromagnetischen Systemen.

<sup>5</sup>Im Anhang D findet man die analytisch gewonnenen Zahlenwerte für das RTISM.

### 3 Renormierung

Hierbei ist  $d$  die Dimension (in dieser Arbeit also  $d = 1$ ),  $\beta$  ist der kritische Exponent der longitudinalen Magnetisierung,  $\alpha$  der Exponent der statischen Suszeptibilität.

Aber nochmals zurück zum Prinzip der Renormierung. Die Dezimierung oder „Ausdünnung“ der Freiheitsgrade führt dazu, dass  $\mathcal{H}'$  (teilweise) über neue, sprich renormierte Kopplungskonstanten  $K$  verfügt

$$\begin{aligned} RG : K &\rightarrow \tilde{K} \\ \mathcal{H}(\{K\}) &\rightarrow \mathcal{H}'(\{\tilde{K}\}) . \end{aligned} \tag{3.6}$$

Dabei unterscheiden sich  $\mathcal{H}$  von  $\mathcal{H}'$  maximal durch eine additive Konstante. Eine solche Konstante ist jedoch für alle anderen messbaren Größen, die ja als Ableitung von  $\ln \mathcal{Z}$  geschrieben werden können, irrelevant. Es ist

$$\mathcal{H}(K'_\Omega) = b \mathcal{H}' \tag{3.7}$$

mit  $K'_\Omega = K_\Omega/b$ .

Gleichung (3.7) ist die Renormierungsgruppen-Transformation.

In dieser Arbeit wird nicht mit der Länge sondern mit der Energiskala<sup>6</sup> gearbeitet. Betrachtet man die größte Kopplung aus  $\{K\}$  als Energie *cut-off* – kenntlich gemacht durch den Index  $\Omega$ :  $K_\Omega$  – und integriert über eine Energieschale  $\{K_\Omega, K_\Omega - d\Omega\}$  (s. Abbildung 3.1), so erhält man nach der Reskalierung der Energieskala den gesuchten, effektiven Hamilton Operator.

Die Änderung der Kopplungskonstanten mit der Energie (oder der Längenskala), auf der man das System beschreibt, enthält dabei wichtige Informationen über das System. In praktisch allen Fällen, bei denen das Spektrum keine endliche Energielücke aufweist, lässt sich die Energie kontinuierlich ändern und man erhält als Resultat der RG ein System von Differentialgleichungen, die den so genannten *Fluss* der Kopplungen mit der Energie beschreiben. Diese Gleichungen nennt man auch Flussgleichungen. Lösen der Flussgleichungen bzw. Iteration der RG Transformation  $K \rightarrow \tilde{K}$  führt auf Fixpunkte im Raum der Kopplungskonstanten. Diese Fixpunkte kann man mit den Phasen des Systems in Beziehung setzen.

Am bekanntesten dürfte wohl das Beispiel des Ising Modells in einer Dimension sein. Dort liefert die RG 2 Fixpunkte. Einer gehört zu  $T = \infty$  und steht damit für die ungeordnete, paramagnetische Phase. Der zweite Fixpunkt gehört zu  $T = 0$  und bezieht sich damit auf die geordnete, ferromagnetische Phase. Der erste Fixpunkt ist stabil, der zweite jedoch nicht, so dass für alle Fälle außer  $T = 0$  das System unter der RG zu dem Fixpunkt  $T = \infty$  strebt.

---

<sup>6</sup>In manchen Fällen, beispielsweise bei einem ballistischen Propagator, skalieren Längen- und Energieskalen gleich. Allgemein muss dies nicht der Fall sein.

### 3 Renormierung

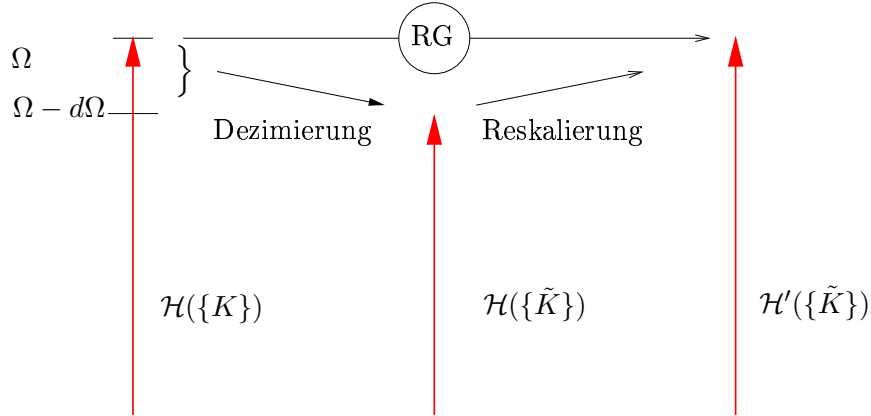


Abbildung 3.1: Schematische Darstellung der Renormierung: Dezimierung und Reskalierung. Eine Energieschale  $\{\Omega, \Omega - d\Omega\}$  wird ausintegriert (erster Schritt). Um den neuen Hamilton Operator mit dem alten vergleichen zu können, muss wieder auf die ursprüngliche Energie reskaliert werden (zweiter Schritt). Beides zusammen ergibt die RG Transformation  $RG : H \rightarrow H'$ .

Für die weitere physikalische Diskussion der Fixpunkte wird auf die einschlägige Literatur verwiesen.

Da in dieser Arbeit die Kopplungen zufällig sind, geht es hier primär um die Verteilungsfunktionen und um deren Evolution unter der RG.

## 3.2 Ausintegration eines Kettengliedes

Da es sich bei (2.1) um ein System mit zufälligen Kopplungen handelt, interessieren vor allem die Verteilungsfunktionen. Man erwartet, dass (2.1) einen quantenkritischen Punkt aufweist. An diesem Punkt wird das System durch Kopplungskonstanten beschrieben, die aus so genannten *kritischen Verteilungen* gezogen werden. Die Renormierungsgruppen Methode wird benutzt, um letztendlich eine Differentialgleichung für diese kritischen Verteilungen herzuleiten.

Dazu muss man zunächst wissen, wie sich die Kopplungskonstanten ändern, wenn die Energie des Modells (2.1) abgesenkt wird.

Da alle Kopplungskonstanten bei dem hier betrachteten Fall Realisierung einer Zufallsverteilung sind, ändern sich bei jedem Schritt auch die Verteilungen. Von der ursprünglichen Verteilung der Kopplungen des mikroskopischen Systems gelangt man am Fixpunkt zu einer neuen, hier kritisch genannte Verteilung für jeden Typ von Kopplung.

Die größte Energie des Systems bei jedem Renormierungsschritt wird in dieser Arbeit mit  $\Omega$  bezeichnet. Die Anfangsenergie ist  $\Omega_I$ .

Als Energieskala wird im weiteren Verlauf

### 3 Renormierung

$$\Omega_I = 1 \tag{3.8}$$

gesetzt. Die „laufende“ Energieskala ist durch  $\Omega < \Omega_I$  gegeben. Das bedeutet, dass bei gegebener Energie  $\Omega$  alle Kopplungen<sup>7</sup>  $K \leq \Omega$  sind, wobei

$$K \in \{t_i, V_i, J_i\} \tag{3.9}$$

als Abkürzung für die Kopplungskonstanten des Modells (2.1) benutzt wird.

Bei breiten Verteilungen (s. Abbildung 3.2) der Kopplungen, die in Zukunft vorausgesetzt werden, ist bei jedem endlichen Kettenabschnitt die Wahrscheinlichkeit vernachlässigbar klein, dass 2 Kopplungskonstanten gleich  $\Omega$  sind. Diese großen und damit seltenen Kopplungen spielen also für die Renormierung eine besonders wichtige Rolle (s. 3.2.1), da sie den *cut-off* bestimmen.

Im weitem Verlauf wird davon ausgegangen, dass genau eine Kopplung  $t_i$ ,  $J_i$  oder  $V_i$  in einem gegebenen Ausschnitt der Kette den Wert  $\Omega$  besitzt (vorausgesetzt dieser Fall tritt überhaupt ein<sup>8</sup>!) und alle benachbarten  $K$ 's viel kleiner sind.

$$K_i = \Omega \quad ; \quad K_j \ll K_i \quad (i \neq j \forall j) \tag{3.10}$$

Dies ist der entscheidende Punkt des hier verwendeten Renormierungsschemas!

Da alle anderen Kopplungen auf benachbarten Kettengliedern viel kleiner als  $K$  sind, kann man diesen Abschnitt der Kette isoliert betrachten und störungstheoretisch behandeln.

Es ist a priori nicht klar, ob die Annahme breiter Wahrscheinlichkeitsverteilungen gerechtfertigt ist! Vielmehr muss man prüfen, ob das Resultat mit dieser Anfangshypothese verträglich ist.

#### 3.2.1 Seltene Ereignisse

Die Welt des Eindimensionalen unterscheidet sich in vielen Dingen stark von Räumen höherer Dimension. Dies zeigt sich auch bei der hier verwendeten RG Prozedur, da diese von *seltenen Ereignissen* dominiert wird.

Große Kopplungen – was hohen Energien entspricht – sind selten<sup>9</sup> und liegen in den Ausläufern der Zufallsverteilungen. Man könnte deshalb annehmen, dass diese Kopplungen keinen oder nur einen sehr geringen Einfluss auf die Physik des Systems haben. Dies ist in einer Dimension nicht mehr richtig.

Wenn ein Kettenglied eine große Kopplung  $K$  trägt, kann diese nicht „umgangen“ werden. Die Löcher können ja nur von einem zum nächsten Gitterplatz springen.

Bildlich gesprochen gibt es in einer Dimension keinen Platz um auszuweichen.

---

<sup>7</sup>Die Kopplungen haben alle die Dimension einer Energie.

<sup>8</sup>Da große Kopplungen mit kleiner Wahrscheinlichkeit vorkommen, wird ein typischer Kettenabschnitt nur Kopplungen  $K \ll \Omega$  aufweisen.

<sup>9</sup>Unter der Annahme breiter Verteilungen.

### 3 Renormierung

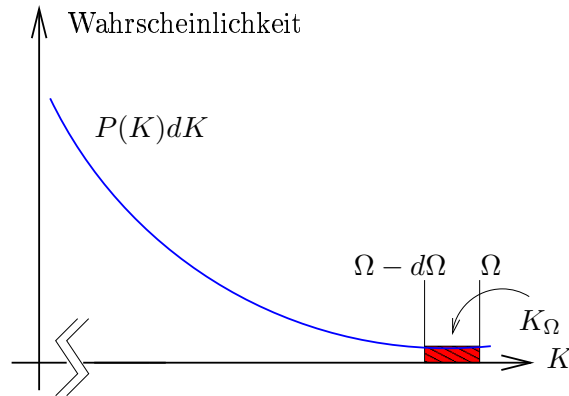


Abbildung 3.2: Die großen, zu dezimierenden Kopplungen liegen in den Ausläufern der Wahrscheinlichkeitsverteilungen (hier pauschal mit  $P$  bezeichnet). Normalerweise würde man erwarten, dass diese seltenen Kopplungen keinen wesentlichen Beitrag zu physikalisch zugänglichen Größen liefern würden. In eindimensionalen Systemen ist dies jedoch nicht der Fall. Da große Kopplungen  $K \sim \Omega$  nur mit geringer Wahrscheinlichkeit vorkommen, ist es praktisch ausgeschlossen, dass 2 Kopplungen der Größenordnung  $\Omega$  direkt benachbart in der Spinkette auftauchen.

Im Anhang D findet man unter D.1 mehr Informationen zu seltenen Ereignissen in Spinketten.

### 3.3 Die Zustandssumme

Das betrachtete Modell (2.1) besteht aus einer Kette mit unendlich vielen (sehr vielen) lokalen Spins. Zu jedem Glied  $i$  der Kette gehören 3 Kopplungskonstanten:

- ein lokales Potential  $V$
- die lokale antiferromagnetische WW  $J$  mit dem Spin und den beweglichen Löchern
- das Hüpfmatrixelement  $t$ , welches den Gitterplatz mit seinem rechten Nachbarn koppelt.

Falls nun ein Kettenabschnitt eine (und nach obigen Überlegungen nur eine) Kopplung der Größenordnung  $K \sim \Omega$  besitzt, muss man 3 Fälle unterscheiden

- $V_i \equiv \Omega = K_\Omega$  oder
- $J_i \equiv \Omega = K_\Omega$  oder
- $t_i \equiv \Omega = K_\Omega$

### 3 Renormierung

$K_\Omega$  wird als Energie *cut-off* genommen und die dazugehörigen Freiheitsgrade ausintegriert. Das heisst, dass zusammen mit der Kopplungskonstanten auch das entsprechende Kettenglied ausintegriert bzw. dezimiert wird. Die Kette ist um ein Glied kürzer. Im Falle eines Hüpfmatrixelements werden 2 Kettenglieder simultan dezimiert.

Da die  $t_i$ 's nur jeweils nächste Nachbarn verbinden, beeinflusst die Dezimierung des Gliedes  $i$  nur die Glieder  $i - 1$  und  $i + 1$  (beziehungsweise die Glieder  $i - 1$  und  $i + 2$ , wenn die Kopplung  $t_i$  selbst ausintegriert wird).

Die zu den anderen Gliedern der Kette gehörenden Kopplungskonstanten werden von der Dezimierung des  $i$ 'ten Gliedes nicht beeinflusst, also nicht renormiert.

Das Schema der Dezimierung ist als Skizze auf Seite 24 (Renormierung von  $V_i$  oder  $J_i$ ) und Seite 29 (Renormierung von  $t_i$ ) zu finden.

Für die Integration der Hochenergiefreiheitsgrade empfiehlt sich die Darstellung der großkanonischen Zustandssumme als Pfadintegral (s. Anhang A für Theorie und Definition des Pfadintegralformalismus). Die Integration über die zu dezimierenden Freiheitsgrade kann dann in allen 3 Fällen auf eine Gaußintegration zurückgeführt werden.

Der Hamilton Operator aus (2.1) mit 2 Typen von fermionischen Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren für den lokalisierten Spin und das mobile Loch

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}[c_{i\sigma}^\dagger, c_{i\sigma}; a_{i\sigma}^\dagger, a_{i\sigma}] \quad (3.11)$$

geht im Pfadintegral über in eine Hamilton Funktion

$$H = H[\bar{\psi}_{i\sigma}\psi_{i\sigma}; \bar{\phi}_{i\sigma}\phi_{i\sigma}]. \quad (3.12)$$

Falls nicht explizit nach Spin unterschieden wird, ist immer über den Spinindex  $\sigma = \uparrow, \downarrow$  zu summieren.

Die Fermifeldoperatoren der itineranten Ladungsträger  $\{c_{i\sigma}^\dagger, c_{i\sigma}\}$  werden durch Grassmannfelder  $\{\bar{\psi}_{i\sigma}, \psi_{i\sigma}\}$ , die der lokalisierten Momente  $\{a_{i\sigma}^\dagger, a_{i\sigma}\}$  durch  $\{\bar{\phi}_{i\sigma}, \phi_{i\sigma}\}$  ersetzt. Die Eigenschaften von Grassmannzahlen und die benötigte Gaußidentität für Grassmannfelder sind im Anhang B aufgelistet.

In dieser Arbeit wird der Pfadintegralformalismus für imaginäre Zeiten [78, 88, 123] verwendet, alle Felder erhalten deswegen noch einen Index  $\tau$  für die Abhängigkeit von der rein imaginären „Zeit“

$$\tau = it. \quad (3.13)$$

Die Zustandssumme  $\mathcal{Z}$  als Pfadintegral ist nach Anhang A

$$\mathcal{Z} = \int D[\bar{\psi}_{i\sigma}, \psi_{i\sigma}] D[\bar{\phi}_{i\sigma}, \phi_{i\sigma}] e^{-A[\bar{\psi}_{i\sigma}\psi_{i\sigma}\bar{\phi}_{i\sigma}\phi_{i\sigma}]} \quad (3.14)$$

### 3 Renormierung

mit der Wirkung<sup>10</sup>

$$A[\bar{\psi}_{i\sigma} \psi_{i\sigma} \bar{\phi}_{i\sigma} \phi_{i\sigma}] = - \int_0^\beta d\tau \sum_{i,\sigma} \left\{ \bar{\psi}_{i\sigma}^\tau (-\partial_\tau + \mu) \psi_{i\sigma}^\tau + \bar{\phi}_{i\sigma}^\tau (-\partial_\tau + \mu_S) \phi_{i\sigma}^\tau \right. \\ \left. + H[\bar{\psi}_{i\sigma}^\tau \psi_{i\sigma}^\tau; \bar{\phi}_{i\sigma}^\tau \phi_{i\sigma}^\tau] \right\}. \quad (3.15)$$

Der Hamilton Operator (2.1) als Funktion der Grassmannvariablen ist ausgeschrieben

$$H[\bar{\psi}_{i\sigma}^\tau \psi_{i\sigma}^\tau; \bar{\phi}_{i\sigma}^\tau \phi_{i\sigma}^\tau] = \sum_{i\sigma} V_i \bar{\psi}_{i\sigma}^\tau \psi_{i\sigma}^\tau + \\ J_i (\bar{\psi}_{i\sigma}^\tau \underline{\sigma}^z \psi_{i\sigma}^\tau) (\bar{\phi}_{i\sigma}^\tau \underline{\sigma}^z \phi_{i\sigma}^\tau) + \\ t_i (\bar{\psi}_{i\sigma}^\tau \psi_{i+1\sigma}^\tau + h.c.). \quad (3.16)$$

Zu beachten ist dabei, dass das „chemische Potential“  $\mu_S$  rein imaginär ist (siehe Anhang A.3). In den folgenden Unterkapiteln werden die renormierten Kopplungskonstanten hergeleitet.

- Die Dezimierung einer *on-site* Energie kann direkt mittels Gaußintegration durchgeführt werden.
- Darauf folgt die Dezimierung eines Hüpfmatrizelements. Hier müssen 2 Kettenglieder simultan betrachtet werden. Durch eine Koordinatentransformation wird das Problem wieder auf die Dezimierung eines Kettengliedes zurückgeführt. Die weitere Rechnung ist damit analog zum ersten Fall.
- Für die Integration eines  $J_i$  müssen die Freiheitsgrade für die durch  $c_i$  und  $a_i$  beschriebenen Teilchen erst mittels Hilfsfeldern entkoppelt werden, bevor das entsprechende Kettenglied ausintegriert wird. Die eigentliche Schwierigkeit besteht dann in der Bestimmung dieser Hilfsfelder.

---

<sup>10</sup>Englisch A für *Action*

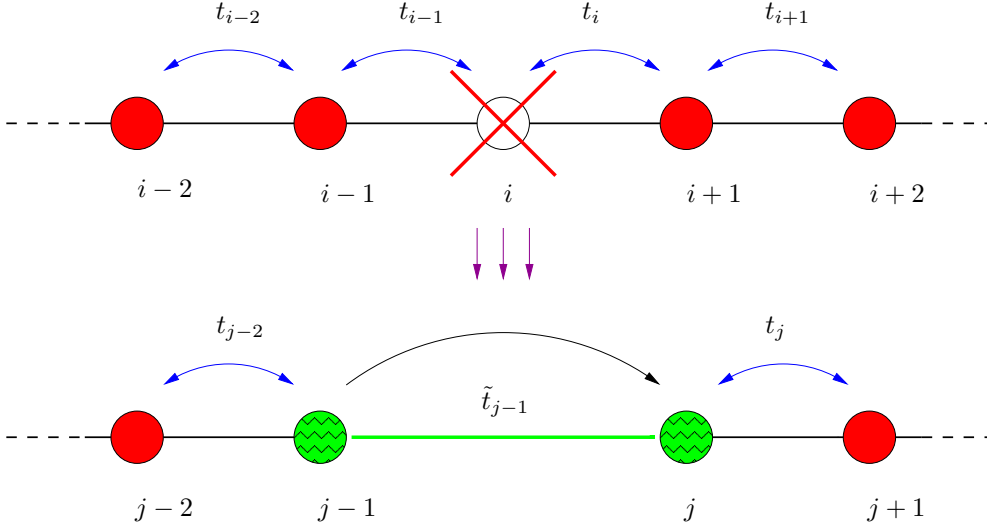
3.4 Renormierung von  $V_i$ 


Abbildung 3.3: Schematische Darstellung der Renormierung der Kette (1): Das  $i$ 'te Glied der Kette (rot durchgestrichen) besitzt lokal die größte Kopplungskonstante  $J_i = \Omega$  oder  $V_i = \Omega$  (nicht eingezeichnet), die damit zum Energie *cut-off* wird. Nach der Integration der entsprechenden Freiheitsgrade besitzt die Kette ein Glied weniger und wird neu durchnummeriert. Die Kettenglieder ganz links und ganz rechts im Ausschnitt (unteres Bild) sind von diesem Renormierungsschritt nicht beeinflusst worden. Die Glieder  $j$  und  $j-1$  (grün/Zackenmuster) werden durch ein neues Hüpfmatrixelement miteinander gekoppelt und tragen renormierte Größen für  $V_j = \tilde{V}_{i+1}$  und  $V_{j-1} = \tilde{V}_{i-1}$ .

Die Renormierung eines lokalen Potentials ist am einfachsten auszuführen.

Sei also

$$K_\Omega = |V_i| \equiv \Omega$$

die vom Betrag her grösste Kopplung. Da nur Nächst-Nachbar-Kopplung vorliegt, müssen in der Zustandssumme (3.14) nur die Anteile mit Index  $i$  und  $i \pm 1$  betrachtet werden:

$$\begin{aligned} \mathcal{Z}_{i-1,i,i+1} = & \int D[\bar{\psi}_{i-1\sigma}^\tau \psi_{i-1\sigma}^\tau] D[\bar{\phi}_{i-1\sigma}^\tau \phi_{i-1\sigma}^\tau] D[\bar{\psi}_{i\sigma}^\tau \psi_{i\sigma}^\tau] D[\bar{\phi}_{i\sigma}^\tau \phi_{i\sigma}^\tau] \\ & D[\bar{\psi}_{i+1\sigma}^\tau \psi_{i+1\sigma}^\tau] D[\bar{\phi}_{i+1\sigma}^\tau \phi_{i+1\sigma}^\tau] \\ & \times e^{-A[\bar{\psi}_{i-1\sigma}^\tau \psi_{i-1\sigma}^\tau \bar{\phi}_{i-1\sigma}^\tau \phi_{i-1\sigma}^\tau]} \\ & \times e^{-A[\bar{\psi}_{i\sigma}^\tau \psi_{i\sigma}^\tau \bar{\phi}_{i\sigma}^\tau \phi_{i\sigma}^\tau]} \\ & \times e^{-A[\bar{\psi}_{i+1\sigma}^\tau \psi_{i+1\sigma}^\tau \bar{\phi}_{i+1\sigma}^\tau \phi_{i+1\sigma}^\tau]} . \end{aligned} \quad (3.17)$$



### 3 Renormierung

Die Wirkung im Exponenten von (3.17) enthält die 11 Terme

$$\bar{\psi}_{i-1\sigma}^\tau (-\partial_\tau + \mu) \psi_{i-1\sigma}^\tau + \bar{\phi}_{i-1\sigma}^\tau (-\partial_\tau + \mu_S) \phi_{i-1\sigma}^\tau \quad (3.18)$$

$$+ \bar{\psi}_{i\sigma}^\tau (-\partial_\tau + \mu) \psi_{i\sigma}^\tau + \bar{\phi}_{i\sigma}^\tau (-\partial_\tau + \mu_S) \phi_{i\sigma}^\tau \quad (3.19)$$

$$+ \bar{\psi}_{i+1\sigma}^\tau (-\partial_\tau + \mu) \psi_{i+1\sigma}^\tau + \bar{\phi}_{i+1\sigma}^\tau (-\partial_\tau + \mu_S) \phi_{i+1\sigma}^\tau \quad (3.20)$$

$$- V_{i-1} \bar{\psi}_{i-1\sigma}^\tau \psi_{i-1\sigma}^\tau \quad (3.21)$$

$$- \Omega \bar{\psi}_{i\sigma}^\tau \psi_{i\sigma}^\tau \quad (3.22)$$

$$- V_{i+1} \bar{\psi}_{i+1\sigma}^\tau \psi_{i+1\sigma}^\tau \quad (3.23)$$

$$- J_{i-1} (\bar{\psi}_{i-1\sigma}^\tau \underline{\sigma}^z \psi_{i-1\sigma}^\tau) (\bar{\phi}_{i-1\sigma}^\tau \underline{\sigma}^z \phi_{i+1\sigma}^\tau) \quad (3.24)$$

$$- J_i (\bar{\psi}_{i\sigma}^\tau \underline{\sigma}^z \psi_{i\sigma}^\tau) (\bar{\phi}_{i\sigma}^\tau \underline{\sigma}^z \phi_{i\sigma}^\tau) \quad (3.25)$$

$$- J_{i+1} (\bar{\psi}_{i+1\sigma}^\tau \underline{\sigma}^z \psi_{i+1\sigma}^\tau) (\bar{\phi}_{i+1\sigma}^\tau \underline{\sigma}^z \phi_{i-1\sigma}^\tau) \quad (3.26)$$

$$- t_{i-1} (\bar{\psi}_{i-1\sigma}^\tau \psi_{i\sigma}^\tau + \bar{\psi}_{i\sigma}^\tau \psi_{i-1\sigma}^\tau) \quad (3.27)$$

$$- t_i (\bar{\psi}_{i\sigma}^\tau \psi_{i+1\sigma}^\tau + \bar{\psi}_{i+1\sigma}^\tau \psi_{i\sigma}^\tau) . \quad (3.28)$$

Für die zu dezimierende Kopplung wurde schon  $\Omega$  als Energie *cut-off* eingesetzt. Die 2 Terme (3.22) und (3.25) kann man zusammenfassen und  $\Omega$  ausklammern. Nach Spineinstellung aufgelöst gibt dies

$$\begin{aligned} & \Omega \bar{\psi}_{i\uparrow}^\tau \psi_{i\uparrow}^\tau \left( 1 - \frac{J_i \bar{\phi}_{i\sigma}^\tau \underline{\sigma}^z \phi_{i\sigma}^\tau}{\Omega} \right) \\ & \Omega \bar{\psi}_{i\downarrow}^\tau \psi_{i\downarrow}^\tau \left( 1 + \frac{J_i \bar{\phi}_{i\sigma}^\tau \underline{\sigma}^z \phi_{i\sigma}^\tau}{\Omega} \right) . \end{aligned} \quad (3.29)$$

Wegen  $\Omega \gg J_i$  ist auch  $1 \gg \frac{J_i}{\Omega}$ . Die Terme in Klammern in (3.29) sind deshalb in guter Näherung gleich eins.

Der Freiheitsgrad von den lokalen Momenten  $\bar{\phi}_{i\sigma}, \phi_{i\sigma}$  entkoppelt in dieser Näherung von den Feldern der beweglichen Löcher, und man muss für die weitere Rechnung nur die von den Feldern  $\bar{\psi}_{i\sigma}$  und  $\psi_{i\sigma}$  abhängenden Terme in (3.18) – (3.28) mitnehmen.

Vom Pfadintegral (3.17) werden die 4 Felder  $\bar{\psi}_{i\uparrow}^\tau, \psi_{i\uparrow}^\tau, \bar{\psi}_{i\downarrow}^\tau$  und  $\psi_{i\downarrow}^\tau$  ausintegriert. Eine explizite Spinaufschlüsselung ist in diesem Abschnitt nicht mehr nötig.

Das zu berechnende Integral ist quadratisch in  $\psi_i$ . Zur besseren Übersicht wird nur der interessierende Teil niedergeschrieben:

### 3 Renormierung

$$\begin{aligned}
\mathcal{Z}_i &= \int D[\bar{\psi}_{i\sigma}^\tau \psi_{i\sigma}^\tau] e^{\int d\tau \sum_{i\sigma} \{ \bar{\psi}_{i\sigma}^\tau (-\partial_\tau + \mu) \psi_{i\sigma}^\tau \\
&\quad \times e^{-\Omega \bar{\psi}_{i\sigma}^\tau \psi_{i\sigma}^\tau} \\
&\quad \times e^{-t_{i-1} (\bar{\psi}_{i-1\sigma}^\tau \psi_{i\sigma}^\tau + \bar{\psi}_{i\sigma}^\tau \psi_{i-1\sigma}^\tau) - t_i (\bar{\psi}_{i+1\sigma}^\tau \psi_{i\sigma}^\tau + \bar{\psi}_{i\sigma}^\tau \psi_{i+1\sigma}^\tau) \}} \quad (3.30) \\
&= \int D[\bar{\psi}_{i\sigma}^\tau \psi_{i\sigma}^\tau] e^{\int d\tau \sum_{i\sigma} \{ \bar{\psi}_{i\sigma}^\tau (-\partial_\tau + \mu - \Omega) \psi_{i\sigma}^\tau \\
&\quad \times e^{-t_{i-1} (\bar{\psi}_{i-1\sigma}^\tau \psi_{i\sigma}^\tau + \bar{\psi}_{i\sigma}^\tau \psi_{i-1\sigma}^\tau) - t_i (\bar{\psi}_{i+1\sigma}^\tau \psi_{i\sigma}^\tau + \bar{\psi}_{i\sigma}^\tau \psi_{i+1\sigma}^\tau) \}} .
\end{aligned}$$

Dieses Integral kann exakt mittels Gaußintegration für Grassmanvariablen gelöst werden. Die benötigte Formel lautet

$$\begin{aligned}
\int D[\bar{\eta}\eta] \exp[-\bar{\eta} \underline{A} \eta + \bar{\nu}\eta + \bar{\nu}\eta] &= \det(\underline{A}) \exp[\bar{\nu} \underline{A}^{-1} \nu] \quad (3.31) \\
&= \exp[\bar{\nu} \underline{A}^{-1} \nu + \ln(\det(\underline{A}))] .
\end{aligned}$$

Der Vergleich von (3.31) mit (3.30) gibt die Identifizierung<sup>11</sup>

$$\bar{\eta} = \bar{\psi}_{i\sigma} \quad (3.32)$$

$$\eta = \psi_{i\sigma} \quad (3.33)$$

$$\bar{\nu} = -t_i \bar{\psi}_{i+1\sigma}^\tau - t_{i-1} \bar{\psi}_{i-1\sigma}^\tau \quad (3.34)$$

$$\nu = -t_i \psi_{i+1\sigma}^\tau - t_{i-1} \psi_{i-1\sigma}^\tau \quad (3.35)$$

$$\underline{A} = (\partial_\tau - \mu + \Omega) \underline{\text{id}}_2 . \quad (3.36)$$

In diesem Fall ist die Matrix  $\underline{A}$  diagonal. Da  $\underline{A}$  einen Differentialoperator enthält, wird eine Fouriertransformation bzgl.  $\tau$  durchgeführt, um  $\partial_\tau$  durch seine Eigenwerte ersetzen zu können.

Die Matrix  $\underline{A}$  erhält so die Form

$$\underline{A}(\omega_n) = (-i\omega_n - \mu + \Omega) . \quad (3.37)$$

Dabei sind  $\omega_n = \frac{(2n+1)\pi}{\beta}$  die fermionischen Matsubarafrequenzen (s. Anhang A.4).

Die inverse Matrix ist somit einfach

$$\underline{A}^{-1} = \frac{1}{-i\omega_n - \mu + \Omega} \quad (3.38)$$

<sup>11</sup> $\underline{\text{id}}_2$  ist die Einheitsmatrix im  $\mathbb{R}^2$ . Da Matrizen durch einen Unterstrich eindeutig gekennzeichnet sind, wird  $\underline{\text{id}}_2$  im folgenden weggelassen.

### 3 Renormierung

und nach (3.31) ergibt sich für das Integral  $\mathcal{Z}_i$ <sup>12</sup>

$$\begin{aligned}\mathcal{Z}_i &= e^{\bar{\nu} \underline{A}^{-1}(\omega_n) \nu + \ln(\det(\underline{A}(\omega_n)))} \\ &= e^{(-t_i \bar{\psi}_i^{\omega_n} - t_{i-1} \bar{\psi}_{i-1}^{\omega_n}) \frac{1}{-i\omega_n - \mu + \Omega} (-t_i \psi_i^{\omega_n} - t_{i-1} \psi_{i-1}^{\omega_n}) + \ln(\det(\underline{A}(\omega_n)))} \\ &= e^{\ln(\det(\underline{A}(\omega_n)))}\end{aligned}\tag{3.39}$$

$$\times e^{\frac{t_i^2}{-i\omega_n - \mu + \Omega} (\bar{\psi}_{i+1}^{\omega_n} \psi_{i+1}^{\omega_n})}\tag{3.40}$$

$$\times e^{\frac{t_{i-1}^2}{-i\omega_n - \mu + \Omega} (\bar{\psi}_{i-1}^{\omega_n} \psi_{i-1}^{\omega_n})}\tag{3.41}$$

$$\times e^{\frac{t_{i-1} t_i}{-i\omega_n - \mu + \Omega} (\bar{\psi}_{i+1}^{\omega_n} \psi_{i-1}^{\omega_n} + \bar{\psi}_{i-1}^{\omega_n} \psi_{i+1}^{\omega_n})}.\tag{3.42}$$

Die Summe über  $n$  wurde der besseren Übersicht wegen unterdrückt. Da sich diese Summe allerdings auch über  $\det(\underline{A})$  erstreckt, wurde sie als  $\ln(\det(\underline{A}))$  in den Exponenten geschrieben.

Die Größe  $\det(\underline{A}(\omega_n))$  hängt nicht mehr von den dynamischen Variablen  $\psi_i$  oder  $\phi_i$  ab und ist in diesem Sinne eine Konstante, die nach der Bemerkung auf Seite 18 ignoriert werden kann<sup>13</sup>.

Interessant sind die 3 Terme (3.40-3.42), die die renormierten Kopplungen darstellen.

In (3.40) findet man die neue *on-site* Energie für Glied  $i + 1$  und in (3.41) jene für Glied  $i - 1$ . Zeile (3.42) ist ein neues Hüpfmatrixelement zwischen den Kettengliedern  $i - 1$  und  $i + 1$ , die nach der Dezimierung von Glied  $i$  nun ja benachbart sind.

Dies sieht man noch deutlicher, wenn man die Hamiltonfunktion nach der Integration nochmals explizit niederschreibt.

Man beachte das Minuszeichen vor der Hamiltonfunktion bei der Definition des Pfadintegrals (3.15).

$$\begin{aligned}-H_{i+1, i-1} &= -V_{i-1} \bar{\psi}_{i-1}^{\omega_n} \psi_{i-1}^{\omega_n} \\ &\quad - V_{i+1} \bar{\psi}_{i+1}^{\omega_n} \psi_{i+1}^{\omega_n} \\ &\quad - J_{i-1} (\bar{\psi}_{i-1}^{\omega_n} \underline{\sigma}^z \psi_{i-1}^{\omega_n}) (\bar{\phi}_{i-1}^{\omega_n} \underline{\sigma}^z \phi_{i+1}^{\omega_n}) \\ &\quad - J_{i+1} (\bar{\psi}_{i+1}^{\omega_n} \underline{\sigma}^z \psi_{i+1}^{\omega_n}) (\bar{\phi}_{i+1}^{\omega_n} \underline{\sigma}^z \phi_{i-1}^{\omega_n}) \\ &\quad + \frac{t_{i-1}^2}{-i\omega_n - \mu + \Omega} (\bar{\psi}_{i-1}^{\omega_n} \psi_{i-1}^{\omega_n}) \\ &\quad + \frac{t_i^2}{-i\omega_n - \mu + \Omega} (\bar{\psi}_{i+1}^{\omega_n} \psi_{i+1}^{\omega_n}) \\ &\quad + \frac{t_{i-1} t_i}{-i\omega_n - \mu + \Omega} (\bar{\psi}_{i+1}^{\omega_n} \psi_{i-1}^{\omega_n} + \bar{\psi}_{i-1}^{\omega_n} \psi_{i+1}^{\omega_n}).\end{aligned}\tag{3.43}$$

<sup>12</sup>Diesmal wird  $\mathcal{Z}_i$  im Frequenzraum angegeben, aber formal ändert sich nichts, bis auf die Ersetzung  $\int d\tau f(\tau) \rightarrow \sum_n f(\omega_n)$ .

<sup>13</sup>Die explizite Berechnung der Determinante ist nur im Abschnitt 3.6.1 nötig.

### 3 Renormierung

Die ersten 4 Terme sind (3.21), (3.23), (3.24) und (3.26) aus dem Exponenten von (3.17), die letzten 3 Terme sind das Ergebnis der Integration der Felder  $\psi_i$  (3.40-3.42). Zusammengefasst steht also in der Hamiltonfunktion

$$\begin{aligned}
-H_{i+1, i-1} = & - \left( V_{i-1} - \frac{t_{i-1}^2}{-i\omega_n - \mu + \Omega} \right) \bar{\psi}_{i-1\sigma}^{\omega_n} \psi_{i-1\sigma}^{\omega_n} \\
& - \left( V_{i+1} - \frac{t_i^2}{-i\omega_n - \mu + \Omega} \right) \bar{\psi}_{i+1\sigma}^{\omega_n} \psi_{i+1\sigma}^{\omega_n} \\
& - J_{i-1} (\bar{\psi}_{i-1\sigma}^{\omega_n} \underline{\sigma}^z \psi_{i-1\sigma}^{\omega_n}) (\bar{\phi}_{i-1\sigma}^{\omega_n} \underline{\sigma}^z \phi_{i+1\sigma}^{\omega_n}) \\
& - J_{i+1} (\bar{\psi}_{i+1\sigma}^{\omega_n} \underline{\sigma}^z \psi_{i+1\sigma}^{\omega_n}) (\bar{\phi}_{i+1\sigma}^{\omega_n} \underline{\sigma}^z \phi_{i-1\sigma}^{\omega_n}) \\
& + \frac{t_{i-1}t_i}{-i\omega_n - \mu + \Omega} \left( \bar{\psi}_{i+1\sigma}^{\omega_n} \psi_{i-1\sigma}^{\omega_n} + \bar{\psi}_{i-1\sigma}^{\omega_n} \psi_{i+1\sigma}^{\omega_n} \right).
\end{aligned} \tag{3.44}$$

Die renormierten/neuen Kopplungen (bezeichnet mit einer Tilde) kann man somit direkt ablesen:

$$\begin{aligned}
\tilde{V}_{i+1} &= V_{i+1} - \frac{t_i^2}{\Omega - i\omega_n - \mu} \\
\tilde{V}_{i-1} &= V_{i-1} - \frac{t_{i-1}^2}{\Omega - i\omega_n - \mu} \\
\tilde{t} &= - \frac{t_{i-1}t_i}{\Omega - i\omega_n - \mu}.
\end{aligned} \tag{3.45}$$

Für den Fall eines halb gefüllten Loch-Bandes ( $\mu = 0$ ) und mit der Annahme, dass  $\Omega \gg \omega_n$  hat man

$$\tilde{V}_j = V_{i+1} - \frac{t_i^2}{\Omega} \tag{3.46}$$

$$\tilde{V}_{j-1} = V_{i-1} - \frac{t_{i-1}^2}{\Omega} \tag{3.47}$$

$$\tilde{t}_{j-1} = - \frac{t_{i-1}t_i}{\Omega} \tag{3.48}$$

Hier wurde auf der linken Seite eine Neunummerierung (Laufindex  $i \rightarrow j$ ) der Kette gemäß Abbildung (3.3) durchgeführt.

### 3.5 Renormierung von $t_i$

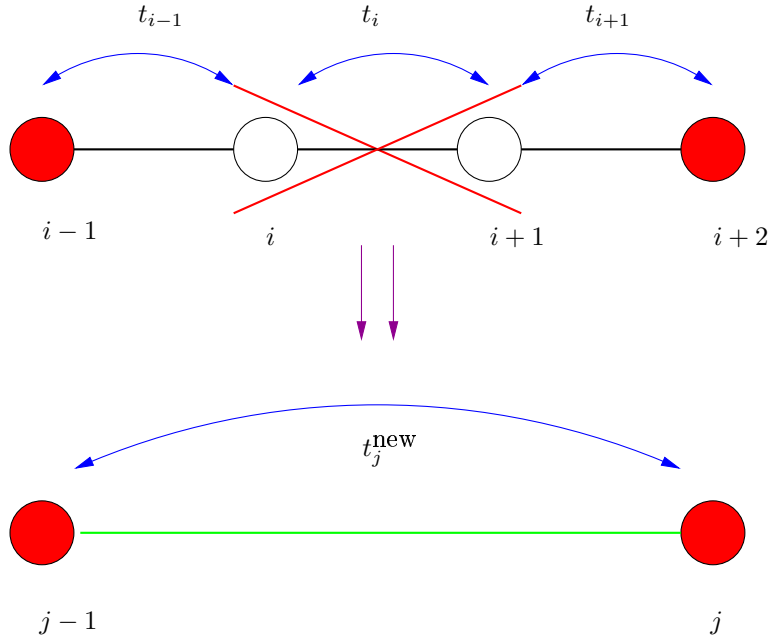


Abbildung 3.4: Schematische Darstellung der Renormierung der Kette (2): Diesmal soll  $\Omega = t_i$  gelten. 2 Glieder werden simultan dezimiert.

Sei nun

$$\Omega = |t_i|.$$

Da das Hüpfmatrixelement 2 Kettenglieder miteinander koppelt, werden bei der Dezimierung von  $t_i$  gleich 2 Sätze von Grassmanfeldern  $\{\bar{\psi}_{i\sigma}^\tau, \psi_{i\sigma}^\tau\}$  und  $\{\bar{\psi}_{i+1\sigma}^\tau, \psi_{i+1\sigma}^\tau\}$  ausintegriert.

Es ist deshalb zweckmäßig neue Grassmanvariablen einzuführen. Im Hinblick auf die Gaußintegration werden die neuen Variablen mit  $\eta$  bezeichnet. Es sei

$$\begin{aligned} \bar{\psi}_{i\sigma}^\tau + \bar{\psi}_{i+1\sigma}^\tau &= \bar{\eta}_{1\sigma}^\tau \\ \psi_{i\sigma}^\tau + \psi_{i+1\sigma}^\tau &= \eta_{1\sigma}^\tau \end{aligned} \quad (3.49)$$

und

$$\begin{aligned} \bar{\psi}_{i\sigma}^\tau - \bar{\psi}_{i+1\sigma}^\tau &= \bar{\eta}_{2\sigma}^\tau \\ \psi_{i\sigma}^\tau - \psi_{i+1\sigma}^\tau &= \eta_{2\sigma}^\tau. \end{aligned} \quad (3.50)$$

### 3 Renormierung

Die inverse Transformation ist

$$\begin{aligned}\bar{\psi}_{i\sigma}^\tau &= \frac{1}{2}(\bar{\eta}_{1\sigma}^\tau + \bar{\eta}_{2\sigma}^\tau) \\ \bar{\psi}_{i+1\sigma}^\tau &= \frac{1}{2}(\bar{\eta}_{1\sigma}^\tau - \bar{\eta}_{2\sigma}^\tau)\end{aligned}\tag{3.51}$$

und

$$\begin{aligned}\psi_{i\sigma}^\tau &= \frac{1}{2}(\eta_{1\sigma}^\tau + \eta_{2\sigma}^\tau) \\ \psi_{i+1\sigma}^\tau &= \frac{1}{2}(\eta_{1\sigma}^\tau - \eta_{2\sigma}^\tau).\end{aligned}\tag{3.52}$$

In diesen neuen Variablen lautet das  $t_i$ -Hüpfmatrixelement

$$\begin{aligned}-\Omega(\bar{\psi}_{i\sigma}^\tau \psi_{i+1\sigma}^\tau + \bar{\psi}_{i+1\sigma}^\tau \psi_{i\sigma}^\tau) &= -\Omega\left(\frac{1}{2}(\bar{\eta}_{1\sigma}^\tau + \bar{\eta}_{2\sigma}^\tau)\frac{1}{2}(\eta_{1\sigma}^\tau - \eta_{2\sigma}^\tau) + \frac{1}{2}(\bar{\eta}_{1\sigma}^\tau - \bar{\eta}_{2\sigma}^\tau)\frac{1}{2}(\eta_{1\sigma}^\tau + \eta_{2\sigma}^\tau)\right) \\ &= -\frac{\Omega}{2}(\bar{\eta}_{1\sigma}^\tau \eta_{1\sigma}^\tau - \bar{\eta}_{2\sigma}^\tau \eta_{2\sigma}^\tau) \\ &= \frac{\Omega}{2} \begin{pmatrix} \bar{\eta}_{1\sigma}^\tau \\ \bar{\eta}_{2\sigma}^\tau \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \eta_{1\sigma}^\tau \\ \eta_{2\sigma}^\tau \end{pmatrix}.\end{aligned}\tag{3.53}$$

Die in  $\{\bar{\psi}_\sigma, \psi_\sigma\}$  quadratischen Terme sind

$$\begin{aligned}\bar{\psi}_{i\sigma}^\tau \psi_{i\sigma}^\tau &= \frac{1}{2}(\bar{\eta}_{1\sigma}^\tau + \bar{\eta}_{2\sigma}^\tau)\frac{1}{2}(\eta_{1\sigma}^\tau + \eta_{2\sigma}^\tau) \\ &= \frac{1}{4}(\bar{\eta}_{1\sigma}^\tau \eta_{1\sigma}^\tau + \bar{\eta}_{2\sigma}^\tau \eta_{2\sigma}^\tau + \bar{\eta}_{1\sigma}^\tau \eta_{2\sigma}^\tau + \bar{\eta}_{2\sigma}^\tau \eta_{1\sigma}^\tau) \\ &= \frac{1}{4} \begin{pmatrix} \bar{\eta}_{1\sigma}^\tau \\ \bar{\eta}_{2\sigma}^\tau \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \eta_{1\sigma}^\tau \\ \eta_{2\sigma}^\tau \end{pmatrix}\end{aligned}\tag{3.54}$$

und

$$\begin{aligned}\bar{\psi}_{i+1\sigma}^\tau \psi_{i+1\sigma}^\tau &= \frac{1}{2}(\bar{\eta}_{1\sigma}^\tau - \bar{\eta}_{2\sigma}^\tau)\frac{1}{2}(\eta_{1\sigma}^\tau - \eta_{2\sigma}^\tau) \\ &= \frac{1}{4}(\bar{\eta}_{1\sigma}^\tau \eta_{1\sigma}^\tau + \bar{\eta}_{2\sigma}^\tau \eta_{2\sigma}^\tau - \bar{\eta}_{1\sigma}^\tau \eta_{2\sigma}^\tau - \bar{\eta}_{2\sigma}^\tau \eta_{1\sigma}^\tau) \\ &= \frac{1}{4} \begin{pmatrix} \bar{\eta}_{1\sigma}^\tau \\ \bar{\eta}_{2\sigma}^\tau \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \eta_{1\sigma}^\tau \\ \eta_{2\sigma}^\tau \end{pmatrix}.\end{aligned}\tag{3.55}$$

Die bzgl.  $\{\psi_{i\sigma}^\tau, \psi_{i+1\sigma}^\tau\}$  relevanten Terme in der Wirkung können wie folgt geschrieben werden

### 3 Renormierung

$$\begin{aligned}
& \begin{pmatrix} \bar{\psi}_{i\sigma}^\tau \\ \bar{\psi}_{i+1\sigma}^\tau \end{pmatrix} \overbrace{\begin{pmatrix} -\partial_\tau + \mu - V_i - J_{i\sigma} & -\Omega \\ -\Omega & -\partial_\tau + \mu - V_{i+1} - J_{i+1\sigma} \end{pmatrix}}^{-\underline{A}} \begin{pmatrix} \psi_{i\sigma}^\tau \\ \psi_{i+1\sigma}^\tau \end{pmatrix} \\
& - t_{i-1} \left( \bar{\psi}_{i-1\sigma}^\tau \psi_{i\sigma}^\tau + \bar{\psi}_{i\sigma}^\tau \psi_{i-1\sigma}^\tau \right) \\
& - t_{i+2} \left( \bar{\psi}_{i+2\sigma}^\tau \psi_{i+1\sigma}^\tau + \bar{\psi}_{i+1\sigma}^\tau \psi_{i+2\sigma}^\tau \right)
\end{aligned} \tag{3.56}$$

mit  $J_{i\sigma} = J_i(\bar{\phi}_{i-1\sigma}^\tau \underline{\sigma}^z \phi_{i+1\sigma}^\tau)$ .

Es wird noch folgende Abkürzung eingeführt

$$\begin{aligned}
x_i &= -\partial_\tau + \mu - V_i - J_{i\sigma} \\
x_{i+1} &= -\partial_\tau + \mu - V_{i+1} - J_{i+1\sigma} .
\end{aligned} \tag{3.57}$$

Der erste Summand in (3.56) wird mit (3.53), (3.54) und (3.55) umgeformt

$$-\bar{\eta}^\tau \underline{A} \eta^\tau = \begin{pmatrix} \bar{\eta}_{1\sigma}^\tau \\ \bar{\eta}_{2\sigma}^\tau \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{x_i+x_{i+1}}{4} - \frac{\Omega}{2} & \frac{x_i+x_{i+1}}{4} \\ \frac{x_i-x_{i+1}}{4} & \frac{x_i-x_{i+1}}{4} + \frac{\Omega}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \eta_{1\sigma}^\tau \\ \eta_{2\sigma}^\tau \end{pmatrix} . \tag{3.58}$$

Die Matrix ist symmetrisch und die Diagonalterme unterscheiden sich nur im Vorzeichen des letzten Summanden.

Da  $\Omega$  die dominierende Skala ist, gilt für die Matrix aus (3.58) näherungsweise

$$-\underline{A} \approx \begin{pmatrix} -\frac{\Omega}{2} & \frac{x_i+x_{i+1}}{4} \\ \frac{x_i-x_{i+1}}{4} & \frac{\Omega}{2} \end{pmatrix} . \tag{3.59}$$

Die inverse Matrix ist<sup>14</sup>

$$\begin{aligned}
\underline{A}^{-1} &= \frac{4}{\Omega^2 - \frac{x_i^2 - x_{i+1}^2}{4}} \begin{pmatrix} \frac{\Omega}{2} & \frac{x_i+x_{i+1}}{4} \\ \frac{x_i-x_{i+1}}{4} & -\frac{\Omega}{2} \end{pmatrix} \\
&\approx \frac{4}{\Omega^2} \begin{pmatrix} \frac{\Omega}{2} & \frac{x_i+x_{i+1}}{4} \\ \frac{x_i-x_{i+1}}{4} & -\frac{\Omega}{2} \end{pmatrix} \\
&\approx \begin{pmatrix} \frac{2}{\Omega} & 0 \\ 0 & -\frac{2}{\Omega} \end{pmatrix}
\end{aligned} \tag{3.60}$$

und somit diagonal, da alle Terme  $\propto \frac{1}{\Omega^2}$  in guter Näherung zu Null gesetzt wurden. Die Hüpfmatrixelemente zu den benachbarten Kettengliedern  $i-1$  und  $i+2$  sind

<sup>14</sup>Da  $x_i$  und  $x_{i+1}$  den Differentialoperator  $\partial_\tau$  enthalten müsste wieder ins Frequenzbild gewechselt werden, um die inverse Matrix zu berechnen. Da sich in der unten angewandten Näherung die Terme mit  $x$  sowieso herauskürzen belässt man es beim Zeitbild. Die interessierenden Kopplungskonstanten werden von den Fouriertransformationen onehin nicht beeinflusst.

### 3 Renormierung

$$\begin{aligned}
& -t_{i-1} \left( \bar{\psi}_{i-1\sigma}^\tau \psi_{i\sigma}^\tau + \bar{\psi}_{i\sigma}^\tau \psi_{i-1\sigma}^\tau \right) \\
& -t_{i+2} \left( \bar{\psi}_{i+2\sigma}^\tau \psi_{i+1\sigma}^\tau + \bar{\psi}_{i+1\sigma}^\tau \psi_{i+2\sigma}^\tau \right) \\
& = \bar{\eta}_{1\sigma}^\tau \nu_1^\tau + \bar{\eta}_{2\sigma}^\tau \nu_2^\tau + \bar{\nu}_1^\tau \eta_{1\sigma}^\tau + \bar{\nu}_2^\tau \eta_{2\sigma}^\tau
\end{aligned} \tag{3.61}$$

mit

$$\begin{aligned}
\bar{\nu}_1^\tau &= -\frac{1}{2} \left( t_{i-1} \bar{\psi}_{i-1\sigma}^\tau + t_{i+1} \bar{\psi}_{i+2\sigma}^\tau \right) \\
\nu_1^\tau &= -\frac{1}{2} \left( t_{i-1} \psi_{i-1\sigma}^\tau + t_{i+1} \psi_{i+2\sigma}^\tau \right) \\
\bar{\nu}_2^\tau &= -\frac{1}{2} \left( t_{i-1} \bar{\psi}_{i-1\sigma}^\tau - t_{i+1} \bar{\psi}_{i+2\sigma}^\tau \right) \\
\nu_2^\tau &= -\frac{1}{2} \left( t_{i-1} \psi_{i-1\sigma}^\tau - t_{i+1} \psi_{i+2\sigma}^\tau \right) .
\end{aligned} \tag{3.62}$$

Damit ergibt die Gaußintegration von (3.56) den Ausdruck

$$\begin{aligned}
\begin{pmatrix} \bar{\nu}_1^\tau \\ \bar{\nu}_2^\tau \end{pmatrix} \underline{A}^{-1} \begin{pmatrix} \nu_1^\tau \\ \nu_2^\tau \end{pmatrix} &= \frac{2}{\Omega} \bar{\nu}_1^\tau \nu_1^\tau - \frac{2}{\Omega} \bar{\nu}_2^\tau \nu_2^\tau = \\
\frac{2}{\Omega} &\left( \frac{1}{4} t_{i-1}^2 \bar{\psi}_{i-1\sigma}^\tau \psi_{i-1\sigma}^\tau + \frac{1}{4} t_{i+1}^2 \bar{\psi}_{i+2\sigma}^\tau \psi_{i+2\sigma}^\tau + \frac{1}{4} t_{i-1} t_{i+1} [\bar{\psi}_{i-1\sigma}^\tau \psi_{i+2\sigma}^\tau + \bar{\psi}_{i+2\sigma}^\tau \psi_{i-1\sigma}^\tau] \right) \\
-\frac{2}{\Omega} &\left( \frac{1}{4} t_{i-1}^2 \bar{\psi}_{i-1\sigma}^\tau \psi_{i-1\sigma}^\tau + \frac{1}{4} t_{i+1}^2 \bar{\psi}_{i+2\sigma}^\tau \psi_{i+2\sigma}^\tau - \frac{1}{4} t_{i-1} t_{i+1} [\bar{\psi}_{i-1\sigma}^\tau \psi_{i+2\sigma}^\tau + \bar{\psi}_{i+2\sigma}^\tau \psi_{i-1\sigma}^\tau] \right) \\
&= \frac{t_{i-1} t_{i+1}}{\Omega} [\bar{\psi}_{i-1\sigma}^\tau \psi_{i+2\sigma}^\tau + \bar{\psi}_{i+2\sigma}^\tau \psi_{i-1\sigma}^\tau] .
\end{aligned} \tag{3.63}$$

Die Beiträge zu den *on-site* Energien für die Plätze  $i-1$  und  $i+2$  heben sich gegenseitig genau auf. Der Term in den eckigen Klammern ist das neue Hüpfmatrixelement von Kettenglied  $i-1$  nach  $i+2$  und hat dieselbe Struktur wie bei der Renormierung von  $V_i$  im letzten Abschnitt (s. (3.48)).

$$\tilde{t}_j = -\frac{t_{i-1} t_{i+1}}{\Omega} . \tag{3.64}$$



### 3.6 Renormierung von $J_i$

Es bleibt nun nur noch der Fall übrig, bei dem die lokal größte Kopplung durch

$$J_i = \Omega$$

gegeben ist. Der Term (3.24) im Exponenten von  $\mathcal{Z}_{i-1,i,i+1}$

$$-J_i (\bar{\psi}_{i\sigma}^\tau \underline{\sigma}^z \psi_{i\sigma}^\tau) (\bar{\phi}_{i\sigma}^\tau \underline{\sigma}^z \phi_{i\sigma}^\tau) \quad (3.65)$$

ist nicht quadratisch in den Grassmanfeldern und kann deshalb nicht mit Hilfe von (3.31) integriert werden. Durch Einführen von Quellen- bzw. Hilfsfeldern kann man die Variablen für lokalisierten Spin und Lochspin jedoch entkoppeln. Dies geschieht mit Hilfe der *Hubbard Stratonovitch* Transformation, die nichts anderes als eine Gaußintegration ist. Dazu wird Gleichung (3.31) von rechts nach links gelesen.

$$\exp [\bar{\nu} \underline{A}^{-1} \nu] = \int D[\bar{\eta} \eta] \exp[-\bar{\eta} \underline{A} \eta + \bar{\eta} \nu + \bar{\nu} \eta + \ln \det \underline{A}^{-1}] . \quad (3.66)$$

In Matrixnotation hat der Term (3.24) die Gestalt

$$(\bar{\psi}_{i\sigma}^\tau \underline{\sigma}^z \psi_{i\sigma}^\tau) (-\Omega) (\bar{\phi}_{i\sigma}^\tau \underline{\sigma}^z \phi_{i\sigma}^\tau) = \begin{pmatrix} \bar{\psi}_{i\uparrow} \psi_{i\uparrow} - \bar{\psi}_{i\downarrow} \psi_{i\downarrow} \\ \bar{\phi}_{i\uparrow} \phi_{i\uparrow} - \bar{\phi}_{i\downarrow} \phi_{i\downarrow} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -\Omega/2 \\ -\Omega/2 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \bar{\psi}_{i\uparrow} \psi_{i\uparrow} - \bar{\psi}_{i\downarrow} \psi_{i\downarrow} \\ \bar{\phi}_{i\uparrow} \phi_{i\uparrow} - \bar{\phi}_{i\downarrow} \phi_{i\downarrow} \end{pmatrix} .$$

In der Notation von (3.66) gilt damit die Identifizierung

$$\nu_1 = \bar{\psi}_{i\uparrow} \psi_{i\uparrow} - \bar{\psi}_{i\downarrow} \psi_{i\downarrow} \quad (3.67)$$

$$\nu_2 = \bar{\phi}_{i\uparrow} \phi_{i\uparrow} - \bar{\phi}_{i\downarrow} \phi_{i\downarrow} \quad (3.68)$$

$$\bar{\nu} = \nu = \begin{pmatrix} \nu_1 \\ \nu_2 \end{pmatrix} \quad (3.69)$$

$$\underline{A}^{-1} = -\frac{\Omega}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} . \quad (3.70)$$

Damit kann man in der Zustandssumme  $\mathcal{Z}_{i-1,i,i+1}$  den Term (3.24) mittels der neuen Hilfsfelder umschreiben. Die Hilfsfelder  $\eta$  und  $\bar{\eta}$  müssen am Schluss noch geeignet bestimmt werden.

Die Terme  $\bar{\nu}_1 \eta_1$  und  $\bar{\eta}_1 \nu_1$  im Exponenten ergeben zusammengefasst<sup>15</sup>

$$\begin{aligned} & \bar{\psi}_{i\uparrow} (-\bar{\eta}_1 - \eta_1) \bar{\psi}_{i\uparrow} + \bar{\psi}_{i\downarrow} (\bar{\eta}_1 + \eta_1) \bar{\psi}_{i\downarrow} + \\ & \bar{\phi}_{i\uparrow} (-\bar{\eta}_1 - \eta_1) \bar{\phi}_{i\uparrow} + \bar{\phi}_{i\downarrow} (\bar{\eta}_1 + \eta_1) \bar{\phi}_{i\downarrow} . \end{aligned} \quad (3.71)$$

<sup>15</sup>Der Vorzeichenwechsel liegt an der Antivertauschung der Grassmanvariablen.

### 3 Renormierung

Die relevanten Terme in  $\mathcal{Z}_{i-1,i,i+1}$  sind damit

$$\begin{aligned}
& \int D[\bar{\eta}\eta]D[\bar{\nu}\nu]D[\bar{\psi}_{i\sigma}^{\tau}\psi_{i\sigma}^{\tau}]D[\bar{\phi}_{i\sigma}^{\tau}\phi_{i\sigma}^{\tau}]e^{\int d\tau\sum_{i\sigma}\{\bar{\psi}_{i\sigma}^{\tau}(-\partial_{\tau}+\mu)\psi_{i\sigma}^{\tau}+\bar{\phi}_{i\sigma}^{\tau}(-\partial_{\tau}+\mu_S)\phi_{i\sigma}^{\tau}\}} \\
& \quad \times e^{-\bar{\eta}\underline{A}\eta+\bar{\eta}\nu+\bar{\nu}\eta+\ln\det\underline{A}^{-1}} \\
& \quad \times e^{-V_i\bar{\psi}_{i\sigma}^{\tau}\psi_{i\sigma}^{\tau}} \\
& \quad \times e^{-t_{i-1}(\bar{\psi}_{i-1\sigma}^{\tau}\psi_{i\sigma}^{\tau}+\bar{\psi}_{i\sigma}^{\tau}\psi_{i-1\sigma}^{\tau})} \\
& \quad \times e^{-t_i(\bar{\psi}_{i\sigma}^{\tau}\psi_{i+1\sigma}^{\tau}+\bar{\psi}_{i\sigma}^{\tau}\psi_{i+1\sigma}^{\tau})\}} \\
& = \\
& \int D[\bar{\eta}\eta]D[\bar{\psi}_{i\sigma}^{\tau}\psi_{i\sigma}^{\tau}]D[\bar{\phi}_{i\sigma}^{\tau}\phi_{i\sigma}^{\tau}]e^{\int d\tau\sum_{i\sigma}\{\frac{2}{\Omega}(\bar{\eta}_1\eta_2+\bar{\eta}_2\eta_1)} \\
& \quad \times e^{\bar{\psi}_{i\uparrow}(-\bar{\eta}_1-\eta_1)\bar{\psi}_{i\uparrow}+\bar{\psi}_{i\downarrow}(\bar{\eta}_1+\eta_1)\bar{\psi}_{i\downarrow}} \\
& \quad \times e^{\bar{\phi}_{i\uparrow}(-\bar{\eta}_1-\eta_1)\bar{\phi}_{i\uparrow}+\bar{\phi}_{i\downarrow}(\bar{\eta}_1+\eta_1)\bar{\phi}_{i\downarrow}} \\
& \quad \times e^{\bar{\psi}_{i\sigma}^{\tau}(-\partial_{\tau}+\mu)\psi_{i\sigma}^{\tau}+\bar{\phi}_{i\sigma}^{\tau}(-\partial_{\tau}+\mu_S)\phi_{i\sigma}^{\tau}} \\
& \quad \times e^{-V_i\bar{\psi}_{i\sigma}^{\tau}\psi_{i\sigma}^{\tau}} \\
& \quad \times e^{-t_{i-1}(\bar{\psi}_{i-1\sigma}^{\tau}\psi_{i\sigma}^{\tau}+\bar{\psi}_{i\sigma}^{\tau}\psi_{i-1\sigma}^{\tau})} \\
& \quad \times e^{-t_i(\bar{\psi}_{i\sigma}^{\tau}\psi_{i+1\sigma}^{\tau}+\bar{\psi}_{i\sigma}^{\tau}\psi_{i+1\sigma}^{\tau})} \\
& \quad \times e^{\ln\det\underline{A}^{-1}}\}}
\end{aligned}$$

Fast man nun alle in  $\psi_i$  quadratischen Größen in einer Matrix zusammen, steht im Exponenten von  $\mathcal{Z}_{i-1,i,i+1}$  der Ausdruck

$$\begin{pmatrix} \bar{\psi}_{i\uparrow}^{\tau} \\ \bar{\psi}_{i\downarrow}^{\tau} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -\partial_{\tau} + \mu - V_i - \bar{\eta}_1 - \eta_1 & 0 \\ 0 & -\partial_{\tau} + \mu - V_i + \bar{\eta}_1 + \eta_1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_{i\uparrow}^{\tau} \\ \psi_{i\downarrow}^{\tau} \end{pmatrix}. \quad (3.72)$$

Wie man sieht, unterscheiden sich diesmal die beiden Spinkomponenten im Vorzeichen von  $\eta$ .

Analog bestimmt man den Anteil mit den Feldern  $\phi_{i\sigma}^{\tau}$

$$\begin{pmatrix} \bar{\phi}_{i\uparrow}^{\tau} \\ \bar{\phi}_{i\downarrow}^{\tau} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -\partial_{\tau} + \mu_S - \bar{\eta}_2 - \eta_2 & 0 \\ 0 & -\partial_{\tau} + \mu_S + \bar{\eta}_2 + \eta_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_{i\uparrow}^{\tau} \\ \phi_{i\downarrow}^{\tau} \end{pmatrix}. \quad (3.73)$$

In dieser Form können die Felder  $\bar{\psi}_{i\sigma}, \psi_{i\sigma}$  und  $\bar{\phi}_{i\sigma}, \phi_{i\sigma}$  wie im vorangegangenen Abschnitt ausintegriert werden, wobei wieder vom Zeit- ins Frequenzbild gewechselt wird. Da  $\eta$  als Variablenname schon vergeben ist, wird für die Gaußintegration diesmal folgende Notation benutzt

### 3 Renormierung

$$\int D[\bar{\chi}_j \chi_j] \exp[-\bar{\chi}_j \underline{A}_j \chi_j + \bar{\chi}_j \zeta_j + \bar{\zeta}_j \chi_j] = \det(\underline{A}_j) \exp\left[\bar{\zeta}_j \underline{A}_j^{-1} \zeta_j\right]. \quad (3.74)$$

Die Felder  $\bar{\psi}_{i\sigma}$  und  $\psi_{i\sigma}$  gehören zu  $j = 1$ , die Felder  $\bar{\phi}_{i\sigma}$  und  $\phi_{i\sigma}$  gehören zu  $j = 2$ .

$$\begin{aligned} \bar{\chi}_1 &= \begin{pmatrix} \bar{\psi}_{i\uparrow}^\tau \\ \bar{\psi}_{i\downarrow}^\tau \end{pmatrix} & \chi_1 &= \begin{pmatrix} \psi_{i\uparrow}^\tau \\ \psi_{i\downarrow}^\tau \end{pmatrix} \\ \underline{A}_1 &= \begin{pmatrix} -i\omega_n - \mu + V_i + \bar{\eta}_1 + \eta_1 & 0 \\ 0 & -i\omega_n - \mu + V_i - \bar{\eta}_1 - \eta_1 \end{pmatrix} \\ \bar{\zeta}_1 &= \begin{pmatrix} t_i \bar{\psi}_{i+1\uparrow}^\tau + t_{i-1} \bar{\psi}_{i-1\uparrow}^\tau \\ t_i \bar{\psi}_{i+1\downarrow}^\tau + t_{i-1} \bar{\psi}_{i-1\downarrow}^\tau \end{pmatrix} & \zeta_1 &= \begin{pmatrix} t_i \psi_{i+1\uparrow}^\tau + t_{i-1} \psi_{i-1\uparrow}^\tau \\ t_i \psi_{i+1\downarrow}^\tau + t_{i-1} \psi_{i-1\downarrow}^\tau \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (3.75)$$

Das Ergebnis der Integration ist analog zu der Renormierung von  $V_i$ . Man erhält renormierte Kopplungen gemäß (3.45), wenn man dort  $\Omega = V_i$  durch  $V_i + (\bar{\eta}_1 + \eta_1)$  bzw.  $V_i - (\bar{\eta}_1 + \eta_1)$  ersetzt.

$$\begin{aligned} \sigma = \uparrow & & \sigma = \downarrow \\ \tilde{V}_{i+1} = V_{i+1} - \frac{t_i^2}{V_i + (\bar{\eta}_1 + \eta_1) - i\omega_n - \mu} & & \tilde{V}_{i+1} = V_{i+1} - \frac{t_i^2}{V_i - (\bar{\eta}_1 + \eta_1) - i\omega_n - \mu} \end{aligned} \quad (3.76)$$

$$\tilde{V}_{i-1} = V_{i-1} - \frac{t_{i-1}^2}{V_i + (\bar{\eta}_1 + \eta_1) - i\omega_n - \mu} \quad \tilde{V}_{i-1} = V_{i-1} - \frac{t_{i-1}^2}{V_i - (\bar{\eta}_1 + \eta_1) - i\omega_n - \mu} \quad (3.77)$$

$$\tilde{t} = - \frac{t_{i-1} t_i}{V_i + (\bar{\eta}_1 + \eta_1) - i\omega_n - \mu} \quad \tilde{t} = - \frac{t_{i-1} t_i}{V_i - (\bar{\eta}_1 + \eta_1) - i\omega_n - \mu}. \quad (3.78)$$

Die Integration der Felder  $\bar{\phi}_{i\sigma}$  und  $\phi_{i\sigma}$  liefert keinen Beitrag zu den Kopplungen, nur im Exponenten die Determinante von

$$\underline{A}_2 = \begin{pmatrix} -i\omega_n - \mu_S + \bar{\eta}_2 + \eta_2 & 0 \\ 0 & -i\omega_n - \mu_S - \bar{\eta}_2 - \eta_2 \end{pmatrix} \quad (3.79)$$

#### 3.6.1 Bestimmung der Hilfsfelder

Die noch offene Frage ist, wie die Hilfsfelder vom *cut-off*  $J_i = \Omega$  abhängen. Die Hilfsfelder selbst zu integrieren ist nicht analytisch möglich, allerdings auch gar nicht notwendig, da nur interessiert, wie die renormierten Kopplungen (3.76)-(3.78) von dem *cut-off*  $\Omega$  abhängen. Da die renormierten Kopplungen (3.76)-(3.78) dieselbe Struktur haben<sup>16</sup> wie im Fall (3.48), ist zu erwarten, dass

<sup>16</sup>Was nicht überraschend ist, da in beiden Fällen genau ein Kettenglied dezimiert wird.

### 3 Renormierung

$$\bar{\eta}_1 = \eta_1 \propto \Omega \quad (3.80)$$

gilt. Wegen (3.69), muss darüber hinaus auch noch  $\bar{\eta} = \eta$  gelten. Dies gilt es nun zu überprüfen.

Nach der Integration der Felder  $\bar{\psi}_{i\sigma}$  und  $\psi_{i\sigma}$  sowie  $\bar{\phi}_{i\sigma}$  und  $\phi_{i\sigma}$  verbleiben in der Zustandssumme folgende von  $\eta$  abhängige Faktoren

$$\mathcal{Z}_\eta = \int D[\bar{\eta}_1 \eta_1] D[\bar{\eta}_2 \eta_2] e^{\sum_n i\omega_n} \left\{ \frac{2}{\Omega} (\bar{\eta}_1 \eta_2 + \bar{\eta}_2 \eta_1) \right. \quad (3.81)$$

$$\times e^{\sum_n \bar{\psi}_{i+1 \uparrow}^{\omega_n} \left( \frac{t_i^2}{V_i + (\bar{\eta}_1 + \eta_1) - i\omega_n - \mu} \right) \psi_{i+1 \uparrow}^{\omega_n}} \quad (3.82)$$

$$\times e^{\sum_n \bar{\psi}_{i+1 \downarrow}^{\omega_n} \left( \frac{t_i^2}{V_i - (\bar{\eta}_1 + \eta_1) - i\omega_n - \mu} \right) \psi_{i+1 \downarrow}^{\omega_n}} \quad (3.83)$$

$$\times e^{\sum_n \bar{\psi}_{i-1 \uparrow}^{\omega_n} \left( \frac{t_{i-1}^2}{V_i + (\bar{\eta}_1 + \eta_1) - i\omega_n - \mu} \right) \psi_{i-1 \uparrow}^{\omega_n}} \quad (3.84)$$

$$\times e^{\sum_n \bar{\psi}_{i-1 \downarrow}^{\omega_n} \left( \frac{t_{i-1}^2}{V_i - (\bar{\eta}_1 + \eta_1) - i\omega_n - \mu} \right) \psi_{i-1 \downarrow}^{\omega_n}} \quad (3.85)$$

$$\times e^{-\sum_n \frac{t_{i-1} t_i}{V_i + (\bar{\eta}_1 + \eta_1) - i\omega_n - \mu} (\bar{\psi}_{i+1 \uparrow}^{\omega_n} \psi_{i-1 \uparrow}^{\omega_n} + \bar{\psi}_{i+1 \uparrow}^{\omega_n} \psi_{i-1 \uparrow}^{\omega_n})} \quad (3.86)$$

$$\times e^{-\sum_n \frac{t_{i-1} t_i}{V_i - (\bar{\eta}_1 + \eta_1) - i\omega_n - \mu} (\bar{\psi}_{i+1 \downarrow}^{\omega_n} \psi_{i-1 \downarrow}^{\omega_n} + \bar{\psi}_{i+1 \downarrow}^{\omega_n} \psi_{i-1 \downarrow}^{\omega_n})} \quad (3.87)$$

$$\times e^{\sum_n \ln [\det(\underline{A}_1) \det(\underline{A}_2)]} \quad (3.88)$$

mit

$$\ln [\det(\underline{A}_1) \det(\underline{A}_2)] = \quad (3.89)$$

$$\ln [(-i\omega_n - \mu + V_i + \bar{\eta}_1 + \eta_1)(-i\omega_n - \mu + V_i - \bar{\eta}_1 - \eta_1)(-i\omega_n - \mu_S + \bar{\eta}_2 + \eta_2)(-i\omega_n - \mu_S + \bar{\eta}_2 + \eta_2)].$$

Mit  $\mathcal{Z}$  in obiger Form ist auch die freie Energie  $F$  eine Funktion der Hilfsfelder  $F = F[\eta]$ . Um die  $\Omega$ -Abhängigkeit der Hilfsfelder bestimmen zu können, muss man eine geeignete, physikalisch sinnvolle Zusatzbedingung stellen. Man fordert, dass die Quellenfelder die freie Energie minimieren:

$$\frac{\delta \ln F[\eta_i]}{\delta \eta_i} = 0 \quad \text{und} \quad \frac{\delta \ln F[\bar{\eta}_i]}{\delta \bar{\eta}_i} = 0 \quad (3.90)$$

Die Variation nach  $\bar{\eta}_2$  und  $\eta_2$  ist am einfachsten auszuführen, da nur der erste Term (3.81) und der letzte Term (3.88) in  $\mathcal{Z}_\eta$  von diesen Hilfsgrößen abhängen. Zunächst muss das Produkt der Determinanten noch geeignet umgeschrieben werden.

Für nur einen fermionischen Freiheitsgrad ohne Quellenfelder gilt

$$\mathcal{Z}_\mu = \int D[\psi] D[\bar{\psi}] e^{-\int d\tau \bar{\psi}(\partial_\tau - \mu)\psi} = e^{\ln \det(\partial_\tau - \mu)} = e^{\sum_n \ln \det(-i\omega_n - \mu)}. \quad (3.91)$$

### 3 Renormierung

Die Summe über die fermionischen Matsubarafrequenzen muss geeignet regularisiert werden. Im Kontinuumslimit ergibt sich [70]

$$\mathcal{Z}_\mu = 2 \cosh(\beta\mu/2). \quad (3.92)$$

Was sich von dem klassischen Ergebnis

$$\begin{aligned} \mathcal{Z} &\stackrel{!}{=} 1 + e^{-\beta\mu} = e^{\ln(1+e^{-\beta\mu})} \\ &= e^{\ln\left(e^{-\frac{\beta\mu}{2}}\left(e^{\frac{\beta\mu}{2}} + e^{-\frac{\beta\mu}{2}}\right)\right)} = e^{\ln\left(e^{-\frac{\beta\mu}{2}} 2 \cosh(\beta\mu/2)\right)} \\ &= e^{-\frac{\beta\mu}{2} + \ln 2 \cosh(\beta\mu/2)} \end{aligned} \quad (3.93)$$

um einen Energieshift unterscheidet. Somit lässt sich (3.89) schreiben als

$$\ln \left[ 16 \cosh(\beta(\mu - V_i - \bar{\eta}_1 - \eta_1)/2) \cosh(\beta(\mu - V_i + \bar{\eta}_1 + \eta_1)/2) \cosh(\beta(\mu_S - \bar{\eta}_2 - \eta_2)/2) \cosh(\beta(\mu_S + \bar{\eta}_2 + \eta_2)/2) \right]. \quad (3.94)$$

Bezüglich  $\bar{\eta}_2$  und  $\eta_2$  hat (3.81) die Form

$$\begin{aligned} \mathcal{Z}_\eta &= \int D[\bar{\eta}_1 \eta_1] D[\bar{\eta}_2 \eta_2] \exp \left\{ \frac{2}{\Omega} (\bar{\eta}_1 \eta_2 + \bar{\eta}_2 \eta_1) + f(\bar{\eta}_1, \eta_1) \right. \\ &\quad \left. + \ln [g(\bar{\eta}_1, \eta_1) \cosh(\beta(\mu_S - \bar{\eta}_2 - \eta_2)/2) \cosh(\beta(\mu_S + \bar{\eta}_2 + \eta_2)/2)] \right\}. \end{aligned} \quad (3.95)$$

Dabei wurden die von  $\bar{\eta}_1 + \eta_1$  abhängigen Terme im Exponenten von (3.82) bis (3.87) mit pauschal mit  $f(\bar{\eta}_1, \eta_1)$  abgekürzt und  $g(\bar{\eta}_1, \eta_1)$  steht für die von  $\bar{\eta}_1 + \eta_1$  abhängenden Faktoren in (3.89). Zur besseren Übersicht wird noch

$$\begin{aligned} \cosh_\pm(\bar{\eta}_2 + \eta_2) &= \cosh_\pm(\beta(\mu_S \pm (\bar{\eta}_2 + \eta_2))/2) \\ \sinh_\pm(\bar{\eta}_2 + \eta_2) &= \sinh_\pm(\beta(\mu_S \pm (\bar{\eta}_2 + \eta_2))/2) \\ \tanh_\pm(\bar{\eta}_2 + \eta_2) &= \frac{\cosh_\pm(\bar{\eta}_2 + \eta_2)}{\sinh_\pm(\bar{\eta}_2 + \eta_2)} \end{aligned} \quad (3.96)$$

definiert.

Damit gibt die Variation nach  $\bar{\eta}_2$

### 3 Renormierung

$$\begin{aligned}
& \frac{\delta \mathcal{Z}_\eta}{\delta \bar{\eta}_2} = \\
& \int D[\bar{\eta}_1 \eta_1] D[\bar{\eta}_2 \eta_2] \exp \{ \dots \} \\
& \times \left[ \frac{2}{\Omega} \eta_1 + \frac{g(\bar{\eta}_1, \eta_1) (\cosh_-(\bar{\eta}_2 + \eta_2) \sinh_+(\bar{\eta}_2 + \eta_2) \beta/2 + \sinh_-(\bar{\eta}_2 + \eta_2) \cosh_+(\bar{\eta}_2 + \eta_2) (-\beta/2))}{g(\bar{\eta}_1, \eta_1) \cosh_-(\bar{\eta}_2 + \eta_2) \cosh_+(\bar{\eta}_2 + \eta_2)} \right] \\
& = \\
& \int D[\bar{\eta}_1 \eta_1] D[\bar{\eta}_2 \eta_2] \exp \{ \dots \} \\
& \times \left[ \frac{2}{\Omega} \eta_1 + \beta/2 (\tanh_+(\bar{\eta}_2 + \eta_2) - \tanh_-(\bar{\eta}_2 + \eta_2)) \right] \\
& = 0.
\end{aligned} \tag{3.97}$$

Die Variation nach  $\eta_2$  folgt analog

$$\begin{aligned}
& \frac{\delta \mathcal{Z}_\eta}{\delta \eta_2} = \\
& \int D[\bar{\eta}_1 \eta_1] D[\bar{\eta}_2 \eta_2] \exp \{ \dots \} \\
& \times \left[ \frac{2}{\Omega} \bar{\eta}_1 + \beta/2 (\tanh_+(\bar{\eta}_2 + \eta_2) - \tanh_-(\bar{\eta}_2 + \eta_2)) \right] \\
& = 0.
\end{aligned} \tag{3.98}$$

Die Bedingungen sind erfüllt für

$$\eta_1 = \frac{\Omega}{2} (\tanh_-(\bar{\eta}_2 + \eta_2) - \tanh_+(\bar{\eta}_2 + \eta_2)) \beta/2 \tag{3.99}$$

$$\bar{\eta}_1 = \frac{\Omega}{2} (\tanh_-(\bar{\eta}_2 + \eta_2) - \tanh_+(\bar{\eta}_2 + \eta_2)) \beta/2. \tag{3.100}$$

Wie erwartet gilt also  $\bar{\eta}_1 = \eta_1$ .

$$\bar{\eta}_1 + \eta_1 = \Omega (\tanh_-(\bar{\eta}_2 + \eta_2) - \tanh_+(\bar{\eta}_2 + \eta_2)) \beta/2. \tag{3.101}$$

Da die Funktion  $\tanh$  auf  $(-1, 1)$  beschränkt ist, gilt weiterhin

$$\eta_1 = \eta_1(\Omega) \propto \Omega. \tag{3.102}$$

### 3 Renormierung

Eine genauere Untersuchung<sup>17</sup> gibt

$$\bar{\eta}_1 + \eta_1 = \Omega \quad (3.103)$$

und damit für (3.76)-(3.78) das Ergebnis

$\sigma = \uparrow$	$\sigma = \downarrow$	
$\tilde{V}_{i+1} = V_{i+1} - \frac{t_i^2}{\Omega}$	$\tilde{V}_{i+1} = V_{i+1} - \frac{t_i^2}{-\Omega}$	(3.104)
$\tilde{V}_{i-1} = V_{i-1} - \frac{t_{i-1}^2}{\Omega}$	$\tilde{V}_{i-1} = V_{i-1} - \frac{t_{i-1}^2}{-\Omega}$	(3.105)

Dabei wurden wieder alle Größen im Nenner gegen  $\Omega$  vernachlässigt. Die neuen Hüpfmatrixelemente haben wieder die Form wie in (3.48) und (3.64).

Die analytischen Beziehungen zwischen alten und neuen Kopplungen (3.45) sind das Endresultat dieses Kapitels. Das nächste Kapitel beschäftigt sich mit den dazugehörigen Verteilungsfunktionen.

---

<sup>17</sup>Da die renormierten Kopplungen nur von  $\bar{\eta}_1$  und  $\eta_1$  abhängen, ist die explizite Energieabhängigkeit von  $\bar{\eta}_2$  und  $\eta_2$  hier nicht von Interesse.

## 4 Die kritischen Verteilungen

Im vorangegangenen Kapitel wurde hergeleitet, wie die renormierten Kopplungen  $\{\tilde{K}\}$  von den ursprünglichen Kopplungen  $\{K\}$  abhängen. Bei gegebenen Kopplungskonstanten würde nun das RG-Verfahren iteriert und die Abbildung

$$RG : \{K\} \rightarrow \{\tilde{K}\} \quad (4.1)$$

auf Fixpunkte untersucht werden.

Im vorliegenden Fall sind die Kopplungen zufällig. Der physikalisch relevante Punkt sind deshalb nicht die Kopplungen selbst, sondern deren Wahrscheinlichkeitsverteilungen. Entsprechend interessiert man sich für einen Fixpunkt im Raum der normierten Verteilungsfunktionen.

Da man die Änderung der Kopplungen mit der Energieskala kennt, kann man auch die Änderung – den *Fluss* – der dazugehörigen Verteilungen berechnen.

In diesem Kapitel werden die Differentialgleichungen abgeleitet, die den Fluss der Wahrscheinlichkeitsverteilungen beschreiben.

Die Evolution der Kopplungen (3.48), (3.64) und (3.76)-(3.78) wird in diese Gleichungen eingehen. Die Lösungen dieser Differentialgleichungen stellen die schon angesprochenen kritischen Verteilungsfunktionen dar, mit denen physikalische Eigenschaften der Spinkette in der Umgebung des kritischen Punktes berechnet werden können.

Als Anwendung folgt die Bestimmung der Spin-Spin-Korrelation im nächsten Kapitel.

### 4.1 Notation

Es ist in der Literatur üblich und zum Rechnen außerordentlich praktisch, dimensionslose Größen zu verwenden. Die Struktur der renormierten  $t$ 's <sup>1</sup> legt es außerdem nahe, logarithmische Größen zu benutzen.

Die im folgenden verwendete Notation ist

$$\Gamma = \ln\left(\frac{\Omega t}{\Omega}\right) \quad (4.2)$$

$$\alpha = \ln\left(\frac{\Omega}{J}\right) \quad (4.3)$$

$$\delta = \ln\left(\frac{\Omega}{t}\right) \quad (4.4)$$

$$\rho = \frac{V}{\Omega} \cdot \quad (4.5)$$

---

<sup>1</sup>Im weiteren Verlauf werden die  $t$ 's positiv gewählt.



#### 4 Die kritischen Verteilungen

Damit sind  $\Gamma$ ,  $\alpha$  und  $\delta$  positive Größen.

Durch die RG wird die Energie des Systems schrittweise abgesenkt, die logarithmische Energieskala wächst hingegen an. Sie beginnt per Definition bei  $\Gamma = 0$ .

Die Wahrscheinlichkeitsverteilungen der jeweiligen Kopplungen  $J$ ,  $t$  und  $V$  werden mit den Buchstaben  $P$ ,  $R$  und  $Q$  bezeichnet, also

$$P = P(\alpha, \Gamma) \tag{4.6}$$

$$R = R(\delta, \Gamma; l) \tag{4.7}$$

$$Q = Q(\rho, \Gamma), \tag{4.8}$$

wobei die Verteilung der Hüpfmatrixelemente Informationen über die Länge  $l$  – sprich den Abstand zweier lokaler Spins  $S$  – enthält.

Das Ereignis, dass auf der momentanen Energieskala eine Kopplung die Energie  $\Omega$  besitzt, ist durch

$$P_0 = P(0, \Gamma) \tag{4.9}$$

$$R_0 = R(0, \Gamma) \tag{4.10}$$

$$Q_1 = Q(1, \Gamma) \tag{4.11}$$

$$Q_{-1} = Q(-1, \Gamma) \tag{4.12}$$

gegeben. Da  $\rho$  keine logarithmische Variable ist, kann sie im Gegensatz zu den anderen auch negative Werte annehmen.

Bei jedem Schritt der Renormierung ändern sich die Kopplungen und damit ihre Verteilungsfunktionen. Wenn  $f$  allgemein eine solche Wahrscheinlichkeitsverteilung darstellt ( $f = P, Q$  oder  $R$ ), dann gilt für die Änderung von  $f$  mit der Energie<sup>2</sup>

$$\frac{df}{d\Gamma} =$$

- der Anteil von Kopplungen, die bei der Renormierung dezimiert werden (und in die renormierten Kopplungen eingehen),
- der Anteil von Kopplungen, die bei der Renormierung neu gebildet werden und
- die Kompensation der Kopplungen, die effektiv verloren gingen.

Der letzte Punkt trägt dafür Sorge, dass auch die kritischen Verteilungen richtig normiert sind, sonst würde Normierung „verloren gehen“ .

---

<sup>2</sup>Die Integration von Kopplungen aus einer Energieschale  $\{\Omega, \Omega - d\Omega\}$  entspricht der Änderung der Verteilung beim Schritt von  $\Gamma$  nach  $\Gamma + d\Gamma$ .

## 4 Die kritischen Verteilungen

Die Differentialgleichungen für  $P$ ,  $R$  und  $Q$  werden im folgenden aufgestellt. Die funktionale Form der Lösung wird dabei von der anfangs gegebenen Verteilung abhängen [18, 19]. Als in Frage kommende Kandidaten für die ursprünglichen Wahrscheinlichkeitsverteilungen (auf der Skala  $\Omega = \Omega_I$ ) werden hierbei nur Exponential-, Gauß- und Cauchy- sowie Potenzverteilung betrachtet.

### 4.2 Die Verteilung $P(\alpha, \Gamma)$

Da in dem hier verwendeten Renormierungsschema die Spin-Kopplungen  $J$  nur dezimiert, aber nicht im Laufe der RG generiert werden, hat die Gleichung für die korrespondierende Verteilung  $P$  eine besonders einfache Form.

Es zeigt sich, dass die Renormierung der Hüpfmatrixelemente und der *on-site* Energien keinen Beitrag zur Verteilung  $P(\alpha, \Gamma)$  liefern. Die Gleichung für  $P$  ist demnach entkoppelt und kann separat betrachtet werden.

Die Änderung der Verteilung  $P$  beim Übergang von  $\Gamma$  nach  $\Gamma + d\Gamma$  ist (Kettenregel)

$$\frac{dP}{d\Gamma} = \frac{\partial P}{\partial \Gamma} + \frac{\partial P}{\partial \alpha} \frac{\partial \alpha}{\partial \Gamma} = \frac{\partial P}{\partial \Gamma} - \frac{\partial P}{\partial \alpha}. \quad (4.13)$$

Welche Terme können noch in der Gleichung für  $P$  vorkommen?

Bei jedem RG-Schritt werden alte Kopplungen dezimiert und neue erzeugt (allerdings keine vom Typ  $J$ ).

Im Fall  $J = \Omega$  bzw  $\alpha = 0$  (was mit Wahrscheinlichkeit<sup>3</sup>  $P_0$  eintritt.) dezimiert man ein Kettenglied. Damit wird gleichzeitig eine Kopplung  $J$  aus der Kette entfernt, also ein Verlust an Spin Kopplungen der Größe

$$P_0 P. \quad (4.14)$$

Wird hingegen ein  $t$  dezimiert (mit Wahrscheinlichkeit  $R_0$ ), so verringert sich der Anteil an Kopplungen  $J$  um den Anteil

$$-2R_0 P. \quad (4.15)$$

Da es 2 Hüpfmatrixelemente gibt, die links und rechts an das Kettenglied anknüpfen können, erhält man den Faktor 2 in (4.15). Da bei der Renormierung eines  $t$ 's gleich 2 Kettenglieder dezimiert werden, verringert sich der Anteil an Kopplungen des Typs  $J$  um den Anteil  $2R_0 P$ , der wegen der Normerhaltung kompensiert werden muss und sich damit gegen (4.15) weghebt (s. Abbildung 4.1). Entsprechende Überlegungen gelten für die Renormierung einer *on-site* Energie.

---

<sup>3</sup> $P$  ist eine ordentliche Wahrscheinlichkeitsverteilung mit  $\int P(\alpha) d\alpha = 1$ . Man könnte nun vielleicht denken, dass  $P_0$  ebenfalls normiert ( $\int P_0 d\Gamma = 1$ ) sein müsste, was jedoch nicht der Fall ist. Analoges gilt für die anderen beiden Verteilungen.

#### 4 Die kritischen Verteilungen

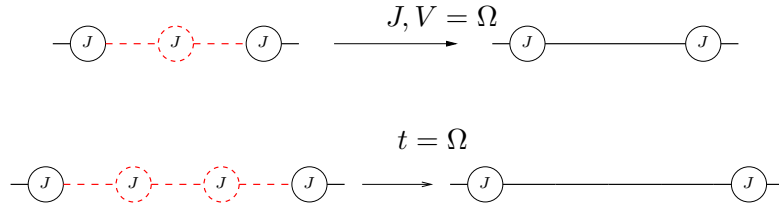


Abbildung 4.1: Herleitung für die renormierte Verteilung der Kopplung  $J$ : Im **oberen Bild** wird die Kopplung  $J$  selbst renormiert. Die Kette verliert effektiv eine Kopplung vom Typ  $J$ . **Unten** sieht man schematisch die Renormierung eines  $t$ 's. Die Kette verliert effektiv 2 Kopplungen vom Typ  $J$ . Die zu dezimierenden Kopplungen sind rot (gestrichelt) dargestellt. Jede Linie steht für ein  $t$ , jeder Kreis für eine Kopplung  $J$  und ein  $V$ .

Die Flussgleichung lautet somit

$$\frac{\partial P}{\partial \Gamma} = \frac{\partial P}{\partial \alpha} + P_0 P . \quad (4.16)$$

Die Kompensation der verlorenen Kopplung (zur Erhaltung der Norm) entspricht also genau der totalen Änderung von  $P$  mit der Energie.

Da  $P_0$  und  $P$  als Wahrscheinlichkeitsverteilungen keine negativen Werte annehmen können, ist  $\frac{dP}{d\Gamma} (= P_0 P) \geq 0$ . Im allgemeinen wird  $P_0$  mit  $\Gamma$  anwachsen (s. Abbildung 4.2).

$$P_0 \rightarrow 1 \quad \text{für} \quad \Gamma \rightarrow \infty . \quad (4.17)$$

Die Tatsache, dass  $P$  unabhängig von  $Q$  und  $R$  ist, stellt eine erfreuliche Vereinfachung dar, die die weitere analytische Vorgehensweise erst möglich macht.

##### 4.2.1 Lösung von $P(\alpha, \Gamma)$

Da in (4.16) nur der Normierungsfaktor  $P_0 P$  eingeht, kann man die Lösung der Gleichung (4.16) rein aus Normierungsüberlegungen erhalten. Es gilt

$$\begin{aligned} \alpha &= \ln \left( \frac{\Omega}{J} \right) = \ln \left( \frac{\Omega_I}{J} \frac{\Omega}{\Omega_I} \right) = \ln \left( \frac{\Omega}{\Omega_I} \right) + \ln \left( \frac{\Omega_I}{J} \right) \\ &= \alpha(\Omega = \Omega_I) - \Gamma \\ &= \alpha(\Gamma = 0) - \Gamma , \end{aligned} \quad (4.18)$$

also

$$\alpha(\Gamma = 0) = \alpha + \Gamma . \quad (4.19)$$

#### 4 Die kritischen Verteilungen

Vor der Renormierung ( $\Omega = \Omega_I$ ) sei die ursprüngliche Verteilung  $P_{Anfang}$  vorgegeben

$$P(\alpha, \Gamma = 0) = P_{Anfang}(\alpha) . \quad (4.20)$$

Auf der Skala  $\Gamma$  hat sich die Verteilung mit (4.18) gemäß

$$P(\alpha, \Gamma) \propto P_{Anfang}(\alpha + \Gamma) \quad (4.21)$$

aus  $P_{Anfang}$  entwickelt. Da diese Verteilung auf 1 normiert sein muss, ist

$$P(\alpha, \Gamma) = P_{Anfang}(\alpha + \Gamma) N_\Gamma \quad (4.22)$$

mit einem Energie abhängigen Normierungsfaktor  $N_\Gamma$

$$N_\Gamma = \frac{1}{\int P_{Anfang}(\alpha + \Gamma) d\alpha} . \quad (4.23)$$

Dies ist die normierte Lösung von (4.16), wie man durch Einsetzen beweist.

Da man es mit Integralverteilungen zu tun hat, muss beim Wechsel auf logarithmische Variablen auch das Maß transformiert werden<sup>4</sup>

$$\int P_{Anfang}(J, \Omega_I) dJ \stackrel{!}{=} \int P(\alpha, 0) d\alpha . \quad (4.24)$$

Mit (4.18) ist

$$dJ = -Jd\alpha = -\Omega_I e^{-\alpha} d\alpha . \quad (4.25)$$

Da die Integration über die Variable  $J$  von 0 bis  $\Omega_I$ , die über  $\alpha$  jedoch von  $\infty$  bis 0 reicht, hebt sich das Minuszeichen weg (Umkehr der Integrationsgrenzen)

$$P_{Anfang}(\Omega_I e^{-\alpha}) \Omega_I e^{-\alpha} d\alpha = P(\alpha, 0) d\alpha . \quad (4.26)$$

Mit (4.26) kann die Verteilung  $P$  bei beliebiger, vorgegebener Anfangsverteilung bestimmt werden.

Für 4 Fälle von  $P_{Anfang}$  wird  $P(\alpha, \Gamma)$  nun berechnet:

- Wenn die Ursprungsverteilung einem Potenzgesetz (*power law*) gehorcht, erhält man ein besonders einfaches Resultat. Sei also

$$P_{Anfang}(J) \propto \frac{1}{J^{b_p}} \quad (4.27)$$

---

<sup>4</sup>Man benutzt dieselben Buchstaben für die Verteilungen, obwohl  $P(J)$  und  $P(\alpha)$  unterschiedliche Funktionen sind. Durch die Angabe der Argumente sollte allerdings keine Verwechslungsgefahr bestehen.

#### 4 Die kritischen Verteilungen

mit einer positiven Konstanten  $b_p$ , welche ein Maß für die Breite der Verteilung ist. Nach (4.26) ist ( $\Omega_I = 1$ )

$$P_{Anfang}(J) dJ = e^{\alpha b_p} e^{-\alpha} = e^{-\alpha(1-b_p)} d\alpha \quad (4.28)$$

und damit

$$P_{Anfang}(\alpha + \Gamma) = e^{-(\alpha+\Gamma)(1-b_p)} . \quad (4.29)$$

Der Normierungsfaktor ist

$$N_\Gamma = \frac{1}{\int e^{-(\alpha+\Gamma)(1-b_p)} d\alpha} = \frac{(1-b_p)}{e^{-\Gamma(1-b_p)}} . \quad (4.30)$$

Die Faktoren  $e^\Gamma$  kürzen sich heraus und (4.27) führt auf

$$P(\alpha, \Gamma) = p e^{-\alpha p} \quad (4.31)$$

$$P_0(\Gamma) = p . \quad (4.32)$$

mit  $1 - b_p = p$ .

Da eine Wahrscheinlichkeitsverteilung positiv definit ist, muss  $p > 0$  gelten. Die Form (4.32) ist die einzige normierte Lösung von (4.16), die nicht von  $\Gamma$  abhängig ist<sup>5</sup>. Dies vereinfacht die weiteren Rechnungen erheblich, weil die Bestimmungsgleichungen für  $R(\delta, \Gamma)$  und  $Q(\rho, \Gamma)$  die Funktion  $P_0$  enthalten werden.

- Für eine exponentiell abfallende Anfangsverteilung  $e^{-b_e J}$  mit Breite  $\xi_e = 1/b_e$  ergibt die analoge Rechnung

$$P(\alpha, \Gamma) = \frac{b_e e^{\left(b_e e^{-\Gamma} [1 - e^{-\alpha}] - \alpha - \Gamma\right)}}{e^{b_e e^{-\Gamma}} - 1} \quad (4.33)$$

$$P_0(\Gamma) = \frac{b_e e^{-\Gamma}}{e^{b_e e^{-\Gamma}} - 1} . \quad (4.34)$$

- Für eine Gaußverteilung  $e^{-b_g J^2}$  mit Breite  $\xi_g = 1/\sqrt{b_e}$  erhält man

$$P(\alpha, \Gamma) = \frac{2\sqrt{b_g} e^{(-b_g e^{-2\alpha-2\Gamma} - \alpha - \Gamma)}}{\sqrt{\pi} \operatorname{erf}(\sqrt{b_g} e^{-\Gamma})} \quad (4.35)$$

$$P_0(\Gamma) = \frac{2\sqrt{b_g} e^{(-b_g e^{-2\Gamma} - \Gamma)}}{\sqrt{\pi} \operatorname{erf}(\sqrt{b_g} e^{-\Gamma})} , \quad (4.36)$$

---

<sup>5</sup>Ein Spezialfall liegt für  $p = 1$  vor, dies entspricht  $P_{Anfang} = \text{const.}$

#### 4 Die kritischen Verteilungen

wobei die *error function*  $\operatorname{erf}(x)$  durch

$$\operatorname{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x dt e^{-t^2} \quad (4.37)$$

definiert ist.

- Für eine Cauchyverteilung  $\frac{1}{s\pi(1+\frac{x^2}{s^2})}$  mit Zentrum bei 0 und Breite  $s$  findet man

$$P(\alpha, \Gamma) = \frac{e^{-\alpha-\Gamma}}{s \left[ 1 + \frac{e^{-2\alpha-2\Gamma}}{s^2} \right] \arctan\left(\frac{e^{-\Gamma}}{s}\right)} \quad (4.38)$$

$$P_0(\Gamma) = \frac{e^{-\Gamma}}{s \left[ 1 + \frac{e^{-2\Gamma}}{s^2} \right] \arctan\left(\frac{e^{-\Gamma}}{s}\right)}. \quad (4.39)$$

Die Funktion  $P_0$  wächst mit  $\Gamma$  an (Abbildung 4.2). Im Laufe der Renormierung wächst also die Wahrscheinlichkeit, dass ein  $J$  dezimiert wird. Dabei ist die Wahrscheinlichkeit um so höher, je breiter die Anfangsverteilung ist (siehe Abbildung 4.4). Um mit der Annahme aus 3.2 konsistent zu sein, werden breite Anfangsverteilungen gewählt (in späteren Plots z.B. meist  $p = 0.9$  oder  $\xi_e = \xi_g = 1$ ).

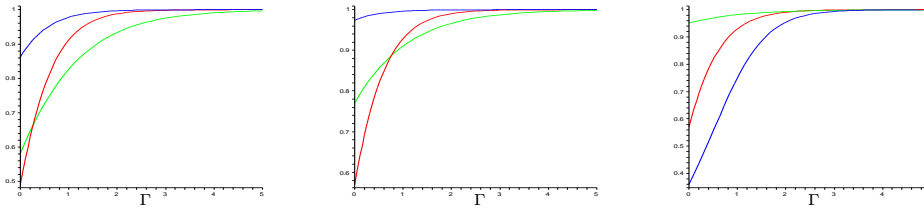


Abbildung 4.2: In den Bildern sieht man  $P_0(\Gamma)$  für diverse Anfangsverteilungen und unterschiedlichen Breiten dieser Anfangsverteilungen. Für große  $\Gamma$  strebt  $P_0$  gegen 1. Rot steht für (4.36), blau für (4.34) und grün für (4.39). Die Parameter sind  $b_g = 1, b_e = 1, s = 2$  (Links),  $b_g = 0.5, b_e = 0.8, s = 5$  (Mitte) und  $b_g = 0.8, b_e = 0.1, s = 0.5$  (Rechts).

## 4 Die kritischen Verteilungen

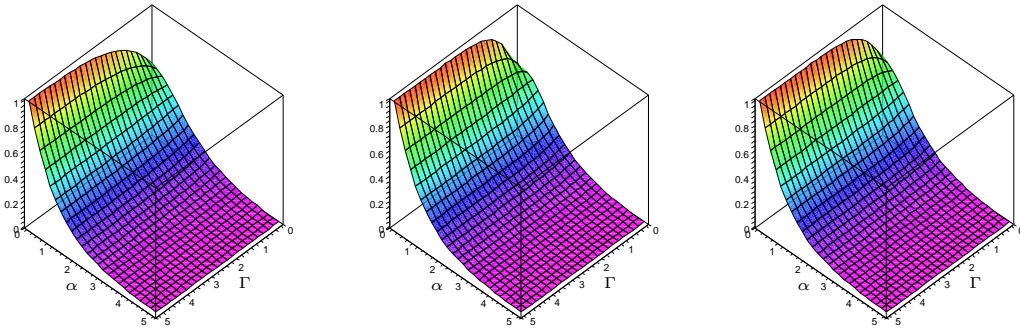


Abbildung 4.3: Verteilungsfunktion  $P(\alpha, \Gamma)$  für verschiedene Ausgangsverteilungen (von links nach rechts): Exponentialverteilung (4.34), Gaußverteilung (4.36) und Cauchyverteilung (4.39). Die Parameter, mit denen die Plots erstellt wurden, sind  $b_e = 1$ ,  $b_g = 1$  und  $s = 1$ .

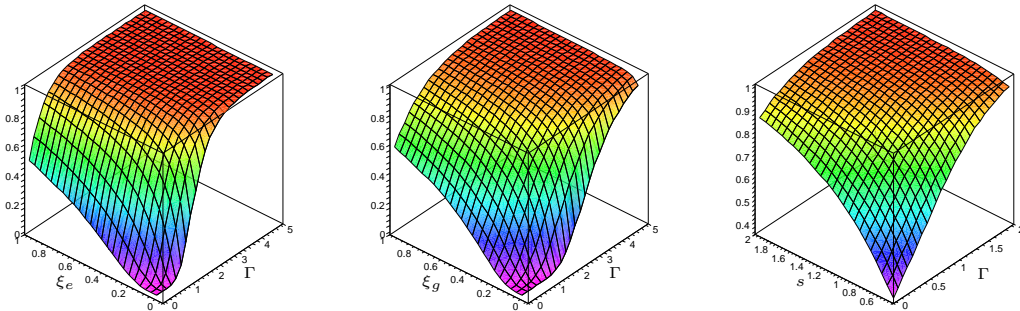


Abbildung 4.4:  $P_0$  in Abhängigkeit von der Breite der Ausgangsverteilung (von links nach rechts): Exponentialverteilung (4.34), Gaußverteilung (4.36) und Cauchyverteilung (4.39).  $P_0$  hängt stark von der Breite der ursprünglichen Verteilung ab. Da  $P_0$  auch in die Bestimmungsgleichung für  $R$  und  $Q$  eingehen wird, hängen somit auch diese Verteilungen von der Breite von  $P_{Anfang}$  ab.

### 4.3 Die Verteilung $R(\delta, \Gamma)$

Jede Dezimierung eines Kettengliedes führt zu einer Renormierung der Hüpfmatrixelemente. Die neue Kopplung  $\tilde{t}_j$  ist je nach Situation eine Funktion von  $V_i$  (3.4),  $t_i$  (3.5) oder  $J_i$  (3.6).

Die Flussgleichung für  $R$  hängt somit von den anderen beiden Verteilungen ab. Eine

#### 4 Die kritischen Verteilungen

geschlossene, analytische Darstellung der Lösung wird, wie sich zeigt, nur unter weiteren Annahmen möglich sein.

Die Verteilung  $R$  enthält darüber hinaus Informationen über die Länge der Spinkette, was erst im Abschnitt 4.6 diskutiert werden wird.

Die neu gebildeten Hüpfmatrixelemente setzen sich in logarithmischen Variablen additiv zusammen

$$\begin{aligned}
 \tilde{\delta} &= \ln \left( \frac{\Omega}{\tilde{t}} \right) = \ln \left( \frac{\Omega}{\frac{t_1 t_2}{\Omega}} \right) \\
 &= \ln \left( \frac{\Omega^2}{t_1 t_2} \right) = \ln \left( \frac{\Omega}{t_1} \right) + \ln \left( \frac{\Omega}{t_2} \right) \\
 &= \delta_1 + \delta_2 .
 \end{aligned} \tag{4.40}$$

Da die  $\delta$ 's jeweils gemäß  $R$  verteilt sind, wird bei der Bildung von  $\tilde{\delta}$  ein Faltungsintegral

$$\begin{aligned}
 [R \otimes R](\delta, \Gamma) &= \int_{\delta_2 = \delta - \delta_1} R(\delta_1, \Gamma) R(\delta_2, \Gamma) d\delta_1 d\delta_2 \\
 &= \int R(\delta', \Gamma) R(\delta - \delta', \Gamma) d\delta'
 \end{aligned} \tag{4.41}$$

in der Bestimmungsgleichung für  $R$  auftauchen.

Die Überlegungen zur Herleitung der Differentialgleichung der Verteilung  $R$  sind analog zu Abschnitt (4.2).

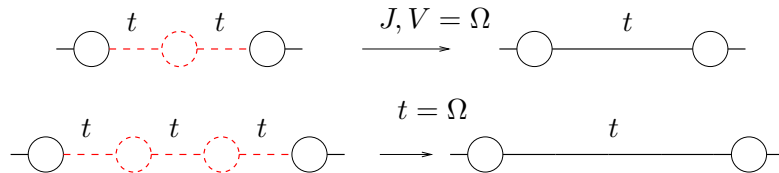


Abbildung 4.5: Herleitung für die Verteilung  $R$  der Kopplung  $t$ : Im **oberen Bild** wird eine Kopplung  $J$  oder  $V$  dezimiert. Die Kette verliert effektiv eine Kopplung vom Typ  $t$ . **Unten** sieht man schematisch die Renormierung eines  $t$ . Die Kette verliert effektiv jeweils 2 Kopplungen vom Typ  $J$  und  $Q$ , sowie 2  $t$ 's, die ein neues Hüpfmatrixelement bilden.

Wird ein  $t_i$  selbst renormiert (mit Wahrscheinlichkeit  $R_0$ ) so verliert man eine Kopplung  $t_i$  und die 2 benachbarten Kopplungen  $t_{i-1}$  und  $t_{i+1}$  verschmelzen zu einem neuen Hüpfmatrixelement. Dies liefert die 2 Terme

$$-2R_0 R + R_0 R \otimes R . \tag{4.42}$$



#### 4 Die kritischen Verteilungen

Die Verteilung  $R$  verliert beim Übergang von  $\Gamma$  nach  $\Gamma + d\Gamma$  effektiv 2 Kopplungen vom Typ  $t$  (4-2=2 siehe Abbildung 4.5 rechts) und damit einen Anteil  $+2R_0 R$ , der wegen der Normerhaltung kompensiert werden muss:

$$+2R_0 R. \quad (4.43)$$

Gäbe es nur Kopplungen vom Typ  $t$ , hätte man also

$$\frac{\partial R}{\partial \Gamma} = \frac{\partial R}{\partial \delta} + R_0 R \otimes R. \quad (4.44)$$

Allerdings führt auch die Renormierung von  $J$  und  $V$  zur Bildung eines neuen Hüpfmatrixelements und damit insgesamt zu einem weiteren Beitrag für (4.44) in der Form

$$(R_0 + P_0 + Q_1 + Q_{-1})R \otimes R. \quad (4.45)$$

Bei der Dezimierung eines Kettengliedes —  $V = \Omega$  oder  $J = \Omega$  — hat man wieder wie in Abschnitt (4.2) die Möglichkeit, dass ein  $t$  links oder rechts an das zu dezimierende Glied stößt ( $-2Q_1 R$  bzw.  $-2Q_{-1} R$  oder  $-2P_0 R$ ).

Effektiv verliert man bei der Dezimierung den Anteil  $Q_1 R$  bzw.  $Q_{-1} R$  oder  $P_0 R$ , der wegen der Normerhaltung kompensiert werden muss.

Zusammengefasst erhält man also

$$\frac{\partial R}{\partial \Gamma} = \frac{\partial R}{\partial \delta} + (R_0 + P_0 + Q_1 + Q_{-1})R \otimes R - (P_0 + Q_1 + Q_{-1})R. \quad (4.46)$$

Die Terme  $\frac{\partial R}{\partial \Gamma}$  und  $\frac{\partial R}{\partial \delta}$  stammen wieder von der totalen Ableitung bezüglich  $\Gamma$ .

Die Gleichung für  $P$  und damit  $P_0$  wurde schon gelöst.

Obwohl die Funktion  $Q_1 + Q_{-1}$  zu diesem Zeitpunkt noch nicht bekannt ist, lässt sich die partielle Differentialgleichung (4.46) durch einen passend gewählten Ansatz auf eine gewöhnliche Differentialgleichung reduzieren. Dies wird nun besprochen.

##### 4.3.1 Lösung von $R(\delta, \Gamma)$

Die Faltung  $R \otimes R$  bezüglich  $\delta$  legt es nahe, folgenden Exponentialansatz zu verwenden<sup>6</sup>

$$R(\delta, \Gamma) = c(\Gamma) e^{-\delta c(\Gamma)}. \quad (4.47)$$

Einsetzen in (4.46) und Kürzen des gemeinsamen Faktors  $e^{-\delta c(\Gamma)}$  liefert

$$\begin{aligned} \frac{dc(\Gamma)}{d\Gamma} - \delta c(\Gamma) \frac{dc(\Gamma)}{d\Gamma} + c(\Gamma)^2 = \\ (c(\Gamma) + P_0(\Gamma) + Q_1(\Gamma) + Q_{-1}(\Gamma)) \delta c(\Gamma)^2 - (P_0(\Gamma) + Q_1(\Gamma) + Q_{-1}(\Gamma)) c(\Gamma). \end{aligned} \quad (4.48)$$

<sup>6</sup>Allgemein könnte man auch  $R(\delta, \Gamma) = c_1(\Gamma) e^{-\delta c_2(\Gamma)}$  ansetzen, aber wegen der Normierungsbedingung führt dies sofort auf  $c_1(\Gamma) = c_2(\Gamma)$ .

#### 4 Die kritischen Verteilungen

Da diese Gleichung für beliebige  $\delta$  gelten muss, kann man (4.48) in 2 Bedingungen für die unbekannte Funktion  $c(\Gamma)$  aufspalten

$$-\delta c \frac{dc}{d\Gamma} = (c + P_0 + Q_1 + Q_{-1}) \delta c^2 \quad (4.49)$$

$$\frac{dc}{d\Gamma} + c^2 = -(P_0 + Q_1 + Q_{-1}) c. \quad (4.50)$$

Diese Gleichungen führen beide auf <sup>7</sup>

$$\frac{dc}{d\Gamma} + (P_0 + Q_1 + Q_{-1}) c + c^2 = 0. \quad (4.51)$$

Die Nebenbedingungen sind dabei, dass  $c(\Gamma)$  positiv ist und eine hinreichende Breite der resultierenden Verteilungen  $R$ , um mit der RG Prozedur konsistent zu bleiben.

Allerdings muss man nun die Funktionen  $Q_1(\Gamma)$  und  $Q_{-1}(\Gamma)$  selbst-konsistent mit  $c(\Gamma)$  bestimmen, da die Gleichung für  $Q$  auch wieder von  $R$  und damit von  $c(\Gamma)$  abhängen wird, wie im nächsten Abschnitt gezeigt werden wird.

Dieses Problem kann ohne weitere Annahmen nur numerisch behandelt werden.

Da in (4.51) die Terme  $(P_0 + Q_1 + Q_{-1})$  und  $c^2$  positiv semidefinit sind, ist  $\frac{dc}{d\Gamma} \leq 0$ .

Damit ist  $c(\Gamma)$  eine fallende Funktion (siehe Abbildung 4.7) mit

$$c(\Gamma) \rightarrow 0 \quad \text{für} \quad \Gamma \rightarrow \infty. \quad (4.52)$$

Nach Ansatz (4.47) ist

$$c(\Gamma) = R_0(\Gamma). \quad (4.53)$$

Daher sinkt für wachsendes  $\Gamma$  die Wahrscheinlichkeit, dass eine Kopplung  $t$  ausintegriert wird.

Bis hierher konnte alles exakt gelöst werden, im folgenden Unterabschnitt werden einige Näherungen untersucht, um die Gleichung (4.51) lösen zu können.

#### 4.3.2 Lösung von $c(\Gamma)$

Um (4.46) von der Gleichung für  $Q$  (4.75) zu entkoppeln, kann man als größte Simplifizierung

$$Q_1 + Q_{-1} = 0 \quad \text{für} \quad \Gamma < \Gamma^*. \quad (4.54)$$

setzen. Auf der anfänglichen Längen- bzw. Energieskala sind also keine *on-site* Energien vorhanden. Erst im Laufe der RG bilden sich endliche  $V_i$ 's heraus, bis bei der Energie  $\Gamma^*$

---

<sup>7</sup>Die Umformung gilt für  $c \neq 0$  und  $\delta \neq 0$ , was man sowieso voraussetzen muss, wenn man nicht an trivialen Lösungen interessiert ist.

#### 4 Die kritischen Verteilungen

zum ersten mal ein lokales Potential die (betragsmäßig) größte Kopplung ist. Spätestens hier würde diese Näherung zusammenbrechen.

Der nächste, nicht ganz so triviale Schritt, bestünde im Ansatz  $Q_1 + Q_{-1} = q = \text{const.}$  Für die beiden Fälle  $q = 0$  und  $q = 1$ <sup>8</sup> können analytische Lösungen angegeben werden.

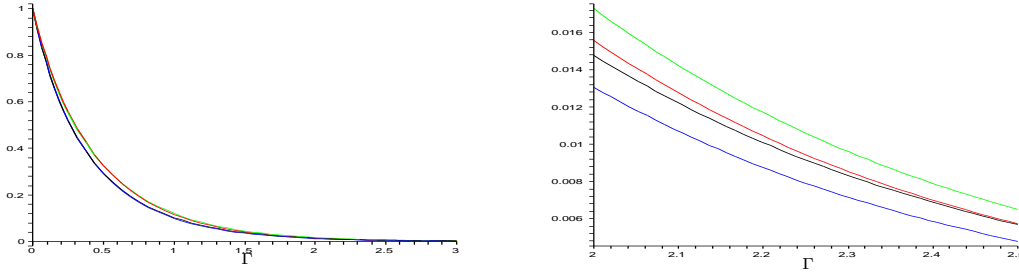


Abbildung 4.6: Die Funktion  $c(\Gamma)$  für verschiedene Formen von  $P_0$  mit  $Q_1 + Q_{-1} = 1$ . Da die Kurven fast aufeinander liegen, gibt es im rechten Bild einen Ausschnitt  $\Gamma \in [2 \dots 2.5]$ . Man sieht in den Graphen (von oben nach unten): Exponential-, Gauß-, Potenzgesetz- und Cauchyverteilung für  $P_{\text{Anfang}}(J)$ . Die Integrationskonstanten wurden so gewählt, dass  $c(0) = 1$  gilt. Die Parameter in beiden Plots sind  $p = 0.9$ ,  $q = 1$ ,  $s = 2$ ,  $b_e = 1$  und  $b_g = 1$ .

- Für die Verteilung  $P_0$  wird zunächst das Ergebnis für die Anfangsverteilung (4.27) eingesetzt, also  $P_0 = p = \text{const.}$  Da  $p$  und  $q$  lediglich Konstanten sind, kann man (4.51) direkt integrieren und erhält

$$c(\Gamma) = \frac{1}{c_1 e^{(p+q)\Gamma} - 1/(p+q)} \quad (4.55)$$

mit einer positiven Integrationskonstante  $c_1$ . Diese muss so gewählt werden, dass  $R_0 > 0$  ist. Dies gilt für<sup>9</sup>

$$c_1 > 1/(p+q) . \quad (4.56)$$

Für diesen Ansatz fällt  $c(\Gamma)$  exponentiell mit  $\Gamma$  ab (siehe Abbildung 4.6).

- Wählt man  $P_0$  gemäß (4.34) und nimmt wieder  $Q_1 + Q_{-1} = 0$  an, so erhält man<sup>10</sup>

$$c(\Gamma) = \frac{1 - e^{-b_e e^{-\Gamma}}}{\Gamma + \text{Ei}(1, b_e e^{-\Gamma}) + C_1} \quad (4.57)$$

<sup>8</sup>Die Variante  $Q_1 + Q_{-1} = 1$  wird sich im nächsten Abschnitt im Grenzfall  $\Gamma \rightarrow \infty$  für einige spezielle Verteilungen von  $V$  ergeben. Dieser Ansatz verspricht also Selbst-Konsistenz bei großen Energien.

<sup>9</sup>Normiert man auf  $c(0) = 1$ , so ist  $c_1 = 1 + 1/(p+q)$ .

<sup>10</sup> $Ei(1, x) = PV(\int_{-\infty}^x \frac{e^t}{t} dt)$  wobei  $PV$  für *principal value* also Hauptwert steht.

#### 4 Die kritischen Verteilungen

mit einer positiven Integrationskonstanten  $C_1$ .

- Für  $P_0$  aus (4.34) und  $Q_1 + Q_{-1} = 1$  ergibt sich

$$c(\Gamma) = \frac{-b_e(e^{b_e e^{-\Gamma}} - 1)}{b_e e^{b_e e^{-\Gamma}} + e^\Gamma - C_2 b_e e^{b_e e^{-\Gamma} + \Gamma}} \quad (4.58)$$

mit einer Integrationskonstanten  $C_2 > 2$ . Normiert man auf  $c(0) = 1$  so gilt für die Konstante

$$C_2 = 2 - \frac{b_e - 1}{b_e} e^{-b_e}.$$

Diese Lösung fällt für große  $\Gamma$  wieder ab wie  $e^{-b_e \Gamma}$ .

- Wählt man unter Beibehaltung von  $Q_1 + Q_{-1} = 1$  eine Gauß- oder Cauchyverteilung, kann nicht mehr ein einfacher Ausdruck für die Stammfunktion gefunden werden. Die numerische Integration von (4.51) kann jedoch leicht vollzogen werden. Das Verhalten von  $c(\Gamma)$  ist in allen betrachteten Fällen wieder dem von (4.55) sehr ähnlich (s. Abbildung 4.6).

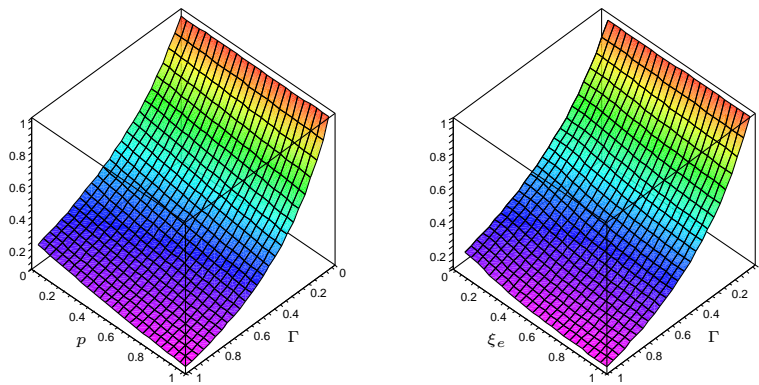


Abbildung 4.7: Die Verteilung  $R_0$  als Funktion der Breite der Verteilung  $P_{Anfang}$ . **Links:** Potenzverteilung ( $P_0$  nach 4.32) und **rechts** eine exponentiell abfallende Verteilung von  $J$  ( $P_0$  nach (4.34)). Die Funktion  $R_0 = c(\Gamma)$  (normiert auf  $c(0) = 1$ ) hängt nur schwach von der Breite der Anfangsverteilung für  $J$ 's ab.

Für alle betrachteten Fälle wächst die Breite von  $R(\alpha, \Gamma)$  mit zunehmenden  $\Gamma$  an wie Abbildung 4.8 nochmals verdeutlicht. Die Gleichung (4.51) wird später in die Gleichung für  $Q$  eingehen.

## 4 Die kritischen Verteilungen

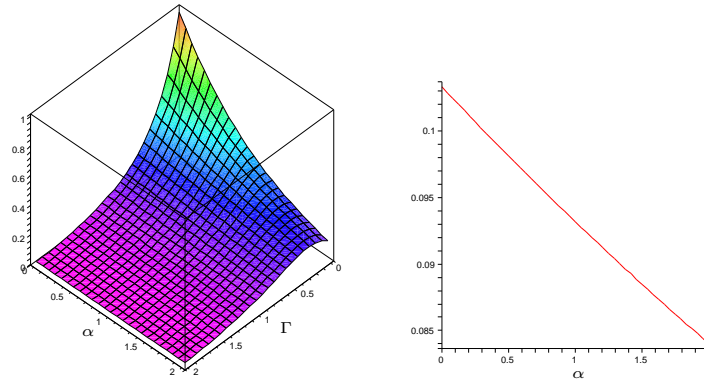


Abbildung 4.8: Die Verteilung  $R$  als Funktion von  $\Gamma$ . **Links** sieht man  $R(\alpha, \Gamma)$  mit  $R_0 = c$  aus (4.55). Die Parameter sind  $p + q = 1.9$ . **Rechts** sieht man einen Schnitt durch den linken Plot mit  $\Gamma = 1$ , um das Anwachsen der Breite von  $R$  mit  $\Gamma$  besser sehen zu können. Diese Verteilung ist also konsistent mit der Voraussetzung aus 3.2.

### 4.4 Die Verteilung $Q(\rho, \Gamma)$

Die Verteilung der *on-site* Energien erweist sich als am schwierigsten zu handhaben. Im Gegensatz zu  $\alpha$  und  $\delta$  ist  $\rho$  keine logarithmische Variable, was sich in der Form des Normerhaltenden Beitrags niederschlagen wird. Die totale Ableitung nach  $\Gamma$  lautet diesmal<sup>11</sup>

$$\frac{dQ}{d\Gamma} = \frac{\partial Q}{\partial \Gamma} + \frac{\partial Q}{\partial \rho} \frac{\partial \rho}{\partial \Gamma} = \frac{\partial Q}{\partial \Gamma} + \rho \frac{\partial Q}{\partial \rho} \quad (4.59)$$

Die Argumentation zur Herleitung der Differentialgleichung verläuft wieder analog zu den vorangegangenen Kapiteln.

Bei der Dezimierung einer Kopplung  $t$  verliert man  $2V$ 's (entspricht dem Beitrag  $-2R_0Q$ ) und bei der Dezimierung einer Kopplung  $J$  ein Potential  $V$  (also  $-P_0Q$ ). Insgesamt muss der Verlust von  $(2R_0 + Q_0 + P_0)Q$  Kopplungen kompensiert werden.

Alle obigen Terme zusammengefasst ergeben den resultierenden Normerhaltungsfaktor  $+Q_0Q$ , wobei die Abkürzung

$$Q_0Q = (Q_1 + Q_{-1} - 1)Q \quad (4.60)$$

verwendet wurde.

Der zusätzliche Beitrag  $-Q$  im Normiertheit garantierenden Faktor stammt von der Wahl nicht-logarithmischer Variablen und wird in Anhang E hergeleitet.

Bei der Dezimierung einer Kopplung  $J$  oder  $V$  entstehen neue *on-site* Energien. Die renormierten Kopplungen vom Typ  $\tilde{V} = V - t^2/\Omega$  schreiben sich in den neuen Variablen gemäß

<sup>11</sup>Es ist  $\rho = V e^\Gamma$  und damit  $\frac{\partial \rho}{\partial \Gamma} = \rho$ .

#### 4 Die kritischen Verteilungen

$$\frac{\tilde{V}}{\Omega} = \frac{V}{\Omega} - \frac{t^2}{\Omega^2} = \rho - e^{-2\delta} \quad (4.61)$$

und die renormierte Kopplung ist somit

$$\tilde{\rho} = \rho - e^{-2\delta} . \quad (4.62)$$

Die Bildung der neuen *on-site* Energien  $\tilde{\rho}$  kann diesmal nicht als Faltungsintegral ausgedrückt werden, wie es bei der Verteilung  $R$  der Fall gewesen war. Stattdessen schreibt sich die Evolution der neuen Kopplung als folgendes Integral

$$\Delta_+ = \int Q(\rho, \Gamma) R(\delta, \Gamma) \delta(\rho - (\tilde{\rho} + e^{-2\delta})) d\rho d\delta, \quad (4.63)$$

welches in die Bestimmungsgleichung für  $Q$  eingehen wird. In (4.63) geht die Verteilung  $R$  direkt ein, welche durch den Ansatz (4.47) wiederum von  $Q_1 + Q_{-1}$  abhängt. Allerdings gibt es noch einen weiteren Beitrag.

Im Laufe der Renormierung können die *on-site* Energien negative oder positive Werte annehmen. Falls ein  $V$  negativ ist, aber die betragsmäßig größte Kopplung darstellt (oder für den Fall  $\sigma = \downarrow$  in (3.104) ), gilt

$$\tilde{V} = V - t^2/\Omega = V + t^2/|\Omega| \quad (4.64)$$

und man erhält entsprechend einen Beitrag in der Form

$$\Delta_- = \int Q(\rho, \Gamma) R(\delta, \Gamma) \delta(\rho - (\tilde{\rho} - e^{-2\delta})) d\rho d\delta. \quad (4.65)$$

Die Integration über  $\rho'$  ist trivial. Man erhält

$$\int Q(\rho \pm e^{-2\delta}, \Gamma) R(\delta, \Gamma) d\delta = \Delta_{\pm}(\rho, \Gamma). \quad (4.66)$$

Da  $\rho \in [-1, 1]$  ist, gilt für das Argument von  $Q$  in  $\Delta_+$

$$-1 \leq \rho + e^{-2\delta} \leq 1 \quad (4.67)$$

$$-\frac{1}{2} \ln(-1 - \rho) \geq \delta \geq -\frac{1}{2} \ln(1 - \rho). \quad (4.68)$$

Der Term  $-\frac{1}{2} \ln(-1 - \rho)$  ist nur für Werte außerhalb des Definitionsbereichs von  $\rho$  definiert, deshalb gilt sogar

$$0 \geq \delta \geq -\frac{1}{2} \ln(1 - \rho). \quad (4.69)$$

#### 4 Die kritischen Verteilungen

Da  $\delta$  nach Definition keine negativen Werte annehmen kann, ist die Ungleichung nur für  $\rho \in [0, 1]$  erfüllt. Analog betrachtet man die Situation für  $\Delta_-$ :

$$-1 \leq \rho - e^{-2\delta} \leq 1 \quad (4.70)$$

$$-\frac{1}{2} \ln(1 + \rho) \leq \delta \leq -\frac{1}{2} \ln(\rho - 1) \quad (4.71)$$

$$-\frac{1}{2} \ln(1 + \rho) \leq \delta \leq 0. \quad (4.72)$$

Die Ungleichungen gelten für  $\rho \in [-1, 0]$ . Die Integrationsgrenzen für (4.66) müssen entsprechend eingeschränkt werden<sup>12</sup>

$$\Delta_+ = \int_0^{-\frac{1}{2} \ln(1-\rho)} Q(\rho + e^{-2\delta}) R(\delta) d\delta \quad (4.73)$$

$$\Delta_- = \int_0^{-\frac{1}{2} \ln(1+\rho)} Q(\rho - e^{-2\delta}) R(\delta) d\delta. \quad (4.74)$$

Nun kann man die Bestimmungsgleichung für  $Q$  aufstellen

$$\frac{\partial Q}{\partial \Gamma} + \rho \frac{\partial Q}{\partial \rho} = (P_0 + Q_+) \Delta_+(\rho, \Gamma) + (P_0 + Q_-) \Delta_-(\rho, \Gamma) + (Q_1 + Q_{-1} - 1) Q. \quad (4.75)$$

Zusammen mit (4.46) stellt (4.75) eine gekoppelte Integro-Differentialgleichung dar. Setzt man (4.47) für  $R$  in (4.75) ein, erhält man das Gleichungssystem

$$\begin{aligned} \frac{\partial Q}{\partial \Gamma} + \rho \frac{\partial Q}{\partial \rho} &= (Q_1 + Q_{-1} - 1) Q \\ &+ (P_0 + Q_+) c(\Gamma) \int_0^{-\frac{1}{2} \ln(1-\rho)} Q(\rho + e^{-2\delta}) e^{-\delta c(\Gamma)} d\delta \\ &+ (P_0 + Q_-) c(\Gamma) \int_0^{-\frac{1}{2} \ln(1+\rho)} Q(\rho - e^{-2\delta}) e^{-\delta c(\Gamma)} d\delta \end{aligned} \quad (4.76)$$

$$\frac{dc}{d\Gamma} + (P_0 + Q_1 + Q_{-1}) c + c^2 = 0. \quad (4.77)$$

<sup>12</sup>Die Abhängigkeit von  $\Gamma$  wurde der Übersicht zuliebe unterdrückt.

#### 4.4.1 Lösung von $Q(\rho, \Gamma)$

Da sich das gekoppelte Gleichungssystem für  $c(\Gamma)$  und  $Q(\rho, \Gamma)$  nicht ohne Computerhilfe lösen lässt, werden im folgenden 2 Vereinfachungen vorgeschlagen.

- Um die Probleme bereitenden Integrale  $\Delta_+$  und  $\Delta_-$  (4.66) zu vereinfachen, kann man den groben Ansatz

$$Q(\rho \pm e^{-2\delta}, \Gamma) \approx Q(\rho, \Gamma) \quad (4.78)$$

machen. Diese Näherung bedeutet, die Bildung neuer  $V$ 's zu vernachlässigen, also

$$\tilde{V} \approx V.$$

Dies ist gerechtfertigt, wenn nur Hüpfmatrixelemente die größte Energieskala bilden, denn bei der Renormierung der  $t$ 's werden keine neuen *on-site* Energien gebildet.

Wenn die in 4.3.2 gefundenen Lösungen für  $c(\Gamma)$  eine gute Näherung der wahren Verteilung darstellen, so werden tatsächlich am Anfang der Renormierung hauptsächlich  $t$ 's dezimiert. Für kleine  $\Gamma$  ist ja  $c(\Gamma) \approx 1 > P_0$ . Mit Hilfe der Näherung (4.78) kann man das verbleibende Integral in (4.66) sofort berechnen.

Man erhält

$$\begin{aligned} \Delta_+(\rho, \Gamma) &= Q(\rho, \Gamma) [(1 - \rho)^{c(\Gamma)/2} - 1] \\ \Delta_-(\rho, \Gamma) &= Q(\rho, \Gamma) [(1 + \rho)^{c(\Gamma)/2} - 1]. \end{aligned} \quad (4.79)$$

Damit ergibt sich die Gleichung

$$\begin{aligned} \frac{\partial Q}{\partial \Gamma} + \rho \frac{\partial Q}{\partial \rho} &= (Q_1 + Q_{-1} - 1)Q \\ &+ [(1 - \rho)^{c(\Gamma)/2} - 1](P_0 + Q_1) Q \Theta(\rho) \\ &+ [(1 + \rho)^{c(\Gamma)/2} - 1](P_0 + Q_{-1}) Q \Theta(-\rho). \end{aligned} \quad (4.80)$$

Die Heaviside- oder Stufenfunktion  $\Theta(x)$  stellt dabei sicher, dass  $\rho \in [0, 1]$  bzw.  $\rho \in [-1, 0]$  liegt. Da für  $\Gamma \approx 0$  die Funktion  $R_0 = c(\Gamma)$  ihr Maximum annimmt<sup>13</sup>, besteht eine weitere Simplifizierung in der Annahme

$$c(0) \simeq 1. \quad (4.81)$$

Eine entkoppelte Lösung für kleine Werte von  $\Gamma$  findet sich somit in der Form

<sup>13</sup>Wieder unter den Näherungen aus Abschnitt 4.3.2 und der Voraussetzung, dass sich  $c$  selbst-konsistent aus  $Q$  folgern lässt.



#### 4 Die kritischen Verteilungen

$$\begin{aligned} \frac{\partial Q}{\partial \Gamma} + \rho \frac{\partial Q}{\partial \rho} &= (Q_1 + Q_{-1} - 1)Q \\ &+ [\sqrt{1 - \rho} - 1](P_0 + Q_1) Q \Theta(\rho) \\ &+ [\sqrt{1 + \rho} - 1](P_0 + Q_{-1}) Q \Theta(-\rho). \end{aligned} \quad (4.82)$$

Allerdings ist auch (4.82) nicht allgemein lösbar<sup>14</sup>.

- Nun betrachtet man die Situation nach vielen Renormierungsschritten, also für große  $\Gamma$ . Falls  $c(\Gamma)$  für große  $\Gamma$  schneller gegen 0 geht als<sup>15</sup>

$$(P_0 + Q_1) \int_0^{-\frac{1}{2} \ln(1-\rho)} Q(\rho + e^{-2\delta}) e^{-\delta c(\Gamma)} d\delta \quad \text{und} \quad (4.83)$$

$$(P_0 + Q_{-1}) \int_0^{-\frac{1}{2} \ln(1-\rho)} Q(\rho - e^{-2\delta}) e^{-\delta c(\Gamma)} d\delta \quad (4.84)$$

erhält man im Grenzfall

$$\Gamma \rightarrow \infty \quad (4.85)$$

die entkoppelte Lösung

$$\frac{\partial Q}{\partial \Gamma} + \rho \frac{\partial Q}{\partial \rho} = Q_0 Q. \quad (4.86)$$

Das Ergebnis – die totale Änderung bzgl.  $\Gamma$  ist gleich Normerhaltung– entspricht von der Struktur her der Differentialgleichung für  $P$ .

Da  $c(\Gamma)$  als Faktor vor den beiden Integralen (4.66) steht, fallen diese im Grenzfall  $c \rightarrow 0$  weg und man hat eine ähnliche Situation wie bei (4.78), nämlich die Vernachlässigung der Bildung neuer lokaler Potentiale, was (4.86) erklärt. Diese Form der Lösung (4.86) hatte man ja schon bei der Verteilung der  $J_s$ , bei denen ebenfalls keine neuen Kopplungen durch die RG generiert wurden.

Für die Lösung von (4.86) erwartet man wieder, dass  $Q_1 + Q_{-1}$  mit  $\Gamma$  anwächst (analog zu  $P_0$ ).

Die Lösung von (4.86) wird im weiteren Verlauf mit  $Q^\infty$  bezeichnet, um sie von der allgemeinen Lösung von (4.75) unterscheiden zu können.

Der erste Weg zur Herleitung von (4.86) ist etwas allgemeiner, da man auch mit dem

<sup>14</sup>Für  $Q_1 + Q_{-1} = \text{const}$ ,  $P_0 = \text{const}$ . und Annahme einer asymmetrischen Verteilung ( $\rho \in [0, 1]$  oder  $\rho \in [0, -1]$ ) kann man eine nur von  $\rho$  abhängende Lösung  $Q(\rho)$  finden.

<sup>15</sup>Wie schon besprochen ist  $P_0 \leq 1$  für  $\Gamma \rightarrow \infty$  und die in 4.3.2 gefundenen Lösungen fallen (exponentiell) schnell ab.

#### 4 Die kritischen Verteilungen

Zwischenergebnis (4.80) direkt weiter rechnen kann, ohne sich auf den Bereich (4.85) einzuschränken.

Die Grenzverteilung  $Q^\infty$  ist der „Fixpunkt“ der Verteilungen für die Klasse der Lösungen

$$c(\Gamma) \rightarrow 0 \quad \text{für } \Gamma \rightarrow \infty,$$

also für die Situation nach vielen RG Schritten. Für endliche (kleine) Werte von  $\Gamma$  erhält man gemäß (4.80) Korrekturen zu (4.86), die im hier interessierenden Niederenergiebereich jedoch vernachlässigt werden.

Im folgenden wird (4.86) gelöst.

Im Unterschied zur Kopplung  $J$  kann – wie schon gesagt –  $\rho$  auch negative Werte annehmen, was Probleme bereiten kann. Beschränkt man sich anfangs auf das Intervall  $\rho \in [0, 1]$  (die Argumentation für  $\rho \in [-1, 0]$  verläuft analog), werden im Laufe der Renormierung trotzdem negative  $V$ 's erzeugt werden. Aus einer auf positive  $\rho$ 's beschränkten Verteilung wird eine renormierte Verteilung erwachsen, die wieder den Bereich  $\rho \in [-1, 1]$  umfasst. Eine Verteilung  $Q(\rho)$  mit  $\rho > 0$  kann nur für kleine  $\Gamma$  eine sinnvolle Näherung der Lösung sein.

Da (4.86) für den Bereich großer  $\Gamma$  hergeleitet wurde, erwartet man eine um Null symmetrische Verteilung. Alle anfänglichen Asymmetrien, die bei der Skala  $\Omega_I$  gegeben sein könnten, werden im Laufe der RG unterdrückt<sup>16</sup>.

Am einfachsten ist es also, direkt von einer symmetrischen Anfangsverteilung der  $V$ 's auszugehen: (Es gilt  $Q_1^\infty = Q_{-1}^\infty$ .)

- Gaußverteilung  $e^{-b_V V^2}$  : Diese schreibt sich in der Variablen  $\rho$  und auf der Skala  $\frac{1}{\Gamma^{17}}$

$$Q^\infty(\rho, \Gamma) = \frac{\sqrt{b_V} e^{-b_V \rho^2} e^{-2\Gamma - \Gamma}}{\sqrt{\pi} \operatorname{erf}(\sqrt{b_V} e^{-\Gamma})} \quad (4.87)$$

$$Q^\infty(\rho = \pm 1, \Gamma) = \frac{\sqrt{b_V} e^{-b_V} e^{-2\Gamma - \Gamma}}{\sqrt{\pi} \operatorname{erf}(\sqrt{b_V} e^{-\Gamma})}. \quad (4.88)$$

- Cauchyverteilung mit Breite  $s_V$  und Zentrum bei  $V = 0$ :

$$Q^\infty(\rho, \Gamma) = \frac{1}{2 s_V e^\Gamma \left[ 1 + \frac{\rho^2 e^{-2\Gamma}}{s_V^2} \right] \arctan\left(\frac{e^{-\Gamma}}{s_V}\right)} \quad (4.89)$$

$$Q^\infty(\rho = \pm 1, \Gamma) = \frac{1}{2 s_V e^\Gamma \left[ 1 + \frac{e^{-2\Gamma}}{s_V^2} \right] \arctan\left(\frac{e^{-\Gamma}}{s_V}\right)}. \quad (4.90)$$

#### 4 Die kritischen Verteilungen

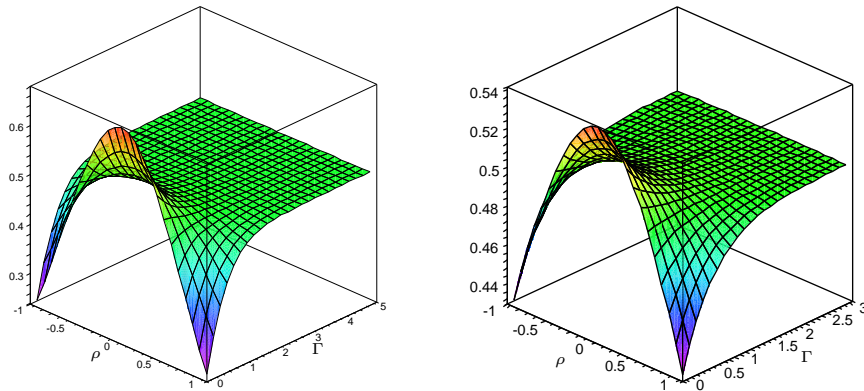


Abbildung 4.9: Die Verteilung  $Q^\infty(\rho, \Gamma)$  für eine Gauß- (**links**) bzw. Cauchy-Verteilung (**rechts**) der  $V$ 's. Plots für  $s_V = 2$  und  $b_V = 1$ .

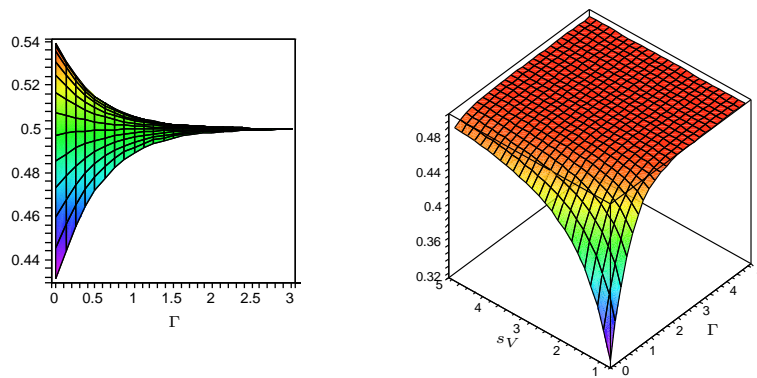


Abbildung 4.10: **Links:** Für Große  $\Gamma$  gehen die beiden hier gezeigten, symmetrischen Verteilungen  $Q^\infty(\rho, \Gamma)$  über in eine Gleichverteilung  $Q^\infty = 0.5 = \text{const. } \forall \rho$ . **Rechts** ist  $Q_1^\infty$  als Funktion der Breite  $s_V$  der Ausgangsverteilung vom Cauchy-Typ zu sehen. Wegen der Näherung (4.85) ist  $Q^\infty$  nicht mehr on der Breite von  $P$  oder  $R$  abhängig.

In beiden Fällen geht

$$Q^\infty(\rho, \Gamma) \rightarrow 0.5 \quad (4.91)$$

<sup>16</sup>Dies ist letztendlich nur eine Annahme, die sich aber auf die Symmetrie der Differentialgleichung stützt.

<sup>17</sup>Siehe wiederum Anhang E zur Struktur der Lösung von (4.86).

## 4 Die kritischen Verteilungen

für große  $\Gamma$  und für alle  $\rho$  (s. Abbildung 4.10). Damit ist auch  $Q_1^\infty = 0.5$  und somit  $Q_1^\infty + Q_{-1}^\infty = 1 = \text{const.}$  Dies vergleicht man mit den Annahmen aus 4.3.2. Für große  $\Gamma$ <sup>18</sup> kann man also  $Q_1 + Q_{-1} = 1$  setzen und erhält mit (4.55) eine (exponentiell) schnell abfallende Funktion  $c(\Gamma)$ , was ja die Voraussetzung für die Lösung  $Q^\infty$  war.

Die oben gefundenen symmetrischen Lösungen von (4.86) sind also konsistent mit der Annahme  $\Delta_\pm \approx 0$  und mit der Lösung von  $R_0$  in Abschnitt 4.3.2.

### 4.5 Numerische Lösung von $c(\Gamma)$

Nun kann man nochmals zur Gleichung (4.51) zurückkehren. Wählt man für  $Q_1^\infty + Q_{-1}^\infty$  den Ausdruck (4.88) oder (4.90), kann man  $c(\Gamma)$  leicht numerisch für diverse Formen von  $P_0$  integrieren.

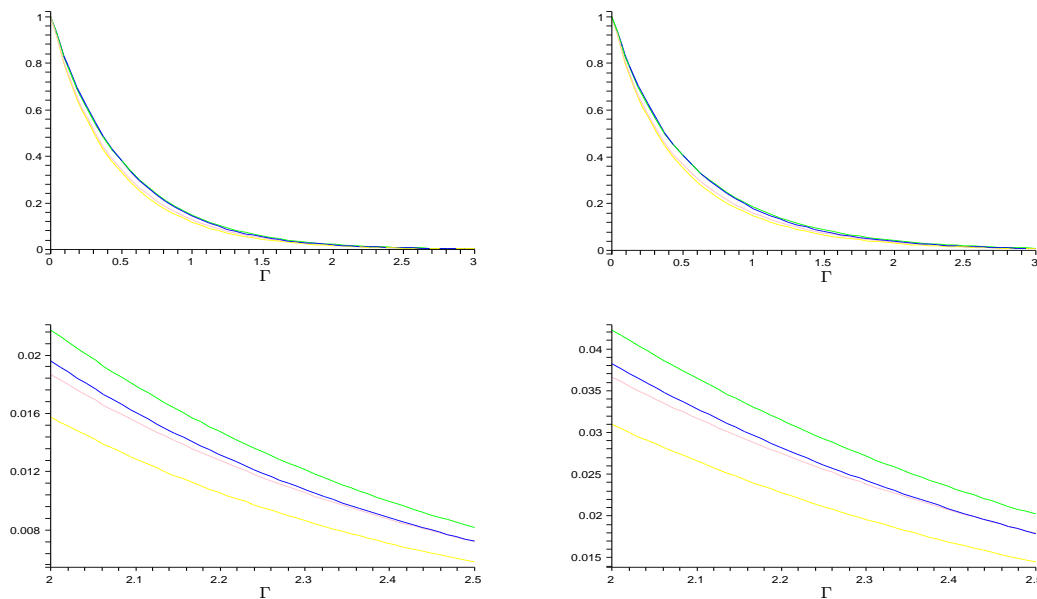


Abbildung 4.11: **Oben:** Die Funktion  $c(\Gamma) = R_0$  für verschiedene Typen von  $P_0$  (4.32-4.39). In der linken Spalte ist  $Q_1^\infty$  aus (4.88) entnommen mit Breite  $b_V=1$ . In der rechten Spalte sieht man eine Cauchyverteilung (4.90) der  $V$ 's (mit Breite  $s_V=5$ ). **Unten:** Die beiden Bilder zeigen einen Ausschnitt der darüber liegenden Bilder. Die Kurven in den unteren Plots gehören (von oben nach unten) zu einer Verteilung der  $J$  nach Exponential-, Gauß-, Potenzgesetz sowie Cauchy-Typ. Die Parameter sind in allen Plots  $p = 0.9$ ,  $q = 1$ ,  $s = 2$ ,  $\xi_e = 1$  und  $\xi_g = 1$ .

Der besseren Übersicht zuliebe folgt eine kurze Zusammenfassung der gewonnenen Lösungen:

<sup>18</sup>„Groß“ bedeutet bei den hier betrachteten Parametern  $\Gamma > 3$  (Abbildung 4.10).

## 4 Die kritischen Verteilungen

Die Gleichung für die Verteilung  $\alpha$  bzw.  $J$  entkoppelt von den anderen Gleichungen und kann für diverse Anfangsverteilungen exakt integriert werden.

Für große Werte von  $\Gamma$  kann man die Gleichung für  $Q$  von  $R$  entkoppeln.

Die Lösung  $Q^\infty$  liefert für die betrachteten Beispiele  $Q_1^\infty + Q_{-1}^\infty \approx 1$ . Dies kann man in die Gleichung (4.51) für  $R(\delta = 0, \Gamma) = c(\Gamma)$  einsetzen und diese je nach Wahl von  $P_0$  analytisch oder problemlos numerisch lösen.

Die einfachste, nicht-triviale, analytische und selbst-konsistente Lösung ist

$$P_0 = p = \text{const.} \quad (4.92)$$

$$Q_{\pm 1}^\infty = 1/2 \quad (4.93)$$

$$R_0 = \frac{1}{\left(1 + \frac{1}{p+1}\right) e^{p\Gamma} - \frac{1}{p+1}} \quad (4.94)$$

Diese Ausdrücke werden im nächsten Kapitel verwendet, um eine analytische Form der Überlebenswahrscheinlichkeit abzuleiten. Diese noch zu definierende Größe wird in die Berechnung der Spin-Spin-Korrelation einfließen.

### 4.6 Bestimmung der Spin-Spin-Korrelationslänge $\xi$

In einem ungeordneten, eindimensionalen System — wie in dem hier vorliegenden Modell der Spinkette — wird es zu Lokalisierungseffekten kommen. Das charakteristische Merkmal ist die *Lokalisierungslänge*  $\xi$ .

Die Wellenfunktionen und andere Größen wie die Korrelationsfunktionen – insbesondere der Spin-Korrelation– werden exponentiell auf einer durch  $\xi$  gegebenen Längenskala abfallen. Im folgenden Abschnitt wird deshalb die Rolle der Längenverteilung bei der Renormierung genauer betrachtet, um Informationen über  $\xi$  zu erhalten.

#### 4.6.1 Die Verteilung der Längen in $R(\delta, l, \Gamma)$

Bisher wurde die Längenabhängigkeit in der Verteilung  $R$  nicht näher untersucht.

Wegen der Faltung in (4.46) empfiehlt es sich, nicht direkt im Ortsraum zu rechnen, sondern eine Laplace-Transformation<sup>19</sup> durchzuführen.

$$LP[R] := r(\delta, y) = \int dl e^{-yl} R(\delta, l). \quad (4.95)$$

Um die Übersicht zu wahren, wird die  $\Gamma$ -Abhängigkeit gelegentlich unterdrückt.

Die Flussgleichung für die Verteilung  $R$  nach der Laplace-Transformation ist

---

<sup>19</sup>Im Anhang C sind Gültigkeitsbereich und Eigenschaften der Laplace-Transformation aufgelistet.

#### 4 Die kritischen Verteilungen

$$\frac{\partial r}{\partial \Gamma} = \frac{\partial r}{\partial \delta} + [P_0 + Q_1 + Q_{-1} + r(0, y)]r(\cdot, y) \otimes_{\delta} r(\cdot, y) - (P_0 + Q_1 + Q_{-1})r(\delta, y). \quad (4.96)$$

Per Definitionem gilt  $R_0 = r(0, y = 0)$  und die Faltung ist wieder durch

$$r(\cdot, y) \otimes_{\delta} r(\cdot, y) = \int d\delta' r(\delta', y)r(\delta - \delta', y) \quad (4.97)$$

gegeben. Zur Lösung wird wieder ein Exponentialansatz (s. (4.47)) verwendet, diesmal jedoch mit  $y$ -abhängigen Koeffizienten. Man wählt den Ansatz<sup>20</sup>

$$r(\delta, y; \Gamma) = Y(y; \Gamma)e^{-\delta u(y; \Gamma)}. \quad (4.98)$$

Aus Konsistenzgründen muss sich für  $y = 0$  das bereits bekannte Ergebnis ergeben:

$$Y(0; \Gamma) \stackrel{!}{=} R_0 = c(\Gamma). \quad (4.99)$$

Wegen der Form  $R = ce^{-\delta c}$ , muss auch

$$\begin{aligned} u(0; \Gamma) &\stackrel{!}{=} c(\Gamma) \quad \text{also} \\ Y(0; \Gamma) &= u(0; \Gamma) \end{aligned} \quad (4.100)$$

gelten. Einsetzen von (4.98) in (4.96) führt auf 2 gekoppelte Differentialgleichungen für  $Y(0; \Gamma)$  und  $u(0; \Gamma)$ :

$$\frac{du}{d\Gamma} = -[P_0 + Q_1 + Q_{-1} + Y]Y \quad (4.101)$$

$$\frac{dY}{d\Gamma} = -[P_0 + Q_1 + Q_{-1} + u]Y. \quad (4.102)$$

Die zweite Gleichung wird nochmals nach  $\Gamma$  differenziert und  $\frac{du}{d\Gamma}$  aus der ersten Gleichung eingesetzt:

$$\frac{d^2 Y}{d\Gamma^2} = \frac{1}{Y} \left( \frac{dY}{d\Gamma} \right)^2 + [P_0 + Q_1 + Q_{-1} + Y]Y^2 - \left[ \frac{dP_0}{d\Gamma} + \frac{dQ_1}{d\Gamma} + \frac{dQ_{-1}}{d\Gamma} \right] Y. \quad (4.103)$$

Bislang wurde noch keine Näherung verwendet.

Für beliebige  $P_0(\Gamma)$  und  $Q_1(\Gamma) + Q_{-1}(\Gamma)$  können die noch unbestimmten Funktionen  $Y(y; \Gamma)$  und  $u(y; \Gamma)$  nicht analytisch berechnet werden. Deshalb wird wieder angenommen, dass

---

<sup>20</sup>Die Notation orientiert sich wieder an [40].

#### 4 Die kritischen Verteilungen

$$P_0 + Q_1 + Q_{-1} = p + q = \text{const.} \quad (4.104)$$

gilt.

Damit vereinfacht sich (4.103) zu

$$\frac{d^2 Y}{d\Gamma^2} = \frac{1}{Y} \left( \frac{dY}{d\Gamma} \right)^2 + [p + q + Y] Y^2. \quad (4.105)$$

Diese Gleichung lässt sich exakt lösen (z.B. mit maple). Man erhält

$$Y(y; \Gamma) = \frac{4 e^{\frac{\Gamma+C_2}{C_1}}}{\left( C_1 e^{\frac{\Gamma+C_2}{C_1}} - 2 C_1 (p+q) \right)^2 - 4}. \quad (4.106)$$

Da es sich um eine Gleichung 2. Ordnung handelt, verbleiben 2 von  $\Gamma$  unabhängige Integrationskonstanten  $C_1$  und  $C_2$ . Diese sind im allgemeinen noch Funktionen von  $y$  (da nur nach  $\Gamma$  differenziert wurde).

Als Nebenbedingung für diese Funktionen  $C_{1,2} = C_{1,2}(y)$  gilt

$$\frac{4 e^{\frac{\Gamma+C_2(0)}{C_1(0)}}}{\left( C_1(0) e^{\frac{\Gamma+C_2(0)}{C_1(0)}} - 2 C_1(0) (p+q) \right)^2 - 4} = Y(y=0, \Gamma) = R_0 = \frac{1}{c_1 e^{(p+q)\Gamma} - 1/(p+q)}. \quad (4.107)$$

Das zweite Gleichheitszeichen in (4.107) gilt wegen (4.99), das dritte wegen (4.104) und der damit verbundenen Lösung von  $c(\Gamma)$  (4.55).

Die Gleichung (4.107) ist erfüllt für

$$C_1(0) = \frac{1}{p+q} \quad \text{und} \quad C_2(0) = \frac{1}{p+q} \ln(4 c_1 (p+q)^2), \quad (4.108)$$

wie man durch Einsetzen beweist. Die volle funktionale  $y$ -Abhängigkeit von  $C_{1,2}$  ist jedoch nicht einfach herleitbar.

Mit (4.106) und (4.101) kann auch  $u(y, \Gamma)$  bestimmt werden. Um Informationen über die Länge  $\xi$  zu erhalten, muss die explizite Form von  $u(y, \Gamma)$  allerdings nicht bekannt sein, wie sich gleich zeigen wird.

Selbst wenn man  $Y(y, \Gamma)$ ,  $u(y, \Gamma)$ ,  $C_1(y)$  sowie  $C_2(y)$  explizit gegeben hat, gibt es noch ein Problem. Es stellt sich nämlich die Frage, wie man die Rücktransformation von  $r(y)$  nach  $R(l)$  analytisch ausführen soll.

Um dieses Problem zu umgehen, bedient man sich eines Tricks:

Man weiß ja im Prinzip, wie sich die Verteilung  $R$  als Funktion von  $l$  verhalten muss — nämlich wie  $\exp(-l/\xi)$  — und kann so auf die Korrelationslänge rückschließen. Dieser Trick wird nun benutzt.

#### 4 Die kritischen Verteilungen

Wie eingangs erwähnt, tritt bei ungeordneten Systemen in einer Dimension Lokalisierung ein. Man muss davon ausgehen, dass auch die Verteilung  $R(l)$  exponentiell auf einer Länge  $\xi$  abfällt

$$R(l) \propto e^{(-l/\xi)}. \quad (4.109)$$

Da

$$e^{-l/\xi} l^n \rightarrow 0 \quad \forall n \quad (4.110)$$

für  $l \rightarrow \infty$ , lautet die allgemeinste Form der Verteilung  $R(l)$

$$R_L(l) = e^{(-l/\xi)} \times \text{Polynom in } l. \quad (4.111)$$

Der Index L soll für „lokalisiert“ stehen. Eine Funktion der Gestalt (4.111) kann leicht einer Laplace-Transformation unterworfen werden. Nach Anhang C ergibt sich

$$LP[R_L] = \frac{c_0}{y + 1/\xi} + \frac{c_1}{(y + 1/\xi)^2} + \dots \quad (4.112)$$

Die Vorfaktoren  $c_1, c_2$  in obiger Gleichung sind dabei die Koeffizienten des Polynoms aus (4.111). An der Stelle  $y = -1/\xi$  besitzt (4.112) offensichtlich eine Singularität. Die negative Korrelationslänge bestimmt die Pole der bzgl.  $l$  transformierten Verteilung  $R$ !

Um die (von der Energie  $\Gamma$  abhängige) Korrelationslänge zu bestimmen, reicht es also aus, die Verteilungsfunktion  $r(\delta, y)$  auf Pole oder äquivalent die Funktion

$$K := 1/r(\delta, y) \quad (4.113)$$

auf Nullstellen zu untersuchen. Letzteres ist naturgemäß einfacher. Wegen

$$K = \frac{1}{r(\delta, y)} = \frac{1}{Y} e^{\delta u} \quad (4.114)$$

reicht es, die Funktion  $\frac{1}{Y}$  auf Nullstellen zu untersuchen (da  $u$  in der e-Funktion steht, trägt sie nicht zu den Nullstellen von  $r$  bei). Wie weiter oben schon erwähnt wurde, braucht man  $u$  keine weitere Beachtung zu schenken.

Gesucht sind nun alle Zahlen  $y_0$  für die

$$Y(y_0; \Gamma) = \frac{\left( C_1 e^{\frac{\Gamma+C_2}{C_1}} - 2 C_1 (p+q) \right)^2 - 4}{4 e^{\frac{\Gamma+C_2}{C_1}}} \stackrel{!}{=} 0 \quad (4.115)$$

gilt. Damit muss

$$\left( C_1(y_0) e^{\frac{\Gamma+C_2(y_0)}{C_1(y_0)}} - 2 C_1(y_0) (p+q) \right)^2 - 4 \stackrel{!}{=} 0 \quad (4.116)$$



#### 4 Die kritischen Verteilungen

sein. Da der Ausdruck (4.116) von  $\Gamma$  abhängt, wird auch  $y_0 = y_0(\Gamma)$  gelten und damit

$$\xi = \xi(\Gamma) = -1/y_0(\Gamma). \quad (4.117)$$

Im allgemeinen Fall werden sich mehrere Nullstellen finden lassen. Physikalisch interessant ist jedoch nur die kleinste von diesen. Kleine Werte von  $y_0$  entsprechen großen Werten für  $\xi$ . Nur diese sind für große Werte von  $l$  relevant für  $R$ . Alle Beiträge von Termen  $e^{-1/\xi}$  <sup>21</sup> fallen viel rascher ab als  $e^{-l/\xi}$  und tragen deshalb für große  $l$  kaum zu den beobachtbaren Größen bei.

Nach Umformen von (4.116) erhält man

$$C_2[y_0(\Gamma)] = C_1[y_0(\Gamma)] \ln \left( 2(p+q) \pm \frac{2}{C_1[y_0(\Gamma)]} \right) - \Gamma. \quad (4.118)$$

Für eine näherungsweise Berechnung von  $y_0(\Gamma)$  setzt man eine Taylorentwicklung<sup>22</sup>

$$\begin{aligned} C_1[y_0(\Gamma)] &= C_1^0 + y_0(\Gamma) C_1^1 \\ C_2[y_0(\Gamma)] &= C_2^0 + y_0(\Gamma) C_2^1 \end{aligned} \quad (4.119)$$

an. Da  $y_0$  klein sein soll (großes  $\xi$ ), wird nur in die erste Ordnung entwickelt. Einsetzen von (4.119) in (4.118) liefert eine Gleichung für  $y_0$ . Allerdings bieten 4 freie Parameter  $C_{1,2}^0$  und  $C_{1,2}^1$  eine zu große Freiheit.

Sie müssen so variiert werden, dass  $y_0$  negativ und betragsmäßig klein ist. Darüber hinaus muss als Nebenbedingung natürlich  $r(y_0) > 0$  gelten.

Einen alternativen Weg, um die Korrelationslänge zu bestimmen wird im kommenden Unterabschnitt 4.6.2 besprochen.

Hat man jedoch eine Nullstelle  $y_0$  gefunden, so kann mit einer weiteren Näherung die inverse Laplace-Transformation durchgeführt werden.

Gesucht ist ein expliziter Ausdruck für<sup>23</sup>

$$\int dy r(\delta, y, \Gamma) e^{y l} \propto R(\delta, l, \Gamma). \quad (4.120)$$

Es werden im folgenden nur negative Werte  $y \approx y_0$  betrachtet. Wie weiter oben definiert, gilt  $K(y_0) = 0$ . Damit hat man die Taylorreihe

$$K(y) = K(y_0 + y - y_0) = K(y_0) + (y - y_0)K_1(y_0) + \dots \quad (4.121)$$

<sup>21</sup>Die Menge der Lösungen von (4.116) sei  $\{\xi_i\}$ , und die physikalische Korrelationslänge sei  $\xi = \max\{\xi_i\}$ .

<sup>22</sup>Es gilt nicht, wie man wegen (4.108) vielleicht meinen könnte,  $C_1^0 = 1/p$  bzw.  $C_2^0 = \frac{1}{p+q} \ln(4 c_1 (p+q)^2)$ .

In (4.108) sind  $C_1$  und  $C_2$  nur Funktionen von  $y$ , während hier eine Funktion  $y(\Gamma)$  gesucht wird. Es ist a priori nicht klar, für welche Werte von  $\Gamma$   $y_0(\Gamma) = 0$  gilt.

<sup>23</sup>Vorfaktoren spielen für das Skalenverhalten keine Rolle.

## 4 Die kritischen Verteilungen

mit  $K_1(y_0) = \frac{dK}{dy}|_{y=y_0}$ .

Der nullte Term in der Reihenentwicklung ist nach Definition Null, alle höheren Terme sind vernachlässigbar klein für  $y \approx y_0$ .

Mit  $r = 1/K$  ist

$$r(\delta, y, \Gamma) = \frac{\bar{r}(\delta, y_0, \Gamma)}{(y - y_0)} = \frac{1}{(y - y_0) K_1(y_0)}. \quad (4.122)$$

Der Strich über dem  $r$  soll daran erinnern, dass diese Funktion nicht mehr von  $y$  abhängt. Nun kann man  $R$  in der gewünschten Form schreiben:

$$R \propto \int dy r(\delta, y, \Gamma) e^{y l} = \int dy \frac{\bar{r}(\delta, y_0, \Gamma)}{(y - y_0)} e^{y l} \quad (4.123)$$

$$= \int dy \frac{1}{(y - y_0) K_1(y_0)} e^{y l} \quad (4.124)$$

$$= \frac{1}{K_1(y_0)} \int dy \frac{1}{(y - y_0)} e^{y l} \quad (4.125)$$

$$= \frac{1}{K_1(y_0)} \int dy \frac{1}{(y + 1/\xi)} e^{y l} \quad (4.126)$$

$$= \frac{1}{K_1(y_0)} e^{-l/\xi}. \quad (4.127)$$

Die letzte Umformung ist die Rücktransformation von  $y$  nach  $l$ , wie der Vergleich mit (4.112) zeigt. Für  $R$  gilt demnach

$$R = \frac{e^{y_0 l}}{K_1(y_0)}. \quad (4.128)$$

Im nächsten Kapitel wird nur der Fall  $\delta = 0$  von Bedeutung sein. In diesem Spezialfall ist

$$K = 1/Y \quad \text{und damit} \quad K_1 = \frac{d}{dy} \left( \frac{1}{Y} \right) |_{y=y_0} \quad (4.129)$$

mit  $y_0(\Gamma)$  als Lösung von (4.118).

Die Verteilung (4.128) wird zusammen mit  $P_0$ ,  $R_0 = c(\Gamma)$  und  $Q_{\pm 1}$  die Berechnung der Spin-Spin-Korrelationen ermöglichen.

### 4.6.2 Die Verteilung der Cluster

Nun wird noch ein zweiter Weg beschrieben, um Einsichten über  $\xi$  zu gewinnen.

Im Laufe der Renormierung bilden sich so genannte Cluster heraus, Ansammlungen von Spins, deren Korrelation im weiteren Verlauf der RG wegen der Absenkung der Energie nicht mehr aufgebrochen werden. Die Zahl der Cluster pro Längeneinheit — bezeichnet mit  $n(\Gamma)$  — wird durch die einfache Beziehung<sup>24</sup>

<sup>24</sup>Zur Motivation und Herleitung wird auf [40] verwiesen

#### 4 Die kritischen Verteilungen

$$\frac{dn(\Gamma)}{d\Gamma} = -[P_0 + R_0 + Q_1 + Q_{-1}] n(\Gamma) \quad (4.130)$$

ausgedrückt. Das Minuszeichen in (4.130) ist durch die Verwendung der logarithmischen Energievariablen gegeben. Da (4.130) nur eine gewöhnliche Differentialgleichung ist, kann sie für alle gegebenen Funktionen  $P_0 + R_0 + Q_1 + Q_{-1}$  exakt<sup>25</sup> gelöst werden. Die Anfangsbedingung ist  $n(\Gamma = 0) = 1$ . Somit ist die Lösung

$$n(\Gamma) = e^{-\int_0^\Gamma [P_0 + R_0 + Q_1 + Q_{-1}] d\Gamma'}. \quad (4.131)$$

Durch die Analyse von (4.131) ist es möglich, Informationen über die Spin-Korrelationslänge  $\xi$  zu gewinnen. Hier interessiert wieder die Energieabhängigkeit  $\xi(\Omega)$ . In vielen Fällen<sup>26</sup> gilt  $\xi \propto \Omega^{-\nu}$ , und der numerische Wert des kritischen Exponenten  $\nu$  ist eine nicht-triviale Information.

Geht man wieder von dem Spezialfall aus, dass  $P_0$  sowie  $Q_1 + Q_{-1}$  nicht von  $\Gamma$  abhängen, also  $P_0 = p$ ,  $Q_1 + Q_{-1} = q$ <sup>27</sup> und benutzt (4.55) für  $R_0$ , so erhält man

$$\frac{dn(\Gamma)}{d\Gamma} = -\left[(p+q) + \frac{1}{c e^{(p+q)\Gamma} - 1/(p+q)}\right] n(\Gamma). \quad (4.132)$$

Dies lässt sich direkt integrieren zu

$$n(\Gamma) = \frac{(p+q)c - 1}{(p+q)c \exp((p+q)\Gamma) - 1}. \quad (4.133)$$

Wenn man wieder in dekadischen Einheiten rechnet, erhält man<sup>28</sup> nach [40]

$$l^{-1} \approx n(\Omega) \approx \exp\left(- (p+q) \ln\left(\frac{\Omega_I}{\Omega}\right)\right) = \left(\frac{\Omega}{\Omega_I}\right)^{(p+q)}. \quad (4.134)$$

Dabei ist  $l \propto 1/n(\Gamma)$  die charakteristische Länge des Clusters bei gegebener Energie. Über die Clusterlänge kann man auf die Korrelationslänge schließen [40]

$$\xi \propto l \approx \left(\frac{1}{\Omega}\right)^{(p+q)} = \Omega^{-(p+q)} = \Omega^{-(p+1)}. \quad (4.135)$$

<sup>25</sup>Exakt oder analytisch bedeutet in diesem Zusammenhang: bis auf maximal eine Integration.

<sup>26</sup>Siehe Anhang D.1.

<sup>27</sup>Für die im letzten Abschnitt hergeleiteten Verteilungen gilt natürlich  $q = 1$ , zur besseren Übersicht wird hier aber die Wahl der Konstante erst einmal offen gelassen

<sup>28</sup>Da man sich nur für den Exponenten von  $\Omega$  interessiert, kann man Vorfaktoren und additive Konstanten ignorieren.

#### 4 Die kritischen Verteilungen

Im letzten Schritt wurde wieder  $q = 1$  eingesetzt.

Die Korrelationslänge divergiert mit  $\Omega \rightarrow 0$  wie  $\xi^{-\nu}$  mit dem Exponenten

$$\nu = p + 1. \quad (4.136)$$

Wegen  $p < 1$  verletzt (4.135) das *Harris Kriterium* [17]

$$d\nu > 2, \quad (4.137)$$

wobei hier  $d = 1$  ist. Allerdings ist seit längerem bekannt, dass das Harris Kriterium für Systeme mit starker Unordnung nicht erfüllt sein muss ( ein aktuelles Beispiel findet man in [30]).

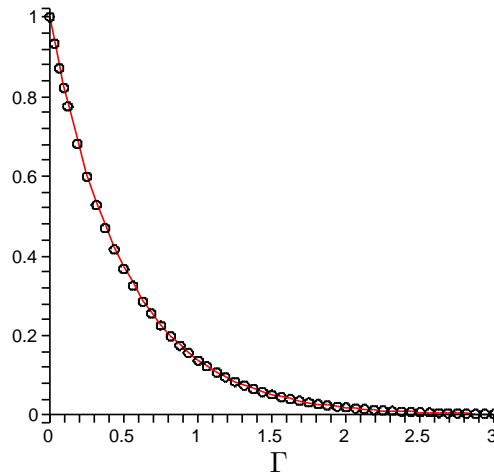


Abbildung 4.12: Beispiel für einen Fit: Der Graph zeigt die numerisch gewonnene Lösung  $n(\Gamma)$  (Punkte) als Funktion der Energie.  $P_0$  Cauchyverteilung mit  $s = 1$  und Gaußverteilung  $Q_1$  mit Breite  $b_V = 1$ . Fit:  $\nu = 1.97$

Wie in den Abbildungen 4.6 und 4.11 zu sehen ist, unterscheiden sich die Kurven für  $c(\Gamma)$  in ihrem qualitativen Verlauf nur wenig. Man kann also erwarten, dass die Energieabhängigkeit vom Typ  $\Omega^{-\nu}$  für ein weites Feld von Verteilungen  $P$  und  $Q = Q^\infty$  gilt. Den Wert des Exponenten muss man bei einer numerischen Lösung von  $n(\Gamma)$  durch Fitten mit  $\Omega^{-\nu}$  bestimmen. In logarithmischen Variablen ist es einfacher, den Exponenten aus (4.131) direkt mit dem Exponenten  $\nu$  zu fitten ( $\Omega = e^{-\Gamma}$ ):

$$e^{-\int_0^\Gamma [P_0 + R_0 + Q_1 + Q_{-1}] d\Gamma'} \approx e^{-\nu\Gamma}. \quad (4.138)$$

#### 4 Die kritischen Verteilungen

Ein Beispiel für einen solchen Fit sieht man in Abbildung 4.12.

Wählt man (4.88) für  $Q^\infty$  und (4.36) für  $P_0$ , so wächst  $\nu$  für wachsende Breite  $\xi_g$  und bei festem Wert  $b_V$  für die Breite der Verteilung  $Q^\infty$ .

$b_g = 1/\xi_g$	1	2	3
$b_V$	1	1	1
$\nu$	1.95	1.77	1.65

Analoges gilt, wenn man statt (4.36) die Lösung (4.34) oder (4.39) für  $P_0$  auswählt. Mit größer werdendem Wert von  $\xi_e$  oder  $s$  wächst  $\nu$  an.

$b_e = 1/\xi_e$	1	2	3
$b_V$	1	1	1
$\nu$	1.9	1.75	1.63

$s$	0.5	1	2
$b_V$	1	1	1
$\nu$	1.8	1.97	2.15

Im nächsten Kapitel wir nun die Spin-Korrelationsfunktion genauer besprochen.

## 5 Die Korrelationsfunktion

Für die magnetische Suszeptibilität gilt nach dem Fluktuations-Dissipations Theorem [6] mit  $\beta = 1/T$

$$\chi = \beta \sum_{ij} \chi_{ij} \quad \text{mit} \quad (5.1)$$

$$\chi_{ij} = \langle S_i S_j \rangle - \langle S_i \rangle \langle S_j \rangle . \quad (5.2)$$

In der ungeordneten Phase gilt  $\langle S_i \rangle = 0$ .

Zur Berechnung der Suszeptibilität muss ein Ausdruck für den Korrelator  $\langle S_i S_j \rangle$  gewonnen werden.

Im folgenden sind  $\chi$  und  $\chi_{ij}$  als Funktionen einer externen Frequenz  $\omega$ <sup>1</sup> zu verstehen. Eine *connected correlation function*, hier am Beispiel der Spin-Spin-Korrelation,

$$\langle S_i S_j \rangle_c = \langle S_i S_j \rangle - \langle S_i \rangle \langle S_j \rangle \quad (5.3)$$

lässt sich als Ableitung von  $\ln \mathcal{Z}$  schreiben [37]

$$\langle S_i S_j \rangle_c = \frac{\delta^2}{\delta J_i \delta J_j} \ln \mathcal{Z} . \quad (5.4)$$

In dem hier vorliegenden Fall muss auch noch über die Unordnung geeignet gemittelt werden. Allerdings besitzt nur die freie Energie  $F$  bzw.  $\ln \mathcal{Z}$  die notwendige Eigenschaft der Selbstmittelung, nicht jedoch  $\mathcal{Z}$ . Die Berechnung der über die Unordnung gemittelten Funktion

$$[\ln \mathcal{Z}]_{av} . \quad (5.5)$$

ist in der Regel höchst problematisch. Selbst wenn Methoden zur Berechnung von  $\mathcal{Z}$  gegeben sind, folgt damit nicht automatisch  $[\ln \mathcal{Z}]_{av}$ .

Die bekannteste Methode zur Behebung des Problems dürfte der *Replica Formalismus* [116, 121] sein. Hier jedoch soll ein anderer Zugang gesucht Anwendung finden, der mehr an das hier verwendete Renormierungsschema angepasst ist.

Um Informationen über die Korrelation zwischen den Spins  $S_i$  zu erhalten betrachtete Fisher [39, 40] im Fall einer Isingkette mit transversalen Feldern die Verteilung der — wie

<sup>1</sup>Oder der Temperatur  $T = T(\omega) = \hbar\omega/k_B$ .

## 5 Die Korrelationsfunktion

er es nannte — *aktiven* Spins in der Kette. Dies sind diejenigen Spins bzw. Kettenglieder, die bei einer gegebenen Energieskala  $\Gamma$  noch nicht ausintegriert wurden.

Die Wahrscheinlichkeit, dass ein Spin aktiv ist, wird in eine Funktion  $G$  übersetzt, die im Anhang D definiert wird. Diese Funktion beinhaltet viele Informationen, auch Eigenschaften der *mittleren* Spin-Spin-Korrelationsfunktion

$$\overline{\langle S_1 S_2 \rangle}. \quad (5.6)$$

Für die hier vorliegende fermionische Kette wird ein ganz ähnlicher Weg zur Berechnung der Korrelationsfunktion eingeschlagen. Herleitung und Berechnung des Korrelators  $\overline{\langle S_i S_j \rangle}$  sind das Thema dieses Kapitels, wobei die im letzten Kapitel hergeleiteten Verteilungsfunktionen eine große Rolle spielen werden.

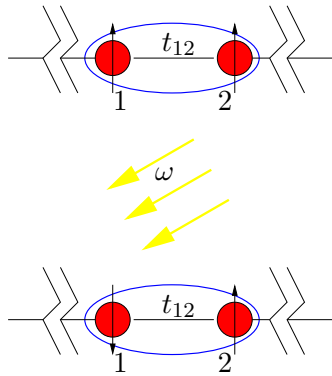


Abbildung 5.1: Ausschnitt aus der Spinkette. Ein externes elektromagnetisches Feld mit Frequenz  $\omega$  liegt in Resonanz mit dem  $t_{12}$ -Matrixelement. Alternativ betrachtet man die thermische Anregung des Systems bei einer Temperatur  $\hbar\omega = k_B T$ .

Für den Augenblick wird eine Spin-„Kette“ mit nur 2 Gliedern ohne *on-site* Energien betrachtet.

2 lokale Spins  $S_1$  und  $S_2$  sind durch bewegliche Löcher gekoppelt, die mit der Stärke  $J_1$  und  $J_2$  mit den lokalen Spins wechselwirken. Die Stärke der Kopplung zwischen beiden Spins bestimmt letztendlich das Hüpfmatrixelement  $t_{12}$ . Für großes  $t_{12}$  sind die beiden Spins stark korreliert. Für dieses Spinsystem mit 3 gegebenen Kopplungskonstanten  $(J_1, J_2, t_{12})$  ergibt sich der Korrelator bzw. die Green'sche Funktion (im Frequenzraum) zu<sup>2</sup>

$$\langle S_1 S_2 \rangle \propto \frac{1}{\omega - \epsilon} = \frac{1}{\omega - \frac{J_1 J_2}{t_{12}}}. \quad (5.7)$$

In einer (unendlich) langen Kette wird die obige Situation nur mit einer geringen<sup>3</sup> Wahr-

<sup>2</sup>Siehe hierzu auch [40] Seite 6414 Gleichung (1.21).

<sup>3</sup>Siehe wieder Anhang D für die Relevanz von seltener Ereignisse für die physikalisch beobachtbaren

## 5 Die Korrelationsfunktion

scheinlichkeit  $\mathcal{P}$  vorkommen. Auf der laufenden Energieskala sei  $t_i = \Omega$  das Hüpfmatrixelement, welches die Kettenglieder  $i$  und  $j$  verbindet, wobei

$$i + l \stackrel{\text{Def}}{=} j \quad (5.8)$$

ist. Da  $J_{i,j} < t = \Omega$  sein muss (sonst würde zuerst ein  $J$  dezimiert), laufen die Integrationsgrenzen der  $J$ -Integration von 0 bis  $\Omega$ .

Die laufende Energie  $\Omega$  kann bis zur gegebenen Frequenz  $\omega$  abgesenkt werden, entsprechend lauten die Integrationsgrenzen für die mittlere Spin-Korrelationsfunktion (bei externer Frequenz  $\omega$ ):

$$\overline{\langle S_i S_j \rangle}(\omega) \propto \int_{\omega}^{\Omega_I} \frac{1}{\omega - \frac{J_i J_{i+l}}{t_i(\Omega)}} \mathcal{P}(\Omega) d\Omega. \quad (5.9)$$

Im nächsten Schritt der Renormierung wird  $t_i$  und (damit die beiden Glieder  $i$  und  $j$ ) dezimiert.

Die Wahrscheinlichkeit, dass ein  $t_i = t$  der Größe  $\Omega$  existiert und genau die beiden Plätze  $i$  und  $j$  mit den Kopplungen  $J_i$  und  $J_j$  miteinander verbindet, ist

$$\mathcal{P}(\Omega) d\Omega \propto P(\alpha[J_i]) P(\alpha[J_j]) R(\delta = 0, l = j - i, \Gamma[\Omega = t]) d\Gamma[\Omega]. \quad (5.10)$$

Allerdings kann die eben geschilderte Situation nur dann eintreten, wenn diese Kettenglieder nicht schon vorher im Laufe der RG ausintegriert worden sind. Die Wahrscheinlichkeit, dass 2 Kettenglieder bis zur Energie  $\Omega$  (bzw.  $\Gamma$ ) überlebt haben wird mit

$$s(\Omega) \quad (\text{bzw. } s(\Gamma))$$

bezeichnet und weiter unten explizit berechnet.

Da die Wahl bzw. Numerierung der Glieder  $i$  und  $j$  beliebig ist (unter Berücksichtigung von (5.8)), muss über  $J_i$  und  $J_j$  integriert werden. Zusammengefasst gilt<sup>4</sup>.

---

Größen in einer Dimension.

<sup>4</sup> $d\alpha = -1/J dJ$  und  $d\Gamma = -1/\Omega d\Omega$  nach Definition im letzten Kapitel.



$$\begin{aligned}
\overline{\langle S(0)S(l) \rangle} &= \\
\overline{\langle S_i S_j \rangle}(\omega) &\propto \int_{\omega}^{\Omega_I} \frac{1}{\omega - \frac{J_i J_{i+l}}{\Omega}} \mathcal{P}(\Omega) d\Omega \\
&= \int_{\omega}^{\Omega_I} \frac{1}{\omega - \frac{J_i J_{i+l}}{\Omega}} P(J_i) P(J_{i+l}) R(l, \Omega = t) s(\Omega) D\Omega \\
&= \int_{\omega}^{\Omega_I} \int_0^{\Omega} \int_0^{\Omega} \frac{1}{\omega - \frac{J_i J_{i+l}}{\Omega}} P(\alpha[J_i]) d\alpha[J_{i+l}] P(\alpha[J_i]) d\alpha[J_{i+l}] R(\delta = 0, l, \Gamma[\Omega]) s(\Gamma[\Omega]) d\Gamma[\Omega] \\
&= - \int_{\omega}^{\Omega_I} \int_0^{\Omega} \int_0^{\Omega} \left[ \int_0^{\Omega} \left( \int_0^{\Omega} \frac{1}{\omega - \frac{J_i J_{i+l}}{\Omega}} P(J_i) \frac{dJ_i}{J_i} \right) P(J_j) \frac{dJ_j}{J_j} \right] R(\delta = 0, l, \Omega) s(\Omega) \frac{d\Omega}{\Omega} .
\end{aligned} \tag{5.11}$$

Zur Berechnung des Korrelators braucht man einen expliziten Ausdruck für  $s(\Gamma)$ .

## 5.1 Die Überlebenswahrscheinlichkeit $s$

Die Wahrscheinlichkeit, dass ein Kettenglied  $i$  noch *überlebt* hat, wird durch die Überlebenswahrscheinlichkeit  $s(\Gamma) d\Gamma$  beschrieben ( $s$  steht für *survived*). Explizit gilt

$$s(\Gamma) = \int_0^{\Gamma} [1 - P_0][1 - R_0]^2 [1 - Q_1][1 - Q_{-1}] d\Gamma' . \tag{5.12}$$

Da  $P_0$  die Wahrscheinlichkeit ist, dass eine Kopplung  $J$  und das dazugehörige Kettenglied dezimiert wurde, bedeutet entsprechend  $[1 - P_0]$ , dass  $J$  bei der Renormierung bis zur Energie  $\Gamma$  eben nicht dezimiert wurde. Analoges gilt für die beiden anderen Kopplungstypen  $t$  und  $V$ .

Der Faktor  $[1 - R_0]$  taucht zweimal in (5.12) auf, da sowohl links als auch rechts ein Hüpfmatrixelement an einen potentiell zu dezimierenden Gitterplatz anknüpft.

Für die im vorangegangenen Kapitel gewonnenen analytischen Lösungen für  $P_0$ ,  $R_0$  und  $Q_{\pm 1}$  kann  $s$  (numerisch) exakt berechnet werden. Am einfachsten ist die Situation mit den Verteilungen der Form (4.93):

$$\begin{aligned}
P_0 &= p \\
Q_{\pm 1}^{\infty} &= q/2 \\
R_0 &= \frac{1}{c_1 e^{p\Gamma} - \frac{1}{p+q}} .
\end{aligned}$$

Für das Integral  $s$  ergibt die Integration

## 5 Die Korrelationsfunktion

$$\begin{aligned}
 s &= (1-p)(1-q/2)^2 \int_0^\Gamma \left[ \frac{1}{\left(1 + \frac{1}{p+1}\right) e^{p\Gamma} - \frac{1}{p+1}} \right]^2 d\Gamma' \\
 &= (1-p)(1-q/2)^2 \left[ ((p+q)(2+p+q)+1)\Gamma - \frac{1}{c_1 e^{(p+q)\Gamma} - \frac{1}{p+q}} \right. \\
 &\quad \left. - (2+p+q)(\ln(c_1(p+q)e^{(p+q)\Gamma} - 1)) \right] \\
 &\quad + (1-p)(1-q/2)^2 \left[ \frac{1}{c_1 - \frac{1}{p+q}} - (2+p+q)(\ln(c_1(p+q) - 1)) \right].
 \end{aligned} \tag{5.13}$$

Da der Faktor  $(1 - R_0)$  gegen Null geht für  $\Gamma \rightarrow 0$  strebt dementsprechend auch  $s(\Gamma)$  gegen Null für  $\Gamma \rightarrow 0$  bzw.  $\Omega \rightarrow 1$ . Allerdings wächst  $s(\Gamma)$  in dem hier vorliegenden Fall unbeschränkt mit  $\Gamma$  an<sup>5</sup>. Geht man mit

$$s(\Gamma)d\Gamma = S(\Gamma[\Omega])d\Gamma[\Omega] = s(\ln(1/\Omega))\frac{d\Omega}{\Omega} \tag{5.14}$$

zur dekadischen Energieskala über, divergiert (5.13) in  $\Omega = 0$ . Dies liegt im mangelnden Konvergenzverhalten von  $(1 - P_0) = (1 - p)$  begründet. Für Gauß-, Cauchy- oder Exponentialverteilung geht  $(1 - P_0) \rightarrow 0$  für  $\Gamma \rightarrow \infty$  (bzw.  $\Omega \rightarrow 0$ ), und damit ist die Stammfunktion  $s$  für große  $\Gamma$  eine Konstante. Dadurch bleibt die Überlebenswahrscheinlichkeit beschränkt, und beim Wechsel von  $\Gamma$  nach  $\Omega$  entstehen keine Probleme im Nullpunkt.

Allerdings spielt der Punkt  $\Omega = 0$  für die Spin-Korrelationsfunktion keine kritische Rolle. Wenn man an diesem hypothetischen Punkt angekommen ist, sind alle Glieder der Kette sowieso schon dezimiert worden. Der Bereich sehr kleiner Energien  $\Omega \approx 0$  kann also ausgespart werden und  $S(\Omega)$  ist im verbleibenden Bereich wohl definiert.

Eine Eigenheit von  $P_0 = p$  liegt darin, dass wegen dem Faktor  $1 - p$  die Überlebenswahrscheinlichkeit  $s$  verschwindet für  $p$  gegen 1.

Die Wahrscheinlichkeit für das Überleben von 2 Kettengliedern  $i$  und  $j$  ist

$$s(i) + s(j) = 2s. \tag{5.15}$$

Dies gilt streng genommen nur, wenn  $s(i)$  und  $s(j)$  unabhängig voneinander sind. Zu Beginn der Renormierung und für große Abstände ( $l \gg 1$ ) ist dies in guter Näherung erfüllt. In diesem Fall befinden sich viele andere Spins  $S$  zwischen den Plätzen  $i$  und  $j$  und es gibt kaum Korrelationen. Im Verlauf der RG werden Spins  $S_k$  mit  $k \neq i, j$  ausintegriert und die Spins  $S_i$  und  $S_j$  rücken näher. Um die Rechnung einfach zu halten, wird trotzdem der Ansatz (5.15) als Näherung verwendet.

Da bei  $\Gamma = \infty$  alle Kettenglieder mit Wahrscheinlichkeit 1 dezimiert sind, kann man die

---

<sup>5</sup>Genauer gesagt gilt für große  $\Gamma$ :  $s(\Gamma) \approx \Gamma$ , wobei für die Parameter in Bild 5.3 „groß“ schon ab  $\Gamma > 3$  gegeben ist.

## 5 Die Korrelationsfunktion

Überlebenswahrscheinlichkeit mit dem Faktor  $1/s(\Gamma = \infty)$  normieren. Da man diesen Normfaktor bei der Berechnung von (5.11) vor das Integral ziehen kann, wird er im folgenden weggelassen. Für die funktionale Abhängigkeit der Spin-Spin-Korrelationsfunktion von der externen Frequenz sind Proportionalitätsfaktoren nicht von Interesse.

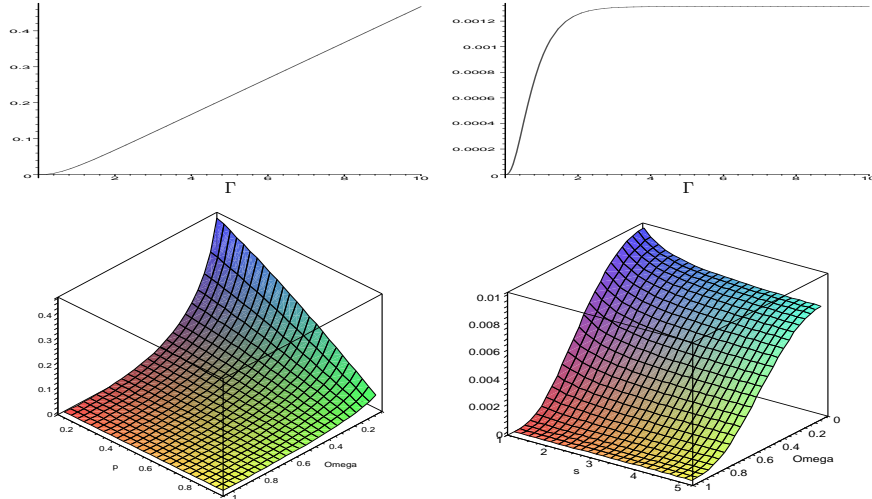


Abbildung 5.2: **Linke Spalte** Analytische Lösung mit  $P_0 = 0.9$ ,  $Q_1^\infty = 1/2$  und  $c(\Gamma)$  nach (4.93). Darunter  $s(\Omega; p)$ , wegen dem Vorfaktor  $1 - p$  verschwindet die Überlebensrate mit  $p \rightarrow 1$ . **Rechte Spalte** Cauchyverteilung für  $P_0$  und  $Q^\infty$ . Im oberen Plot ist  $s = s_V = 5$  im unteren Plot wird  $s_V$  variiert bei festem  $s = 5$ .

### 5.2 Berechnung von $\overline{\langle S_i S_j \rangle}$

Der Term  $\frac{1}{\omega - \frac{J_i J_j}{\Omega}}$  liefert nur für  $\omega = \frac{J_i J_j}{\Omega}$  einen wesentlich von Null verschiedenen Beitrag zum Integral und wird deshalb durch eine Delta-Funktion

$$\frac{1}{\omega - \frac{J_i J_j}{\Omega}} \approx \delta\left(\omega - \frac{J_i J_j}{\Omega}\right) \quad (5.16)$$

ersetzt. Durch diese Näherung kann eines der 3 Integrale in (5.11) trivial ausgeführt werden. Mit

$$J_i = \frac{\omega \Omega}{J_j} \quad (5.17)$$

ist

## 5 Die Korrelationsfunktion

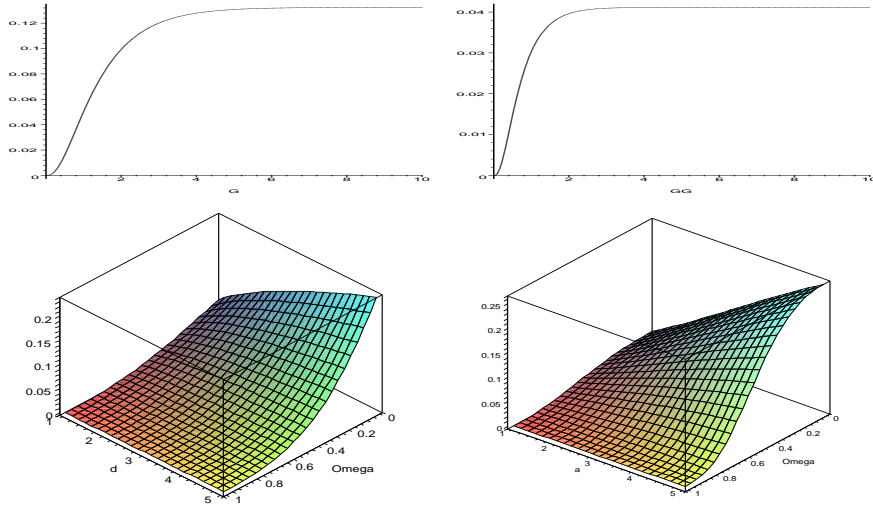


Abbildung 5.3: **Linke Spalte** Exponentiell abfallende Anfangsverteilung und Lösung von  $c(\Gamma)$  mit  $q = 1$  (4.58) und  $b_e = 1$  (oben). Darunter  $s(\Omega; b_e)$ . **Rechte Spalte** Numerische Integration von  $s$ . Man hat eine Anfangsverteilung vom Gauß-Typ für die  $J$ 's und  $V$ 's mit  $b_g = b_V = 1$  Im Unteren Plot ist ebenfalls  $b_g \equiv b_V$  gewählt.

$$\begin{aligned}
 \langle S_i S_j \rangle &= - \int \left[ \int \left( \int \delta\left(\omega - \frac{J_i J_j}{\Omega}\right) P(J_i) \frac{dJ_i}{J_i} \right) P(J_j) \frac{dJ_j}{J_j} \right] R(\delta = 0, l, \Omega) s(\Omega) \frac{d\Omega}{\Omega} \\
 &= - \int \int P\left(\frac{\omega \Omega}{J_j}\right) P(J_j) \frac{1}{J_j} \frac{J_j}{\omega \Omega} dJ_j R(\delta = 0, l, \Omega) s(\Omega) \frac{d\Omega}{\Omega}.
 \end{aligned}
 \tag{5.18}$$

Wegen  $J_{i,j} < \Omega$  gilt für  $\omega = \frac{J_i J_j}{\Omega}$  in der Regel

$$\omega < J_{i,j} < \Omega$$

und im Extremfall  $J \approx \Omega$  entsprechend  $\omega \lesssim \Omega$  (s. Abbildung 5.4).

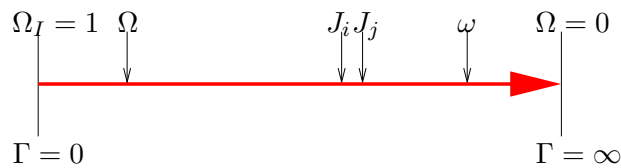


Abbildung 5.4: Laufende Energie und externe Frequenz.

Die Funktion  $R(\delta = 0, l, \Omega) s(\Omega)$  bleibt von der Integration über  $J_2$  unbehelligt. Da durch

## 5 Die Korrelationsfunktion

die Näherung (5.16) nur noch eine Kopplung  $J$  in den Gleichungen auftaucht, werden die Indizes an den  $J$  fallen gelassen.

### 5.2.1 Integration über $J$

Für die aus einer Gaußfunktion stammende Verteilung  $P$  (4.36) ist

$$\begin{aligned} \int \int P(J_i) P(J_j) \frac{dJ_i dJ_j}{J_i J_j} &= \int P\left(\frac{\omega\Omega}{J}\right) P(J) \frac{dJ}{\frac{\omega\Omega}{J} J} = P\left(\frac{\omega\Omega}{J}\right) P(J) \frac{dJ}{\omega\Omega} \\ &\propto \int \omega\Omega \frac{e^{-\frac{b_g(\omega^2\Omega^2+J^4)}{J^2}}}{\text{erf}(\Omega\sqrt{b_g})^2} \frac{dJ}{\omega\Omega} = \int \frac{e^{-\frac{b_g(\omega^2\Omega^2+J^4)}{J^2}}}{\text{erf}(\Omega\sqrt{b_g})^2} dJ. \end{aligned} \quad (5.19)$$

Um eine geschlossene Form der Stammfunktion angeben zu können, wird von  $\epsilon$  bis  $\Omega$  integriert. Es wird sich aber herausstellen, dass der Grenzübergang  $\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \langle SS \rangle(\omega; \epsilon)$  keine Probleme bereitet. Die Integration ergibt

$$\begin{aligned} \int_{\epsilon}^{\Omega} e^{-\frac{b_g(\omega^2\Omega^2+J^4)}{J^2}} dJ &\propto \left( e^{4\omega\Omega b_g} \text{erf}(\Omega\sqrt{b_g} + \sqrt{b_g}\omega) + \text{erf}(\Omega\sqrt{b_g} - \sqrt{b_g}\omega) \right. \\ &\quad \left. - e^{4\omega\Omega b_g} \text{erf}\left(\frac{\sqrt{b_g}(\epsilon^2 + \omega\Omega)}{\epsilon}\right) + \text{erf}\left(\frac{\sqrt{b_g}(-\epsilon^2 + \omega\Omega)}{\epsilon}\right) \right) e^{-2\omega\Omega b_g}. \end{aligned} \quad (5.20)$$

Für  $P$  aus (4.39) ergibt die Integration über  $J$

$$\begin{aligned} \int_0^{\Omega} (s^2 + J^2)^{-1} \left( \arctan\left(\frac{\Omega}{s}\right) \right)^{-2} \left( s^2 + \frac{\omega^2\Omega^2}{J^2} \right)^{-1} dJ &= \\ \left( \omega\Omega \arctan\left(\frac{s}{\omega}\right) - s^2 \arctan\left(\frac{\Omega}{s}\right) \right) \left( \arctan\left(\frac{\Omega}{s}\right) \right)^{-2} (\omega^2\Omega^2 - s^4)^{-1} s^{-1}. \end{aligned} \quad (5.21)$$

Der einfachste Fall liegt vor, wenn die Verteilung  $P$  die Form  $p e^{-\alpha p}$  hat. Dann gilt

$$P\left(\frac{\omega\Omega}{J}\right) P(J) \frac{dJ}{\omega\Omega} = p^2 \left(\frac{\Omega}{\omega\Omega} \frac{\Omega}{J}\right)^{-p} \frac{dJ}{\omega\Omega} = p^2 \left(\frac{\Omega}{\omega}\right)^{-p} \frac{dJ}{\omega\Omega}. \quad (5.22)$$

Die Variable  $J$  kürzt sich in diesem Spezialfall vollständig heraus. Damit ist auch die Integration über  $J$  trivial und liefert nur einen Faktor  $\Omega$ . Sammelt man alle Potenzen von  $\omega$  und zieht sie vor das verbliebene Integral, erhält man

## 5 Die Korrelationsfunktion

$$\begin{aligned}
 \overline{\langle S_i S_j \rangle}(\omega) &\propto \int_{\omega}^{\Omega_I=1} \left( \int_0^{\Omega} dJ \right) R(\delta = 0, l, \Omega) s(\Omega) \left( \frac{\Omega}{\omega} \right)^{-p} \frac{1}{\omega \Omega} \frac{d\Omega}{\Omega} \\
 &= \omega^{p-1} \int_{\omega}^1 R(\delta = 0, l, \Omega) s(\Omega) \Omega^{-p-1} d\Omega \\
 &= \omega^{p-1} \mathcal{F}(\omega).
 \end{aligned} \tag{5.23}$$

Die durch (5.23) definierte Funktion  $\mathcal{F}(\omega)$  fällt exponentiell mit  $\omega$  ab. Damit ist

$$\overline{\langle S_i S_j \rangle}(\omega) \sim \omega^{p-1} e^{-\frac{\omega}{\xi_{\omega}}}. \tag{5.24}$$

Die Abklingkonstante  $\xi_{\omega}$  kann durch Fit an  $\mathcal{F}(\omega)$  bestimmt werden. Für kleine  $\omega$  gilt

$$\overline{\langle S_i S_j \rangle}(\omega) \sim \omega^{p-1} = \omega^{-\alpha}. \tag{5.25}$$

Der Wert  $\alpha = 1 - p$  erfüllt das Skalengesetz (siehe Seite 17)

$$2 - \alpha = d\nu \tag{5.26}$$

mit der Dimension  $d = 1$  und  $\nu = p + 1$  aus (4.135).

## 5 Die Korrelationsfunktion

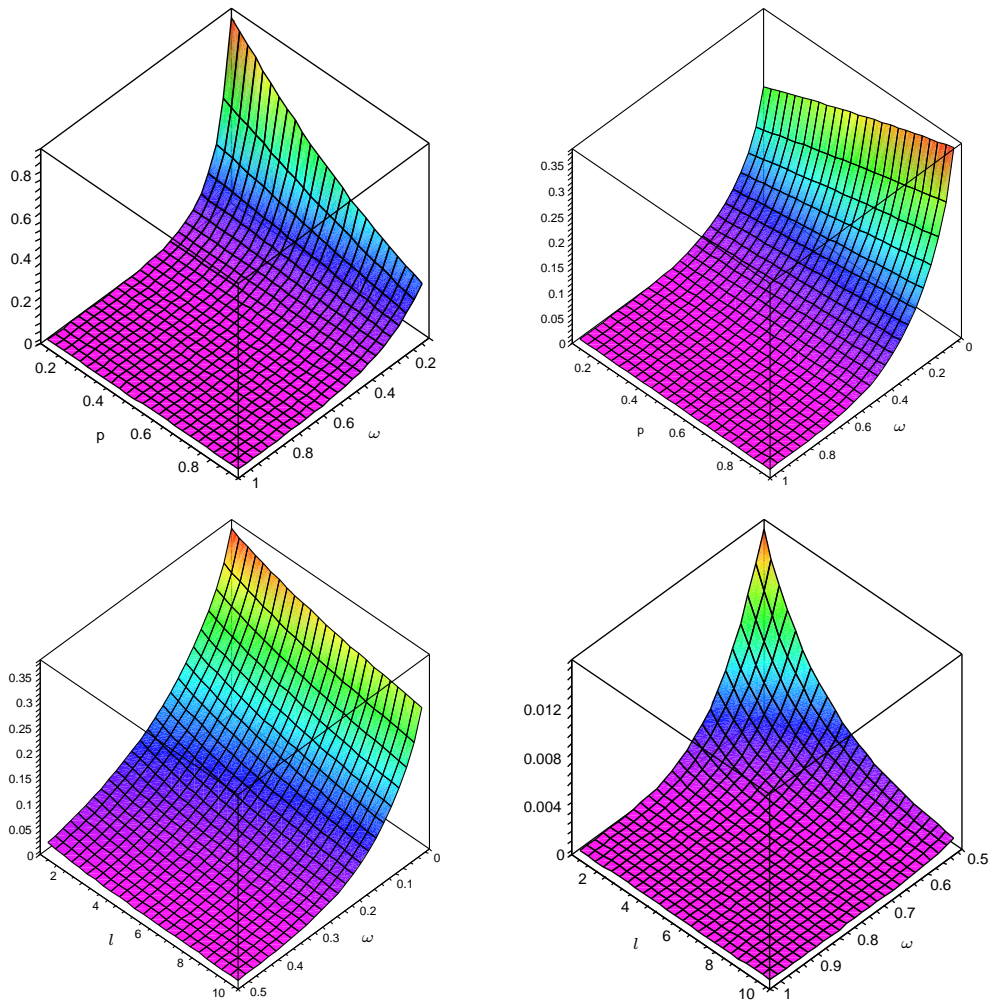


Abbildung 5.5: **Links oben:** Spin-Korrelation  $\langle S_i S_j \rangle (\omega)$  **Oben rechts:** Integral  $\mathcal{F}(\omega)$ . In beiden Fällen für  $l = 1$ . **Unten:** Längenabhängigkeit des Integrals  $\mathcal{F}(\omega)$  (hier für  $p=0.9$ ).

## 6 Fazit

Für eine Spinkette mit zufälligen Kopplungen wurde eine Renormierungsgruppen Analyse durchgeführt. Aus den perturbativ gewonnenen Beziehungen zwischen alten und renormierten Kopplungen wurden die Flussgleichungen für die kritischen Verteilungen abgeleitet.

Diese Differentialgleichungen konnten unter den in Kapitel 4 besprochenen Näherungen gelöst werden. Besonders ergiebig erwies sich dabei der Fall, wenn die ursprüngliche Verteilung der Spin-Kopplungskonstanten einem Potenzgesetz gehorcht.

Dadurch konnten die kritischen Exponenten  $\nu$  und  $\alpha$  als Funktion der Breite der eben angesprochenen Verteilung sowie der Korrelator

$$\langle \overline{S_i S_j} \rangle$$

analytisch berechnet werden.

Weitere Arbeiten in diesem Feld könnten eine numerische Integration des Gleichungssystems (4.46) und (4.75) beinhalten, sowie die Untersuchung des Modells in einem externen Magnetfeld. Nicht minder interessant wäre die Berechnung der Leitfähigkeit einer ungeordneten Spinkette.



# A Der Pfadintegralformalismus

Neben der Schrödingergleichung und Heisenbergs Matrizenmechanik existiert in Form des Feynman<sup>1</sup> Pfadintegrals (PF) ein weiterer, äquivalenter Zugang zur Quantenmechanik. Auch wenn das Pfadintegral in vielen Standardvorlesungen zur Quantentheorie stiefmütterlich oder überhaupt nicht behandelt wird, kann es doch mehrere Vorzüge aufweisen. So lässt sich beispielsweise der klassische Limes leicht aus dem PF extrahieren, weswegen der Gebrauch von Pfadintegralen in semiklassischen Theorien und in der Untersuchung von Quantenchaos beliebt ist. Auch findet das in der klassischen Physik zentrale Konzept der Teilchen-Bahn bzw. Trajektorie wieder Eingang in die Quantenwelt.

Der Ausgangspunkt zur Herleitung des PF bildet der Zeitentwicklungsoperator. Durch Diskretisierung der Zeitachse und geschicktes Einfügen von Einsen erhält man ein Funktionalintegral, in dem statt des Hamilton Operators die klassische Hamiltonfunktion oder (je nach Schreibweise) die Lagrangefunktion steht [78, 88, 104]. Zuerst wird das PF im einfachsten Fall – dem Einteilchensystem – eingeführt, dann folgt eine knappe Herleitung des für Kapitel 3 benötigten Vielteilchenintegrals für Fermionen. Dabei werden Grassmannvariablen benutzt, deren wichtigste Eigenschaften im Anhang B aufgelistet sind.

## A.1 Einteilchen Zustandssumme als Pfadintegral

Die Zustandssumme für ein Teilchen ist

$$\begin{aligned} \mathcal{Z} &= Sp e^{-\beta\mathcal{H}} \\ &= \int dx \langle x | e^{-\beta\mathcal{H}} | x \rangle, \end{aligned} \tag{A.1}$$

wobei die Spur mit der Ortsbasis genommen wurde. Vergleicht man das Matrixelement  $\langle x | e^{-\beta\mathcal{H}} | x \rangle$  mit dem Zeitentwicklungsoperator<sup>2</sup>

$$U(x_f, t_f; x_i, t_i) = \langle x_f | e^{-\frac{i}{\hbar}(t_f - t_i)\mathcal{H}} | x_i \rangle. \tag{A.2}$$

sieht man, dass man die Zustandssumme formal als Summe (Integral) über die Diagonalelemente eines Zeitentwicklungsoperators auffassen kann, wenn man

$$i(t_f - t_i) = \beta\hbar \tag{A.3}$$

---

<sup>1</sup>Richard P. Feynman (1918-1988)

<sup>2</sup>Die Indizes i bzw f stehen für initial (Anfangszustand) und final (Endzustand), und zur besseren Übersicht wird wieder  $\hbar$  explizit hingeschrieben.

## A Der Pfadintegralformalismus

setzt. Dies motiviert die Einführung einer rein imaginären Zeit

$$\tau = i t. \quad (\text{A.4})$$

Da der Zeitentwicklungsoperator als ein Pfadintegral dargestellt werden kann, ergibt sich eine Beziehung zwischen der Zustandssumme und einem Pfadintegral mit imaginären Zeiten. Damit stehen neue und mächtige Techniken zur (näherungsweisen) Berechnung von Zustandssummen und damit allen thermodynamischen Größen zur Verfügung. Der Zeitentwicklungsoperator ist

$$U(x_f, t_f; x_i, t_i) = \int_{(x_i, \tau_i)}^{(x_f, \tau_f)} D[x(\tau)] e^{-\frac{1}{\hbar} \int_{\tau_i}^{\tau_f} d\tau \left( \frac{m}{2} \left( \frac{dx(\tau)}{d\tau} \right)^2 + V(x(\tau)) \right)} \quad (\text{A.5})$$

$$= \int_{(x_i, \tau_i)}^{(x_f, \tau_f)} D[x(\tau)] e^{-\frac{1}{\hbar} \int_{\tau_i}^{\tau_f} d\tau H[x(\tau)]}. \quad (\text{A.6})$$

Die Integration erstreckt sich über alle Pfade von  $(x_i, \tau_i)$  bis  $(x_f, \tau_f)$ . Die Zeitableitung in der kinetischen Energie ist symbolisch zu verstehen, als suggestive Notation für

$$\epsilon \sum_{n=1}^M \frac{m}{2} \left( \frac{x_n - x_{n-1}}{\epsilon} \right)^2, \quad (\text{A.7})$$

wobei das Zeitintervall  $t_f - t_i$  in  $M$  äquidistante Abschnitte unterteilt wurde mit  $\epsilon = (t_f - t_i)/M$ . Eine Diskussion des Maßes  $D[x(\tau)]$  findet sich in der angegebenen Literatur [78, 88], die mathematischen Feinheiten und Details sollen hier nicht weiter interessieren. Durch analytische Fortsetzung, die so genannte *Wick-Rotation*

$$t = -i \tau, \quad (\text{A.8})$$

kann man den Zusammenhang zwischen klassischer Lagrangefunktion und der Hamiltonfunktion in imaginärer Zeit aufzeigen. Mit (A.8) erhält man die euklidische Wirkung

$$\frac{i}{\hbar} \int dt \left[ \frac{m}{2} \left( \frac{dx(\tau)}{dt} \right)^2 - V(x(t)) \right] = \frac{-1}{\hbar} \int d\tau \left[ \frac{m}{2} \left( \frac{dx(\tau)}{d\tau} \right)^2 + V(x(\tau)) \right]. \quad (\text{A.9})$$

Für die Zustandssumme kann man schreiben

$$\mathcal{Z} = \int_{x(\beta\hbar)=x(X)} D[x(\tau)] e^{-\frac{1}{\hbar} \int_0^{\beta\hbar} d\tau \left( \frac{m}{2} \left( \frac{dx(\tau)}{d\tau} \right)^2 + V(x(\tau)) \right)}. \quad (\text{A.10})$$

Hier erfolgt die Summation über alle  $\beta\hbar$ -periodischen Trajektorien.

## A.2 Vielteilchen Pfadintegral

Beim Einteilchenproblem gelangt man von Ausdruck (A.5) nach (A.6), indem man mehrfach eine 1 in Form der Vollständigkeitsrelation

## A Der Pfadintegralformalismus

$$\sum_i |x_i \rangle \langle x_i| \quad (\text{A.11})$$

und

$$\sum_i |p_i \rangle \langle p_i| \quad (\text{A.12})$$

einfügt. Bei einem Vielteilchen-Hamilton Operator in zweiter Quantisierung braucht man für das weitere Vorgehen eine geeignete Basis aus Eigenzuständen, die so genannten *kohärenten Zustände*.

Bezeichnet man wieder die fermionischen Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren mit  $a_k^\dagger$  und  $a_k$ , dann kann man zu letzterem<sup>3</sup> einen Eigenzustand wie folgt definieren

$$a_k |\xi_k \rangle = \xi_k |\xi_k \rangle \quad (\text{A.13})$$

mit

$$|\xi_k \rangle = e^{-\sum_k \xi_k a_k^\dagger} |0\rangle. \quad (\text{A.14})$$

Die Eigenwerte  $\xi_k$  sind Grassmannvariablen und der Index  $k$  steht stellvertretend für einen vollständigen Satz an Quantenzahlen. Der Zustand  $|0\rangle$  ist der Vakuumzustand des Vielteilchensystems. Wichtig für die Konstruktion des Pfadintegrals ist die Vollständigkeit dieser kohärenten Zustände

$$1 = \int \prod_k d\xi_k^* d\xi_k e^{-\sum_k \xi_k^* \xi_k} |\xi \rangle \langle \xi|. \quad (\text{A.15})$$

Man bezeichnet mit  $::\dots:$  die *Normalordnung*, bei der alle Vernichtungsoperatoren rechts von den Erzeugern stehen. Damit gilt mit der Baker-Campbell-Hausdorff-Formel

$$e^{\epsilon \mathcal{H}(a^\dagger, a)} =: e^{\epsilon \mathcal{H}(a^\dagger, a)} : + O(\epsilon^2), \quad (\text{A.16})$$

wobei  $\epsilon$  wieder für ein kleines Zeitintervall  $(t_f - t_i)/M$  steht. Für hinreichend kleine Zeitintervalle wird der Fehler in (A.16) also beliebig klein.

Der Zeitentwicklungsoperator zwischen 2 fermionischen Vielteilchenzuständen kann durch wiederholtes Einfügen von A.15 wie folgt umgeformt werden

---

<sup>3</sup>  $a_k^\dagger$  besitzt keinen Eigenzustand, siehe [88] Kapitel 1.5. Für bosonische Operatoren sind die Eigenwerte gewöhnliche, komplexe Zahlen.

## A Der Pfadintegralformalismus

$$\begin{aligned}
U(\xi_{k,f}^*, t_f; \xi_{k,i}, t_i) &= \lim_{M \rightarrow \infty} \langle \xi_{k,f} | e^{-i\mathcal{H}(t_f - t_i)} | \xi_{k,i} \rangle \\
&= \lim_{M \rightarrow \infty} \int \prod_{n=1}^{M-1} \prod_k d\xi_k^* d\xi_k e^{-\sum_{n=1}^{M-1} \xi_k^* \xi_k} \\
&\quad \times \prod_{n=1}^M \langle \xi_n | e^{-i\epsilon: \mathcal{H}(a^\dagger, a):} + O(\epsilon^2) | \xi_{n-1} \rangle \quad (\text{A.17}) \\
&= \lim_{M \rightarrow \infty} \int \prod_{n=1}^{M-1} \prod_k d\xi_k^* d\xi_k e^{-\sum_{n=1}^{M-1} \xi_k^* \xi_k} \\
&\quad \times e^{\sum_{n=1}^M (\sum_k \xi_k^* \xi_{k,n-1} - i\epsilon H(\xi_{k,n}^*, \xi_{k,n-1}))},
\end{aligned}$$

mit  $\xi_{k,0} = \xi_{k,i}$  und  $\xi_{k,M} = \xi_{k,f}$ .

Wie im Einteilchenfall werden symbolisch suggestive Abkürzungen eingeführt

$$\xi_{k,n}^* \frac{\xi_{k,n} - \xi_{k,n-1}}{\epsilon} = \xi_k^*(t) \frac{\partial}{\partial t} \xi_k(t) \quad (\text{A.18})$$

und

$$H(\xi_{k,n}^*, \xi_{k,n-1}) = H(\xi_k^*(t), \xi_k(t)). \quad (\text{A.19})$$

Damit kommt man schließlich auf die Darstellung

$$\begin{aligned}
U(\xi_{k,f}^*, t_f; \xi_{k,i}, t_i) &= \int_{\xi_k(t_i) = \xi_{k,i}}^{\xi_k(t_f) = \xi_{k,f}} D[\xi_k^*(t) \xi_k(t)] e^{\sum_k \xi_k^*(t_f) \xi_k(t_f)} \\
&\quad \times e^{i \int_{t_i}^{t_f} dt \left( \sum_k i \xi_k^*(t) \frac{\partial}{\partial t} \xi_k(t) - H(\xi_k^*(t), \xi_k(t)) \right)}. \quad (\text{A.20})
\end{aligned}$$

Die großkanonische Zustandssumme als PF in imaginärer Zeit mit chemischem Potential  $\mu$ , Teilchenzahloperator  $\mathcal{N} = \sum_k a_k^\dagger a_k$  und  $\hbar = 1$  ist damit

$$\begin{aligned}
\mathcal{Z} &= Sp e^{-\beta(\mathcal{H} - \mu \mathcal{N})} \\
&= \int \prod_k d\xi_k^* d\xi_k e^{-\sum_k \xi_k^* \xi_k} \langle \xi | e^{-\beta(\mathcal{H} - \mu \mathcal{N})} | \xi \rangle \\
&= \int_{\xi_k(\beta) = -\xi_k(0)} D[\xi_k^*(t) \xi_k(t)] e^{-\int_0^\beta d\tau \left[ \sum_k \xi_k^*(t) \left( \frac{\partial}{\partial t} - \mu \right) \xi_k(t) - H(\xi_k^*(t), \xi_k(t)) \right]}. \quad (\text{A.21})
\end{aligned}$$

Wegen der Antivertauschung von Fermionen geht diesmal das Pfadintegral über alle antiperiodischen Bahnen mit Periode  $\beta$ .

### A.3 Das chemische Potential $\mu_S$

Die Spinoperatoren antikommutieren am Glied  $i$ , Spins an verschiedenen Orten kommutieren jedoch. Spinoperatoren erfüllen deswegen streng genommen weder die Vertauschungsrelationen für Bosonen noch die der Fermionen. Dieses Problem ist natürlich in der Literatur schon seit längerem bekannt [57].

Die Fermion- bzw. Bosonisierung von Spinsystemen ist deswegen nicht trivial, und in der Literatur findet man verschiedene Repräsentationen des Spins.

Die Auswahl reicht von Majorana-Operatoren über supersymmetrische Ansätze bis zu Hubbardoperatoren [99]. In dieser Arbeit wird der Ansatz von Popov und Fedotov [98, 105] verwendet, die die Fermionen als Quasiteilchen mit imaginärem chemischen Potential beschreiben. Da dies nicht in jedem Buch abgehandelt wird, folgt hier nochmal eine Kurzfassung der Originalarbeit [105]. für ein System mit Spin  $S_z = 1/2$ .

Es sei  $\mathcal{H}_\sigma$  ein Hamilton Operator, der von den Pauli Matrizen abhängt (z.B. ein Ising- oder Dicke-Modell). Durch

$$\sigma_i^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \rightarrow a_i^\dagger a_i - b_i^\dagger b_i \quad (\text{A.22})$$

$$\sigma_i^+ = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \rightarrow a_i^\dagger b_i \quad (\text{A.23})$$

$$\sigma_i^- = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \rightarrow b_i^\dagger a_i \quad (\text{A.24})$$

werden die Spins durch Fermi-Operatoren ersetzt, wodurch eine Pfadintegral Darstellung der Zustandssumme möglich wird. Der so fermionisierte Hamilton Operator wird mit  $\mathcal{H}_F$  bezeichnet.

In der Notation von [105] wird der zum Ort  $i$  gehörende Raum durch folgende Vektoren aufgespannt ( $\Phi_0$  ist der Vakuumzustand)

$$a_i^\dagger \Phi_0 = |1, 0 \rangle_i \quad b_i^\dagger \Phi_0 = |0, 1 \rangle_i \quad (\text{A.25})$$

$$1 \Phi_0 = |0, 0 \rangle_i \quad a_i^\dagger b_i^\dagger \Phi_0 = |1, 1 \rangle_i . \quad (\text{A.26})$$

Während (A.25) Spin „up“ und Spin „down“ entspricht, sind die beiden Zustände in (A.26) die unphysikalischen Zustände des Modells  $|\text{unphys.} \rangle$ .

Der Trick mit dem imaginären chemischen Potential sorgt nun dafür, dass sich diese unphysikalischen Beiträge am Ort  $i$  in der Zustandssumme exakt kompensieren. Die Spur über die Zustände (A.26) wird durch die Notation

$$Sp_i^{\text{unphys.}} \quad (\text{A.27})$$

ausgedrückt. Schreibt man die Zustandssumme des Systems in der Form

$$\mathcal{Z}_\sigma = Sp \exp(-\beta \mathcal{H}_\sigma) = i^N Sp \exp\left(-\beta \left[ \mathcal{H}_F + \frac{i\pi}{2} \mathcal{N} \right]\right) \quad (\text{A.28})$$

## A Der Pfadintegralformalismus

mit dem Teilchenzahloperator  $\mathcal{N}$  und dem dazugehörigem Eigenwert  $N$ , so kann man die Spurbildung (A.27) einfach ausführen. Dazu zerlegt man  $\mathcal{H}_F$  und  $\mathcal{N}$  in einen Anteil, der zu  $i$  gehört und den restlichen Anteil, der alle anderen Gitter/Kettenplätze enthält

$$\mathcal{H}_F = \mathcal{H}_F^i + \mathcal{H}'_F \quad (\text{A.29})$$

$$\mathcal{N} = \mathcal{N}^i + \mathcal{N}' . \quad (\text{A.30})$$

Mit

$$\mathcal{H}'_F | \text{unphys.} \rangle = 0 \quad (\text{A.31})$$

gilt

$$\begin{aligned} & Sp_i^{\text{unphys.}} \exp(-\beta \left[ \mathcal{H}_F + \frac{i\pi}{2} \mathcal{N} \right]) \\ &= \exp(-\beta \left[ \mathcal{H}'_F + \frac{i\pi}{2} \mathcal{N}' \right]) \times Sp_i^{\text{unphys.}} (-i)^N \\ &= 0, \end{aligned} \quad (\text{A.32})$$

wegen  $(-i)^0 + (-i)^2 = 0$  ( $\mathcal{N}|0, 0\rangle = 0$ ,  $\mathcal{N}|1, 1\rangle = 2|1, 1\rangle$ ).

Den Faktor  $i\pi/2$  vor  $\mathcal{N}$  in (A.28) interpretiert man in Analogie zur großkanonischen Zustandssumme als rein imaginäres chemisches Potential  $\mu_S$ .

### A.4 Matsubarafrequenzen

In der Physik erweist es sich oft als praktisch, nicht im Ortsraum zu rechnen, sondern eine Fouriertransformation durchzuführen. Aufgrund der  $\beta$ -(Anti)Periodizität definiert man für eine Funktion mit imaginärem Zeitargument [88]

$$f(\tau) = \frac{1}{\beta} \sum_{n=-\infty}^{\infty} f(\omega_n) e^{-i\omega_n \tau}. \quad (\text{A.33})$$

Die Rücktransformation ist

$$f(\omega_n) = \frac{1}{2} \int_{-\beta}^{\beta} d\tau f(\tau) e^{i\omega_n \tau}. \quad (\text{A.34})$$

Die reellen Frequenzen  $\omega_n$  heißen *Matsubarafrequenzen*. Für Fermionen gilt

$$f(\tau) = -f(\tau + \beta) \quad -\beta < \tau < 0. \quad (\text{A.35})$$

Diese Antiperiodizität bestimmt die  $n$ -Abhängigkeit von  $\omega_n$ . Teilt man das Integral in (A.34) in einen positiven und einen negativen Integrationsbereich auf

## A Der Pfadintegralformalismus

$$f(\omega_n) = \frac{1}{2} \left[ \int_0^\beta d\tau f(\tau) e^{i\omega_n \tau} + \int_{-\beta}^0 d\tau f(\tau) e^{i\omega_n \tau} \right] \quad (\text{A.36})$$

und ersetzt unter Benutzung von (A.35) im zweiten Summanden  $\tau$  durch  $\tau + \beta$

$$\begin{aligned} & \int_{-\beta}^0 d(\tau + \beta) f(\tau + \beta) e^{i\omega_n (\tau + \beta)} = \\ & \int_{-\beta}^0 d(\tau + \beta) (-f(\tau)) e^{i\omega_n \tau} e^{i\omega_n \beta} = \\ & \int_0^\beta d\tau (-f(\tau)) e^{i\omega_n \tau} e^{i\omega_n \beta}, \end{aligned} \quad (\text{A.37})$$

erhält man

$$\begin{aligned} f(\omega_n) &= \frac{1}{2} \left[ \int_0^\beta d\tau f(\tau) e^{i\omega_n \tau} + \int_{-\beta}^0 d\tau f(\tau) e^{i\omega_n \tau} \right] \\ &= \frac{1}{2} (1 - e^{i\omega_n \beta}) \int_0^\beta d\tau f(\tau) e^{i\omega_n \tau}. \end{aligned} \quad (\text{A.38})$$

Für  $f(\omega_n) = 0$  erhält man damit die fermionischen<sup>4</sup> Matsubarafrequenzen als

$$\omega_n = \frac{(2n + 1)\pi}{\beta}. \quad (\text{A.39})$$

---

<sup>4</sup>Eine analoge Herleitung gibt für den bosonischen Fall  $\omega_n = \frac{2n\pi}{\beta}$ .

## B Rechnen mit Grassmannvariablen

Aufgrund des Pauliprinzips gilt

$$[a_i, a_j^\dagger]_+ = a_i a_j^\dagger + a_j^\dagger a_i = \delta_{ij} \quad (\text{B.1})$$

und somit

$$a_i^2 = 0 = a_i^{\dagger 2} \quad (\text{B.2})$$

für alle Fermioperatoren.

Hier wird man mit dem Problem konfrontiert, dass man für die Eigenwerte antikommutierende Operatoren antikommutierende Zahlen einführen, zum Beispiel für das fermionische Pfadintegral in Anhang A.

Die Mathematik liefert die hierfür notwendige Algebra, die Grassmann-Algebra<sup>1</sup>.

Sie wird über eine Menge von Erzeugern oder Generatoren  $\{\xi_i\}$  definiert, die die gewünschte Eigenschaft

$$\xi_i \xi_j + \xi_j \xi_i = 0 \quad (\text{B.3})$$

und damit

$$\xi_i^2 = 0 \quad (\text{B.4})$$

besitzen.

Die Basis der Grassmann-Algebra besteht aus der abzählbaren Menge

$$\{1, \xi_{i_1}, \xi_{i_1} \xi_{i_2}, \xi_{i_1} \xi_{i_2} \xi_{i_3} \dots\}. \quad (\text{B.5})$$

Die Dimension der Algebra mit  $n$  Generatoren ist  $2^n$ . Jede Grassmannzahl ist eine endliche Linearkombination dieser Basis. Zu jedem Generator definiert man einen konjugierten Erzeuger

$$\begin{aligned} (\xi_i)^* &= \xi_i^* \\ (\xi_i^*)^* &= \xi_i \\ (z \xi_i)^* &= \bar{z} \xi_i^* . \end{aligned} \quad (\text{B.6})$$

---

<sup>1</sup>Nach Hermann Günter Grassmann, geboren am 15 April 1809 in Stettin, Polen, gestorben am 26 Sept 1877 ebenfalls in Stettin.



## B Rechnen mit Grassmannvariablen

Dabei ist  $z$  eine komplexe Zahl und  $\bar{z}$  die dazu komplex konjugierte Zahl. Für das folgende kann die Notation vereinfacht werden, weswegen auf den Index  $i$  verzichtet wird. Die Basis sei

$$\{1, \xi, \xi^*, \xi^* \xi\}. \quad (\text{B.7})$$

Da Quadrate und damit alle höheren Potenzen verschwinden, sind analytische Funktionen mit Grassmannvariablen linear

$$f(\xi) = z_0 + z_1 \xi. \quad (\text{B.8})$$

Eine Taylorentwicklung einer Funktion mit Grassmannvariablen ist also besonders einfach. Eine allgemeine Funktion in  $\xi$  und  $\xi^*$  ist

$$H(\xi, \xi^*) = z_0 + z_1 \xi \bar{z} \xi^* + z_{12} \xi^* \xi. \quad (\text{B.9})$$

Auch eine Integration dieser Funktionen ist möglich. In Analogie zu dem bekannten Integral über reelle Zahlen fordert man Translationsinvarianz [52]

$$\int d\xi f(\xi) = \int d\xi f(\xi + a) \quad (\text{B.10})$$

für eine beliebige Grassmannzahl  $a$ . Im Spezialfall  $f(\xi) = \xi$  folgt daraus

$$\int d\xi a = 0, \quad (\text{B.11})$$

was folgende Definition motiviert

$$\int d\xi 1 = 0 \quad \int d\xi \xi = 1 \quad (\text{B.12})$$

$$\int d\xi^* 1 = 0 \quad \int d\xi^* \xi^* = 1. \quad (\text{B.13})$$

Allerdings darf man nicht der Versuchung erliegen, in  $d\xi$  eine „infinitesimale“ Grassmannzahl zu sehen.

Das benötigte Äquivalent des Gaußintegrals für Grassmannvariablen ist

$$\int \prod d\eta_i^* d\eta_i e^{-\eta_i^* H_{ij} \eta_j + \xi_i^* \eta_i + \xi_i \eta_i^*} = \det[H] e^{\xi_i^* H_{ij}^{-1} \xi_j}, \quad (\text{B.14})$$

wobei  $H^{-1}$  die zu  $H$  inverse Matrix ist.

Der Hauptunterschied zur Gaußidentität mit normalen Zahlen besteht darin, dass die Determinante im Zähler steht. Der Beweis findet sich in vielen Büchern über Vielteilchenphysik, etwa [78, 88].

# C Laplace-Transformation

Sei  $f(t)$  eine auf  $[0, \infty)$  definierte Funktion, dann ist die *unilaterale*<sup>1</sup> Laplace-Transformation (LT)<sup>2</sup> durch

$$LP[f(t)](s) = LP[f](s) = f(s) = \int_0^{\infty} e^{-st} f(t) dt \quad (C.1)$$

gegeben [1]. Ihr Wertebereich sind alle  $s \in \mathbb{R}$ , für die das Integral konvergiert. Die Umkehrtransformation findet sich unter den Namen „Bromwich Integral“, „Fourier-Mellin Integral“ oder Duhamels Faltungs Prinzip.

- Existenz

Für jede stückweise stetige Funktion  $f(t)$ , welche für alle  $t$  die Eigenschaft

$$|f(t)| \leq M e^{at} \quad (C.2)$$

erfüllt, existiert eine Funktion  $LP[f(t)](s)$  mit  $s > a$ .

- Eindeutigkeit

Die Laplace-Transformation ist eindeutig im folgenden Sinne (Lerch Theorem):

Gilt für 2 Funktionen  $f_1$  und  $f_2$

$$LP[f_1](s) = LP[f_2](s) = f(s), \quad (C.3)$$

so ist

$$\int_0^a (f_1(t) - f_2(t)) dt = 0 \quad \forall a > 0. \quad (C.4)$$

- Eigenschaften

Die LT ist linear und hat die Faltungseigenschaft

$$LP[f(t) * g(t)] = LP[f(t)]LP[g(t)] \quad (C.5)$$

$$LP^{-1}[f(t) * g(t)] = LP^{-1}[f(t)]LP^{-1}[g(t)] \quad (C.6)$$

---

<sup>1</sup>Es gibt auch die bilaterale LT, bei der sich die Integration über  $(-\infty, \infty)$  erstreckt [97].

<sup>2</sup>Pierre-Simon Laplace (1749-1827)

## C Laplace-Transformation

- Umkehrtransformation

Die inverse LT berechnet sich nach Mellins<sup>3</sup> Inversionsformel

$$f(t) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\gamma-i\infty}^{\gamma+i\infty} e^{st} f(s) ds. \quad (\text{C.7})$$

Der Integrationsweg ist hier eine Linie parallel zur imaginären Achse, die in  $\gamma$  die reelle Achse schneidet. Dabei muss  $\Gamma$  größer sein als der Realteil aller Singularitäten von  $f(s)$ .

Die inverse Funktion  $f(t)$  ist dabei eindeutig wie im obigen Sinne, d.h. 2 Lösungen von (C.7) unterscheiden sich nur in einer Punktmenge vom Maß Null.

LT für häufig vorkommende Funktionen:

$f(t)$	$LP[f](s)$	für
1	$\frac{1}{s}$	$s > 0$
$t$	$\frac{1}{s^2}$	$s > 0$
$t^n$	$\frac{n!}{s^{n+1}}$	$n \in \mathbb{Z}$
$e^{at}$	$\frac{1}{s-a}$	$s > a$
$\delta(t-c)$	$e^{cs}$	$c > 0$
$\cos(at)$	$\frac{s}{s^2+a^2}$	$s >  a $
$\sin(at)$	$\frac{a}{s^2+a^2}$	$s >  a $

In Hinblick auf Kapitel 4 gilt insbesondere

$$\begin{aligned}
 LP[e^{bt}(a_0 + a_1 t + a_2 t^2 + \dots)](s) = \\
 LP[e^{bt} a_0 + e^{bt} a_1 t + e^{bt} a_2 t^2 + \dots](s) = \frac{a_0}{b-s} + \frac{a_1}{(b-s)^2} + \frac{2! a_2}{(b-s)^3} + \dots
 \end{aligned} \quad (\text{C.8})$$

nach obiger Tabelle und mit (C.5).

---

<sup>3</sup>R.H. Mellin, Finne (1854-1933)

# D Eindimensionale Systeme

*To a casual ostrich [102] the world of quantum physics in one dimension may sound a little onedimensional, suitable perhaps for those with an unhealthy obsession for the esoteric. Nothing of course could be further from the truth.*

David Logan University of Oxford, UK in J.Phys. A 37, p5275-6 Book Review: Quantum Physics in One Dimension.

## D.1 Griffiths-Singularitäten

Ein transverses Ising Modell ohne Unordnung kann exakt gelöst werden<sup>1</sup>. Mit Unordnung jedoch offenbaren sich ganz neue physikalische Aspekte.

So besitzen ungeordnete Systeme sogenannte *rare regions*, Bereiche, die überdurchschnittlich korreliert sind und die das Verhalten des Systems massiv beeinflussen können [17]. Wie von Griffiths [53] gezeigt wurde, führen diese seltenen Bereiche zu einer nichtanalytischen Freien Energie (Griffiths-Singularitäten (GS)) [33].

Allerdings ist dieser Effekt in klassischen Systemen nur sehr schwach ausgeprägt. Ein anderes Bild bieten Quantensysteme am absoluten Temperaturnullpunkt. Beim Quantenphasenübergang (QPÜ) kann die Griffiths-Singularität<sup>2</sup> deutlich zu Tage treten.

Ein in der Literatur besonders gut untersuchtes Modell ist das RTISM<sup>3</sup> mit eingefrorener Unordnung<sup>4</sup>

$$\mathcal{H} = - \sum J_i \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z - \sum h_i \sigma_i^x - H \sum \sigma_i^z. \quad (\text{D.1})$$

Die Kopplungen  $J_i$  und  $h_i$  genügen gewissen Wahrscheinlichkeitsverteilungen.

Behandelt man das Modell (D.1) mittels der RG [39, 40] sieht man, dass am kritischen Punkt die Verteilungen der Kopplungen als Funktion der Energie immer breiter werden. Die Unordnung wächst und wächst, je weiter man sich dem Fixpunkt nähert<sup>5</sup>.

An diesem Punkt wird die perturbative RG exakt und man kann für dieses System die

---

<sup>1</sup>Durch eine Jordan-Wigner-Transformation kann das Modell auf einen nichtwechselwirkenden, fermionischen Hamilton Operator abgebildet werden [114].

<sup>2</sup>Da McCoy [82] und Griffiths ihre Arbeiten zeitgleich veröffentlichten sollte, man gerechterweise von Griffiths-McCoy-Singularitäten sprechen, allerdings hat sich der Term Griffiths-Singularitäten eingebürgert.

<sup>3</sup>Neben Anwendungen in der Grundlagenforschung findet das RTISM praktische Anwendung bei der Beschreibung gewisser Substanzen wie LiHoF<sub>4</sub> [49].

<sup>4</sup>Ein weiteres Beispiel für die Griffiths-Phase in einem 1D System findet man in [30].

<sup>5</sup>In der englischen Literatur spricht man hier von einem *infinite randomness fixed point*.

meisten Eigenschaften analytisch behandeln. Dies hängt stark mit dem folgenden Sachverhalt zusammen. Es zeigt sich nämlich, dass die kritischen Eigenschaften durch die oben angesprochenen *seltenen Ereignisse* dominiert werden:

Die *gemittelten* Eigenschaften werden von Realisierungen der Verteilung der Kopplungskonstanten dominiert, die eine äusserst geringe Wahrscheinlichkeit aufweisen. Im Gegensatz dazu tragen die *typischen* Realisierungen, also Kopplungen die mit hoher Wahrscheinlichkeit auftreten, kaum zu den mittleren kritischen Größen bei. Nur wenige Realisierungen tragen also maßgeblich zu den beobachtbaren Größen bei.

### D.1.1 Kritische Größen

Der Vollständigkeit halber werden zunächst die gebräuchlichsten kritischen Exponenten definiert<sup>6</sup> [17].

- $\alpha$  gehört zur spezifischen Wärme bei verschwindendem externen Magnetfeld  $C \sim |t|^{-\alpha}$ .
- $\beta$  gehört zur spontanen Magnetisierung  $\lim_{H \rightarrow 0+} M \propto (-t)^\beta$ .
- $\gamma$  beschreibt die Divergenz der Suszeptibilität  $\chi_{H=0} \sim |t|^{-\gamma}$  bei  $H = 0$ .
- $\delta$  definiert sich über  $M \sim |h|^{1/\delta}$  mit  $h = H/T$ .
- $\nu$  ist der kritische Exponent in (4.135)  $\xi \sim |t|^{-\nu}$ .
- $\eta$  beschreibt die Divergenz der Korrelationsfunktion exakt am kritischen Punkt  $G(r) \sim \frac{1}{r^{d-2+\eta}}$ .
- $z$  stellt einen Zusammenhang zwischen der Korrelationslänge und den zeitabhängigen Größen [117] nahe dem kritischen Punkt her. Für die typische Korrelationszeit  $\tau$  gilt etwa  $\tau \sim \xi^z$ .

Hier sollen nun die analytisch gewonnenen Ergebnisse über das RTISM zusammengefasst werden (aus [40, 41, 60, 114, 134]).

Die Notation sei

---

<sup>6</sup>Im weiteren Verlauf stellt  $H$  das externe Magnetfeld dar,  $d$  ist die Dimension des Systems und  $t = \frac{T-T_C}{T_C}$  steht für die reduzierte Temperatur. In dieser Arbeit wird anstatt der Temperatur allgemein von Energieabhängigkeit gesprochen, siehe auch die Fußnote auf Seite 70.

## D Eindimensionale Systeme

$$\Delta_h = [\ln h]_{av} \quad (\text{D.2})$$

$$\Delta_J = [\ln J]_{av} \quad (\text{D.3})$$

$$\delta = \frac{[\ln h]_{av} - [ln J]_{av}}{\text{var}[\ln h] + \text{var}[\ln J]} \quad (\text{D.4})$$

$$\phi = (1 + \sqrt{5}) \frac{1}{2} \quad (\text{D.5})$$

$$\Gamma = \ln(\Omega_I/\Omega) \quad (\text{D.6})$$

$$\zeta = \ln(\Omega/J) \quad (\text{D.7})$$

$$\beta = \ln(\Omega/h). \quad (\text{D.8})$$

Der kritische Punkt, der die geordnete von der ungeordneten Phase<sup>7</sup> unterscheidet, liegt bei

$$\Delta_h = \Delta_J. \quad (\text{D.9})$$

Hier kommt die Dualität des Modells zum tragen.  
Die Variablentransformation

$$s_i^x = \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z \quad (\text{D.10})$$

$$s_i^z = \prod_{j \leq i} \sigma_j^x \quad (\text{D.11})$$

führt bei  $H = 0$  wieder zu einem Modell der Form (D.1), allerdings ist nun die Rolle von  $J$  und  $h$  vertauscht. Der kritische Punkt ist nun erreicht, wenn die Verteilungen für  $J$  und  $h$  identisch sind.

Die kritischen Verteilungen sind

$$\begin{aligned} P(\zeta, \Gamma) &\approx \frac{1}{\Gamma} e^{-\zeta/\Gamma} \\ R(\beta, \Gamma) &\approx \frac{1}{\Gamma} e^{-\beta/\Gamma}. \end{aligned} \quad (\text{D.12})$$

Diese Dualität ist eine der Eigenschaften des Systems, die die analytische Behandlung stark vereinfacht. Wie man sieht, werden die Verteilungen (D.12) immer breiter je mehr  $\Gamma$  anwächst.

Nun zu den Ergebnissen von [40]: Die longitudinale Magnetisierung ( $T = 0$ ) skaliert wie

---

<sup>7</sup>Die beiden Phasen selbst können noch in eine schwach (un)geordnete und stark (un)geordnete Phase unterteilt werden.

## D Eindimensionale Systeme

$$m(\delta, H) \approx \bar{\mu} (\ln(D/H))^{\phi-2} M \left[ \delta \ln \left( \frac{D}{H} \right) \right]. \quad (\text{D.13})$$

$H$  ist das externe Magnetfeld,  $\bar{\mu}$  und  $D$  sind nichtuniverselle Konstanten und  $M$  ist eine universale Skalenfunktion

$$M(x) = \frac{x^2 \alpha}{\sinh^2(x)} + \frac{e^{-x}}{\sinh(x)} \left( \phi x \alpha + x^2 \frac{d\alpha}{dx} \right) \quad (\text{D.14})$$

mit  $\alpha \propto |x|^{-\phi} Q_{\phi-1}(\coth(x))$ , wobei  $Q_{\phi-1}$  ein Legendre Polynom ist [40].  
Am kritischen Punkt vereinfacht sich (D.13) zu

$$m(\delta = 0, H) \sim \frac{1}{|\ln H|^{2-\phi}}. \quad (\text{D.15})$$

In der geordneten Phase ( $\delta > 0$ ) skaliert die spontane Magnetisierung wie  $(-\delta)^\beta$  mit  $\beta = 2 - \phi$ . In der ungeordneten Phase liegt eine Potenzgesetz-Singularität vor. Die mittlere Oberflächenmagnetisierung verschwindet für  $H = 0$  gemäß  $m_s \propto (-\delta)^{\beta_s}$  mit  $\beta_s = 1$  [81, 82].

Die *mittlere* Spin-Spin-Korrelationsfunktion (bezeichnet mit  $C_{av}$ , als Abkürzung für *average correlation*) zeigt am QPÜ ein Potenzverhalten

$$C_{av}(r) \sim \frac{1}{r^{2-\phi}}. \quad (\text{D.16})$$

Abseits des kritischen Bereichs fällt sie exponentiell ab, mit einer Korrelationslänge

$$\xi(\delta) \approx \frac{l_V}{\delta^\nu} \quad \text{mit } \nu = 2, \quad (\text{D.17})$$

wobei die Amplitude der Korrelationslänge durch

$$l_V = \frac{1}{\text{var}[h] + \text{var}[J]} \quad (\text{D.18})$$

gegeben ist.

Die mittlere Korrelationsfunktion wird von seltenen Spinpaaren dominiert, deren Korrelation in der Größenordnung 1 liegt. Deswegen betrachtet man noch eine *typische* Korrelationsfunktion, die am QPÜ

$$-\ln C(r) \sim \sqrt{r}. \quad (\text{D.19})$$

In der ungeordneten Phase hingegen ist  $-\ln C(r) \propto r$ , wobei der Proportionalitätsfaktor durch die typische Korrelationslänge  $\bar{\xi}$  gegeben ist

$$\bar{\xi}(\delta) \sim \frac{1}{\delta} = \frac{1}{\delta^1}. \quad (\text{D.20})$$

## D Eindimensionale Systeme

Wie man sieht, haben  $\xi$  und  $\bar{\xi}$  unterschiedliche Exponenten!

Am kritischen Punkt skaliert die charakteristische Längenskala wie  $l^z \sim \tau$  mit einem dynamischen Exponenten

$$z \sim \frac{1}{2\delta}, \quad (\text{D.21})$$

der am QPÜ divergiert.

Der singuläre Teil der longitudinalen Magnetisierung somit skaliert in der ungeordneten Phase wie  $m(H) \sim |H|^{\frac{1}{z}}$ .

Die Beziehung (D.21) ist das Ergebnis aus [39, 40] für die schwach geordnete und schwach ungeordnete GF und ergibt sich als Spezialfall von

$$z \sim \frac{1}{2|\Delta|} \quad (\text{D.22})$$

mit

$$|\Delta| = \delta + O(\delta^2). \quad (\text{D.23})$$

Die Beziehung (D.22) ist eine Erweiterung für die gesamte GF aus [60].

## D.2 Magnetisierung und Korrelationsfunktionen

In [39, 40] wird argumentiert, dass Informationen über die Spin-Spin-Korrelation aus der Analyse folgender Funktion gewonnen werden können

$$G(\beta, x, \Gamma) d\beta dx = dP[A]. \quad (\text{D.24})$$

$P[A]$  ist die Wahrscheinlichkeit für das Ereignis A, welches hier lautet:

*Auf der durch  $\Gamma$  gegebenen logarithmischen Energieskala gehört ein noch nicht dezimierter Spin zu einem Spincluster  $\beta$ , dessen rechtes Ende bei  $x=0$  liegt*

Zum direkten Vergleich wurde die Notation aus [40] übernommen, wo  $\beta$  für ein transversales Feld steht.

Im einfachsten Falle ( $x=0$ ) gilt

$$G(\beta, x, \Gamma) = n_\Gamma R(\beta; \Gamma), \quad (\text{D.25})$$

wobei  $n_\Gamma$  die Zahl der Cluster und  $R(\beta; \Gamma)$  die kritische Verteilung der Felder bei der Energie  $\Gamma$  ist. Die Dichte der spontanen Magnetisierung  $M_0$  ist dann

$$M_0 \propto \lim_{\Gamma \rightarrow \infty} \int d\beta \int dx G(\beta, x, \Gamma). \quad (\text{D.26})$$



## D Eindimensionale Systeme

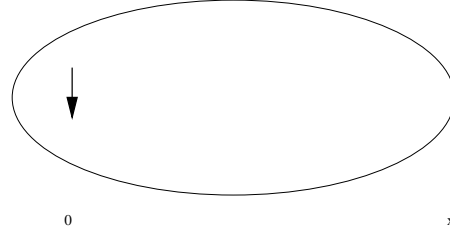


Abbildung D.1: Situation, die das Ereignis  $P[A]$  definiert. Ein Spin am Ort  $x=0$  ist aktiv in einem Cluster, der bei  $x$  endet auf der Energieskala  $\Gamma$ . Skizze nach [40] Seite 51.

Interessanter als  $M_0$  ist die *mittlere Korrelationsfunktion*

$$\overline{C}(x) = \overline{\langle \sigma_j^z \sigma_{j+x}^z \rangle}, \quad (\text{D.27})$$

die man mittels der Funktion

$$k(x, \Gamma) d\Gamma = P[B] \quad (\text{D.28})$$

wie folgt ausdrücken kann

$$\overline{C}(x) \propto \int_0^\infty k(x, \Gamma) d\Gamma. \quad (\text{D.29})$$

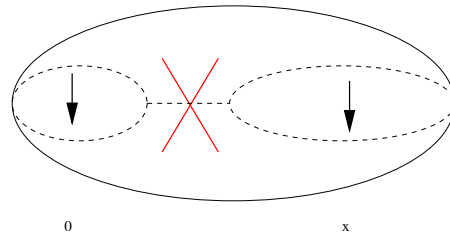


Abbildung D.2: Dezimierung einer Bindung (bzw. Hüpfmatrixelement für die fermionische Kette im Modell (2.1) beim Übergang von  $\Gamma$  nach  $\Gamma + d\Gamma$ , was zur Bildung eines neuen Spinclusters (geschlossene Linie) führt. Die Wahrscheinlichkeit für dieses Ereignis definiert die Funktion  $k(x, \Gamma)$ . Die aktiven Spins in den Clustern (gestrichelte Ovale) bei der Energie  $\Gamma$  sind durch schwarze Pfeile visualisiert. Skizze nach [40] Seite 52.

$P[B]$  ist die Wahrscheinlichkeit für das Ereignis B:

*Ein Spin am Ort  $x=0$  und am Ort  $x$  werden aktiv in ein und demselben Cluster beim Übergang von  $\Gamma$  nach  $\Gamma + d\Gamma$  (s. Abbildung D.2)*

## D Eindimensionale Systeme

Die beiden Funktionen  $k(x, \Gamma)$  und  $G(\beta, x, \Gamma)$  sind natürlich nicht unabhängig voneinander. Wenn man mit „ $\hat{\phantom{x}}$ “ die Laplace-Transformierte bezüglich  $x$  kennzeichnet, so gilt

$$\hat{k}(y) = \frac{1}{n_\Gamma} \hat{P}(0, y) [\hat{g}(y)]^2. \quad (\text{D.30})$$

Hierbei ist

$$\hat{g}(y) = \int_0^\infty d\beta \hat{G}(\beta, y) \quad (\text{D.31})$$

und  $\hat{P}(0, y)$  ist die Wahrscheinlichkeit, dass eine passende Bindung existiert, die die beiden Cluster links und rechts miteinander koppelt.

### D.3 Die fermionische Kette

Durch Spinoperatoren  $S_i^l = \sum_{m,n} a_{in}^\dagger \sigma_{nm}^l a_{im}$  ( $l = x, z$ ) kann das RTISM zu einer fermionischen Kette erweitert werden. Das fermionische Modell im großkanonischen Ensemble ist

$$\mathcal{H} = - \sum J_i S_i^z S_{i+1}^z - \sum h_i S_i^x - \mu n_i. \quad (\text{D.32})$$

Die Ladungsfluktuationen werden durch das chemische Potential  $\mu$  bestimmt, eine explizite Ladungsdynamik ist nicht im Modell enthalten.

Bei  $T = 0$  und  $\mu = 0$  weist das System dasselbe Phasendiagramm auf wie das RTISM und besitzt einen Quantenphasenübergang (QPÜ) bei  $\delta = 0$ .

Allerdings gibt es signifikante Unterschiede zur nichtfermionischen Kette.

Die Dualität von (D.1) wird durch Ladungsfluktuationen zerstört.

Desweiteren gibt es ein nichtuniverselles Verhalten. Während für das RTISM die Resultate unabhängig von den ursprünglichen Verteilungen waren, sind die Skalenfunktionen der fermionischen Kette Funktionen der Anfangsverteilungen  $P_J^{Anfang}(J) dJ$  und  $P_h^{Anfang}(h) dh$ .

## E Norm von $Q(\rho, \Gamma)$

Die Transformation von  $(V, \Omega_I)$  auf  $(\rho, \Gamma)$  ist durch

$$\rho = \frac{V}{\Omega} = \frac{V}{\Omega_I} \frac{\Omega_I}{\Omega} = \frac{V}{\Omega_I} e^\Gamma \quad (\text{E.1})$$

also

$$\rho(\Gamma) = \frac{V}{\Omega_I} e^\Gamma = \rho(0) e^\Gamma \quad (\text{E.2})$$

gegeben. Die Ausgangsverteilung bei  $\Omega = \Omega_I$  wird durch eine Tilde gekennzeichnet

$$Q(\rho, 0) = \tilde{Q}(\rho, \Gamma). \quad (\text{E.3})$$

Beim Übergang von  $\Gamma$  nach  $\Gamma + d\Gamma$  verändert sich das Argument (E.2) entsprechend<sup>1</sup>

$$Q(\rho, 0) = N_\Gamma \tilde{Q}(\rho e^\Gamma), \quad (\text{E.4})$$

wobei ein  $\Gamma$  abhängiger Faktor für die Normierung

$$\int_0^1 Q(\rho, 0) d\rho = 1 \quad (\text{E.5})$$

sorgt. Der Faktor  $N_\Gamma$  bestimmt sich aus<sup>2</sup>

$$N_\Gamma \int_0^1 \tilde{Q}(\rho e^\Gamma) d\rho = N_\Gamma e^\Gamma \int_0^{e^{-\Gamma}} \tilde{Q}(x) dx \stackrel{!}{=} 1. \quad (\text{E.6})$$

Die normierte Verteilung ist somit

$$Q(\rho, \Gamma) = \frac{\tilde{Q}(\rho e^\Gamma)}{e^\Gamma \int_0^{e^{-\Gamma}} \tilde{Q}(x) dx}. \quad (\text{E.7})$$

Bei einer gegebenen Verteilung der  $V$ s kann somit direkt  $Q(\rho, \Gamma)$  bestimmt werden.

Bisher verlief alles analog zu der Herleitung von  $P(\alpha, \Gamma)$  im Abschnitt 4.2.

Allerdings gilt nicht einfach  $\frac{dQ}{d\Gamma} = Q_+ Q$ . Um dies zu sehen wird der Ausdruck (E.7) nach  $\Gamma$  total differenziert

---

<sup>1</sup>Also  $\rho(\Gamma + d\Gamma) = \rho + d\rho$ .

<sup>2</sup>Es genügt den Fall  $\rho \in [0, 1]$  zu betrachten. Damit gilt  $Q_- = 0$ .

*E Norm von  $Q(\rho, \Gamma)$*

$$\frac{dQ}{d\Gamma} = \frac{\partial Q}{\partial \Gamma} + \frac{\partial Q}{\partial \rho} \frac{\partial \rho}{\partial \Gamma} \quad (\text{E.8})$$

$$= \frac{\partial Q}{\partial \Gamma} + \rho \frac{\partial Q}{\partial \rho} \quad (\text{E.9})$$

$$= \frac{\tilde{Q}'(x) [-\rho e^\Gamma]}{e^\Gamma \int_0^{e^{-\Gamma}} \tilde{Q}(x) dx} \quad (\text{Zähler nach } \Gamma \text{ differenziert})$$

$$(\text{E.10})$$

$$- \frac{\tilde{Q}(\rho e^\Gamma) [e^\Gamma \int_0^{e^{-\Gamma}} \tilde{Q}(x) dx + e^\Gamma (-e^{-\Gamma}) \tilde{Q}(e^{-\Gamma})]}{[e^\Gamma \int_0^{e^{-\Gamma}} \tilde{Q}(x) dx]^2} \quad (\text{Nenner nach } \Gamma \text{ differenziert})$$

$$(\text{E.11})$$

$$+ \rho \frac{e^{-\Gamma} \tilde{Q}'(x)}{e^\Gamma \int_0^{e^{-\Gamma}} \tilde{Q}(x) dx} \quad (\text{Ableitung nach } \rho)$$

$$(\text{E.12})$$

$$= - \frac{\tilde{Q}(\rho e^\Gamma)}{e^\Gamma \int_0^{e^{-\Gamma}} \tilde{Q}(x) dx} + \frac{\tilde{Q}(e^\Gamma)}{e^\Gamma \int_0^{e^{-\Gamma}} \tilde{Q}(x) dx} \frac{\tilde{Q}(\rho e^\Gamma)}{e^\Gamma \int_0^{e^{-\Gamma}} \tilde{Q}(x) dx} \quad (\text{E.13})$$

$$= - Q(\rho, \Gamma) + Q(\rho = 1, \Gamma) Q(\rho, \Gamma) \quad (\text{E.14})$$

$$= (Q_+ - 1) Q(\rho, \Gamma). \quad (\text{E.15})$$

Bei einer um  $\rho = 0$  symmetrischen Verteilung ergibt die analoge Rechnung ( $Q_+ = Q_-$ )

$$\frac{dQ}{d\Gamma} = (2 Q_+ - 1) Q(\rho, \Gamma). \quad (\text{E.16})$$

# Abkürzungen

**DMS** *diluted magnetic semiconductors* Verdünnte magnetische Halbleiter. Verdünnt in dem Sinne, daß nur wenige Atome ein zum Magnetismus beitragendes Moment besitzen.

**FG** Flussgleichungen

**GS** Griffiths-Singularität

**LP** Laplace-Transformation

**PF** Pfadintegral

**QPÜ** Quantenphasenübergang

**RG** Renormierungsgruppe

**ORG** Ortsraum-Renormalisierungsgruppe im Text meist nur mit RG abgekürzt.

**RTISM** *random transverse Ising Spin model*

**WW** Wechselwirkung

Die numerischen Resultate in den Kapitel 4 und in Kapitel 5 sowie die 2d und 3d Plots/Grafiken in dieser Dissertation wurden mit maple Version 8 und 9.5 unter Suse Linux 8.2 erstellt und mit Mathematica 5.0 gegengeprüft.

Die Orthographie orientiert sich an den Empfehlungen der neuen deutschen Rechtschreibung.

Diese Dissertation wurde erstellt mit Hilfe von L<sup>A</sup>T<sub>E</sub>X Vers. 3.14159 Copyright (C) 1997-2003 D.E. Knuth.

# Literaturverzeichnis

- [1] Abramowitz, M. and Stegun, I. A. (Eds.). Laplace Transforms.Ch. 29 in Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables, 9th printing. New York: Dover, pp. 1019-1030, 1972.
- [2] C.D. Batista, J.Erols,M. Avignon and B.Alascio *Phys. Rev. B* **58** No22 (1998)
- [3] L.I. Glazman and R.C. Ashoori *Science* **304** 524 (2004)
- [4] J. Florencio and F.C. Sa Barreto *Phys. Rev. B* **60** No13 (1999)
- [5] S.Sykora, A, Hüsch and K.W. Becker *cond mat* 0505687 (2005)
- [6] Vladimir L. Safonov and Neal Bertram *cond mat* 0505259 (2005)
- [7] Xin Wan and R.N. Bhatt *cond mat* 0009161 (2000)
- [8] Monica Berciu and R.N. Bhatt *Phys. Rev. Lett.* **87** No10 (2001)
- [9] S.S. Rao, K.N. Anuradha, S.S. Sarangi ans S.V. Bhatt *cond mat* 0504550 (2005)
- [10] Somendra M. Bhattacharjee *cond mat* 0505283 (2005)
- [11] Hannes Raebiger, Andres Ayuela and J. von Boehm *cond mat* 0504172 (2005)
- [12] M. Peyrard and A. R. Bishop *Phys. Rev. Lett.* **62** p2755 (1989)
- [13] Bournel, A. and Dollfus, P. and Bruno, P. and Hesto, P.*Europ. Phys. J. Appl. Phys.* **4** p1-4 (1998)
- [14] G.Bouzerar, J. Kudrnovský and P.Bruno *Phys. Rev. B* **68** 205311 (2003)
- [15] Martin Guthold, Xingshu Zhu, Claudio Rivetti, Guoliang Yang, Neil H. Thomson, Sandor Kasas, Helen G. Hansma, Bettye Smith, Paul K. Hansma and Carlos Bustamante *Biophys. J.* **77** p. 2284-2294, No. 4 (1999)
- [16] P. Gambardelle, A. Dallmeyer, K. Maiti, M.C. Malagoli, W. Eberhardt. K. Kern and C. Carbone *nature* **416** 301 (2002)
- [17] John Cardy *Scaling and Renormalization in Statistical Physics* Cambridge University Press (1996)

*Literaturverzeichnis*

- [18] A.L. Chudnovskiy *Phys. Rev. B* **58** No6 (1998)
- [19] A.L. Chudnovskiy *cond mat* 9807248 (1998)
- [20] A.L. Chudnovskiy *cond mat* 0108396 (2001)
- [21] A.L. Chudnovskiy and D.Pfannkuche *Phys. Rev. B* **65** 165216 (2001)
- [22] P. Coleman *Local moment physics in heavy electron systems cond mat* 0206003 (2002)
- [23] N. J. Craig *et al. Science* **304**, 565 (2004)
- [24] G. Alvarez, M. Mayr and E. Dagotto *Phys. Rev. Lett* **89** No 27 (2002)
- [25] Matthias Mayr, Gonzalo Alvarez and Elbio Dagotto *Phys. Rev. B* **65** 241202(R) (2002)
- [26] Gregory A. Fiete, Gergely Zarànd and Kedar Damle *Phys. Rev. Lett* **91** No 9 (2003)
- [27] S. Datta and B. Das *Appl. Phys. Lett.* **56** p665 (1990)
- [28] Bertrand Delamotte *cond mat* 0212049 (2002)
- [29] Eugene Kogan, Mark Auslender and Eran Dgani *cond mat* 0206018 (2002)
- [30] Thomas Vojta and Mark Dickison *cond mat* 0505354 (2005)
- [31] Tomasz Dietl *Science* **287** p1019 (2000)
- [32] Tomasz Dietl *cond mat* 0201282 (2002)
- [33] Vik. S. Dotsenko *cond mat* 0505233 (2005)
- [34] N.A. Mortensen and J.C. Egues *Phys. Rev. B.* **66** 153306 (2002)
- [35] L Krusin-Elbaum *et al. Nature***431** p672-676 (2004)
- [36] Nitta, J. and Akazaki, T. and Takayanagi, H. and Enoki, T. *Phys. Rev. Lett.* **78** p1335-1338 (1997)
- [37] Tilman Enss *cond mat* 0504703 (2005)
- [38] Matteo Rizzi, Davide Rossini, Gabriele Chiara, Simone Montangero and Rosario Fazio *cond mat* 0506098 (2005)
- [39] Daniel S. Fisher *Phys. Rev. Lett.* **69** No3 (1992)
- [40] Daniel S. Fisher *Phys. Rev. B* **51** No10 (1995)
- [41] Daniel S. Fisher and A.P. Young *Phys. Rev. B* **58** 9131 (1998)

*Literaturverzeichnis*

- [42] O.Mutrunich,S.Mau and D.A. Huse and Daniel S. Fisher *Phys. Rev. B* **61** No2 (1999)
- [43] C. Rüster, T. Borzenko, C. Gould, G. Schmidt and L.W. Molenkamp; X. Liu, T.J. Wojtowicz and J.K. Furdyna and Z.G. Yu and M.E. Flatte *Phys. Rev. Lett.* **91** No21, 216602 (2003)
- [44] K.W. Edmonds, K.Y. Wang, R.P. Campion, A.C. Neumann, N.R.S. Farley, B.L. Gallagher, and C.T. Foxon *Appl. Phys. Lett.* **81** 4991 (2002)
- [45] K.M. Yu and W. Walukiewicz, T. Wojtowicz, I. Kuryliszyn, X.Liu, Y.Sasaki and J.K. Furdyna *Phys. Rev. B* **65** 201303(R) (2003)
- [46] Yukitoshi Motome and Nobuo Furukawa *cond mat* 0203041 (2002)
- [47] T.Jungwirth,K.Y. Wang,J.Masek,K.W. Edmonds, Jürgen König, Jairo Sinova, M. Plini, N.A. Goncharuk, A.H. MacDonald, M.Sawicki, R.P. Campion, L.X. Zhao, C.T. Foxon and B.L. Gallagher *cond mat* 0505215 (2005)
- [48] P.G. deGennes *Solid State. Comm.* **1** 132 (1963)
- [49] George I. Mias and S. M. Girvin *cond mat* 0505002 (2005)
- [50] Nigel Goldenfield *Lectures on Phase Transitions and the Renormalization Group* Addison Wesley, 1995
- [51] Alexander O. Gorolov *cond mat* 0504559 (2005)
- [52] <http://www.tphys.uni-heidelberg.de/wegner/grassmann.ps>
- [53] R.B. Griffiths *Phys. Rev. Lett.* **23** 17 (1969)
- [54] I.P. McCulloch, A. juozapavicius, A.Rosengarten and M. Gulacsi *Phil. Mag. Lett* **81** p869 (2001)
- [55] *The Kondo Problem to Heavy Fermions* Cambridge University Press, Cambridge (1993)
- [56] Stefano Sanvito and Nicola A. Hill *J. Magn. Magn. Matr.* **242-245** 441 (2002)
- [57] T. Holstein and H. Primakoff *Phys. Rev.* **58** 1098 (1940)
- [58] S.Sonoda, S. Shimizu, Y. Yamamoto and H.Hori *cond mat* 0108159 (2001)
- [59] Heiko Rieger and Ference Iglò *Phys. Rev. Lett.* **83** No18 (1999)
- [60] Ference Iglò *cond mat* 0108350 (2001)
- [61] D. Karevski, Y.-C. Lin, H. Rieger, N. Kawashima and F. Iglò *cond mat* 0009144 (2001)



*Literaturverzeichnis*

- [62] k.Hirakawa and S.Katsumoto, T. Hayashi, Y.Hashimoto and Y.Iye *Phys. Rev. B* **65** 193312 (2002)
- [63] Mona Berciu, Tatiana G. Rappoport and Boldizsar Janko *cond mat* 0505141 (2005)
- [64] P. Redlinski, G. Zarand and B. Janko *cond mat* 0505038 (2005)
- [65] L.P. Kadanoff *Physics* **2** 263 (1966)
- [66] M. Kobayashi, Y. Ishida, J.I. Hwang, T. Mizokawa, A. Fujimori, K. Mamiya, J. Okamoto, Y. Takeda, T. Okane, Y. Saitho, Y. Muramatsu, A. Tanaka, H. Saeki, H. Tabata and T. Kawai *cond mat* 0505387 (2005)
- [67] Galazka, R. R., Shoichi Nagata und P. H. Keesom *Phys. Rev. B* **22** 3344 (1980)
- [68] T. Brandes, S.Kettelman *Anderson Localization and Its Ramifications*, Springer 2003
- [69] Steffan Kettelman Habilitationsschrift <http://www.physnet.uni-hamburg.de/hp/kettemann/hab2.ps>
- [70] Hagen Kleinert *Pfadintegrale in Quantenmechanik, Statistik und Polymerphysik* Wissenschaftsverlag, Mannheim (1993)
- [71] Oleg Derzhako and Taras Krokhmalkii *cond mat* 0505642 (2005) und Oleg Derzhako, Taras Krokhmalkii *cond mat* 0506121 (2005)
- [72] Masao Takahashi and Kenn Kubo *Phys. Rev. B* **66** 153202 (2002)
- [73] Qiu-Yan Li, Zheng-Wei Xie and Lu Li, Z.D. Li and J.Q. Liang *cond mat* 0506104 (2005)
- [74] Yu Huang, Xiangfeng Duan, Qingqiao Wei and Charles M. Lieber *Science* **291**, Issue 5504, 630-633 , 26 January 2001
- [75] B.S. Sørensen, J. Sadowski, R.Mathieu, P. Svedlindh and P.E. Lindelof *cond mat* 0212399 (2002)
- [76] J.C.Egues ,G.Burkard and D.Loss *cond-mat* 0209682 (2002)
- [77] Sanjeev Kumar and Pinaki Majumdar *cond mat* 0504656 (2005)
- [78] Gerald D. Mahan *Many-Particle Physics* Plenum Press,New York (1986)
- [79] K. Kärkkäinen, M. Koskien, S.M. Reiman and M. Manninen *cond mat* 0505036 (2005)
- [80] F.Màca and J. Mašek *Phys. Rev. B* **65** 235209 (2002)
- [81] B.M. McCoy and T.T. Wu *Phys. Rev.* **176** 631 (1968)

*Literaturverzeichnis*

- [82] B.M. McCoy *Phys. Rev. Lett.* **23** 383 (1969)
- [83] J. König, J. Schliemann, T. Fungwirth and Allan H. MacDonald *cond mat* 0111314 (2001)
- [84] J. Schliemann, J. König and A.H. MacDonald *Phys. Rev. B* **64** 165201 (2001)
- [85] A. H. MacDonald, P. Schiffer, and N. Samarth *cond mat* 0503185 (2005)
- [86] A. H. MacDonald, P. Schiffer, and N. Samarth <http://www.nature.com/cgi-taf/DynaPage.taf?file=/nmat/journal/v4/n3/full/nmat1325.html>
- [87] M. Csontos, T. Wojtowicz, X.Liu, M.Dobrowolska, B. Janko, J.K. Furdyna and G. Mihaly *cond mat* 0505582 (2005)
- [88] John W. Negele/Henri, Orland *Quantum Many-Particle Systems*, Perseus Publishing Cambridge, Massachusetts, 1998
- [89] R.Schiller, W.Müller and W. Nolting *Eur. Phys. J.B.* **2** p249 (1998)
- [90] H. Ohno et al. *Appl. Phys. Lett* **69** p363 (2005)
- [91] H. Ohno *Science* **281** p951 (1998)
- [92] H. Ohno and F Matsukura *J. Magn. Magn. Matr.* **117** 179 (1999)
- [93] H. Ohno *J. Magn. Magn. Matr.* **200** 110 (1999)
- [94] Antonio J.R. da Silva, A. Fazzio, Raimundo R. dos Santos and Luiz E. Oliveira *cond mat* 0505500 (2005)
- [95] C.Timm, F. Schäfer and F. von Oppen *cond mat* 0201411 (2002)
- [96] Carsten Timm and Felix von Oppen *cond mat* 0209055 (2002) und *Phys. Rev. Lett.* **89** No13 (2002)
- [97] Oppenheim, A. V.; Willsky, A. S.; and Nawab, S. H. *Signals and Systems*, 2nd ed. Upper Saddle River, NJ: Prentice-Hall, 1997.
- [98] O.Veits,R. Oppermann, M. Binderberger, J. Stein *J. Phys I(France)* **4** p493 (1994)
- [99] M.N. Kiselev and R. Oppermann *cond mat* 0008060 (2000)
- [100] S.Curilef, L.A. del Pino and P. Orellana *cond mat* 0506033 (2005)
- [101] Fiederling, R. and Keim, M. and Reuscher, G. and Ossau, W. and Schmidt, G. and Waag, A. and Molenkamp, L.W. *nature* **402** p787-790 (1999)
- [102] Ostriches are the largest living birds in the world. Native to Africa, ostriches are flightless, a characteristic they share with the emu, rhea and cassowary. aus <http://www.ext.nodak.edu/extpubs/alt-ag/ostrich.htm>

*Literaturverzeichnis*

- [103] G. Bouzerar and T.P. Pareek *Phys. Rev. B* **65** 153203 (2002)
- [104] Herleitung und Diskussion des Pfadintegrals findet man nicht nur in zahllosen Büchern sondern auch im Internet wie <http://www.tcm.phy.cam.ac.uk/bds10/tp3/pi.ps>
- [105] V.N. Popov and S.A. Fedotov *Sov. Phys. JETP* **67** 535 (1988)
- [106] David Lancaster and Felix Ritort *J. Phys. A* **30** No4 L41 (1996)
- [107] J.L. Xu and M. van Schilfhaarde and G.D. Samolyuk *Phys. Rev. Lett* **94** 097201 (2005)
- [108] M. Wierzbowska, D. Sanchez-Portal and S. Sanvito *Phys. Rev. B* **70** 235209 (2004)
- [109] A. Kaminski and S Das Sarma *Phys. Rev. Lett.* **88** No24 (2002)
- [110] S.J. Potashnik, K.C. Ku, R. Mahendrian, S.H. Chun, R.F. Wang, N. Samarth and P. Schiffer *Phys. Rev. B* **66** 012408 (2002)
- [111] *nature* Erik Winfree, Furong Liu, Lisa A. Wenzler and Nadrian C. Seeman **394** (1998)
- [112] John Schliemann *cond mat* 0209675 (2002), *Phys. Rev. B* **67** 040202 (2002)
- [113] A.Efrat and M.Schwartz *cond mat* 0212602 (2003)
- [114] Bikas K. Chakrabarti, Amit Dutta, Parongama Sen *Quantum Ising Phases and Transitions in Transverse Ising Models Lecture Notes in Physics m41* Springer (1996)
- [115] einen guten Überblick über Spingläser findet man beispielsweise bei K. Binder and A.P.Young *Rec. Mod. Phys* **58** 801 (1986)
- [116] *Spin Glass Theory and Beyond* by M Mezard (Paris), G Parisi and M Virasoro (Roma) World Scientific Lecture Notes in Physics - Vol. 9 (1987)
- [117] S. Havlin, L.A.N. Amaral, S.V. Buldyrew, S.T. Harrington and H.E. Stanley *Phys. Rev. Lett* **74** No21 p4205 (1994)
- [118] F.Matsukura, H.Ohno and Y.Sugawara *Phys. Rev. B* **57** No4 (1998)
- [119] V. Stanciu and P. Svendlindh *cond mat* 0505278 (2005)
- [120] Munhesia Matsumoto and Hajime Takayama *cond mat* 0505414 (2005)
- [121] Alexander Altland, Alex Kamenev and Chushun Tian *cond mat* 0505328 (2005)
- [122] Carsten Timm *J. Phys. Condens. Matter* **15** R1865 (2003)
- [123] L.Sheng, H.Y.Teng and C.S. Ting *Phys. Rev. B* **58** No13 (1998)

*Literaturverzeichnis*

- [124] H. Zhao, S. Mazumdar, C.-X. Sheng and Z. V. Vardeny *cond mat* 0506097 (2005)
- [125] Thomas Vojta *cond mat* 9910514 (1999)
- [126] Matthias Vojta *cond mat* 0412208 (2004)
- [127] R.N. Bhatt, Mona Berciu, Malcom P. kennet and Xin Wan *J. of Supercond.* Vol. 15, No1 (2002)
- [128] *Quantum dissipative systems* 2end. ed. (Worls Scientific, Singapore, 1999)
- [129] Kenneth G. Wilson *Phys. Rev. B* 4 No9, p3174 (1971)
- [130] Kenneth G. Wilson *Rev. Mod. Phys.* **55**, p583-600 (1983)
- [131] K.G. Wilson and J. Kogut *Phy. Rep.* C12, 75 (1993)
- [132] N. Theodoropoulou and A.F. Hebard, M.E. Overberg , C.R. Abernathy and S.J. Pearton, S.N.G. Chu and R.G. Wilson *Phys. Rev. Lett* **89** No10 (2002)
- [133] Y. Xia, P. Yang, Y. Sun, Y. Wu, B. Mayers, B. Gates, Y. Yin, F. Kim and H. Yan sl *Advanced Materials* **15** p353 (2003)
- [134] A.P. Young and H. Rieger *cond mat* 9510027 (1995)
- [135] A.P. Young and H. Rieger *Phys. Rev. B* **54** No5, 3328 (1996)
- [136] Antonia N. Fedora and Michael G. Zeitlin *cond mat* 0505114 (2005)
- [137] C. Zener *Phys. Rev.* **81** 440 (1950)
- [138] C. Zener *Phys. Rev.* **83** 299 (1950)
- [139] Houjin Huang, Shihe Yang and Xixiang Zhang *J. Phy. Chem. B.* **2000** p.1473-1482 (2000)
- [140] Priy Mahadevan and Alex Zunger *Phys. Rev. Lett.* **68** 075202 (2003)
- [141] A.J. Leggett, S. Chakravarty, A.T. Dorsey, M.P.A. Fisher, A. Garg and W. Zwerger *Rev. Mod. Phys.* **59** 1 (1987)
- [142] Private Korrespondenz mit Dirk Obergfell (email: D.Obergfell@fkf.mpg.de) am *Max Planck Institute for Solid State Research*, Stuttgart

# Lebenslauf

- Geboren am 16.08.1974 in Rheinfeldern (Baden), Deutschland
- 1981-1994 Besuch des Scheffel-Gymnasiums in Bad Säckingen
- 1995-1997 Zivildienst als Pflegekraft im Kreiskrankenhaus Bad Säckingen
- 1997-1998 Angestellter bei der Firma Franke Küchen GmbH
- 1998-2001 Studium der Physik im physikalischen Institut der Albert Ludwigs Universität, Freiburg
- 2001-2002 Diplomarbeit über *Photodreifach-Ionisation von Lithium* in der Abteilung „Theoretische Quantendynamik“ unter Prof. Hubert Klar.
- 2002-2005 Doktorarbeit am 1. Institut für theoretische Physik in der Gruppe Daniela Pfankuche, Hamburg

# Danksagung

Falls diese Zeilen jemals das Licht der Öffentlichkeit erblicken sollen, ist dies bei weitem nicht allein mein Verdienst sondern auch der Hilfe zahlreicher liebenswerter Menschen, die mir im Laufe der Doktorarbeit mit Rat, Trost und Hilfe zur Seite standen.

Mein Umzug nach Hamburg geschah etwas plötzlich und es war nicht klar, ob ich eine Anstellung als Doktorand erhalten würde.

Mein erster Dank geht somit ganz klar an Prof. Daniela Pfannkuche, die mich nicht nur ohne zu zögern in Ihre feine Gruppe aufnahm, sondern in Zeiten leerer Kassen und harschen Haushaltskürzungen sogar eine Verlängerung meines Arbeitsvertrags durchboxen konnte.

Mein zweites Dankeschön geht an meinen Betreuer Alex Chudnovskiy, der mir vieles beibrachte, mich all die Jahre anspornte und mich dorthin brachte, wo ich heute stehe. Aus der Riege der Professoren möchte ich des weiteren insbesondere noch Herrn Prof. K.Scharnberg und Prof. H.Heyszenau danken, deren Ruhe und ansteckend gute Laune auch durch die Lärmkulisse der unendlichen Bauarbeiten nicht beeinträchtigt werden konnte.

Von meinen Kollegen und KollegInnen, Diplomaten, Hiwis und HiwiInnen aus der Arbeitsgruppe gilt mein Dank an vorderster Stelle Karel Vyborny und Frank Hellmut, die meinen bockigen Computer immer wieder zum Laufen brachten. Insbesondere Frank hat sich zahllose Stunden mit flimmernden Monitoren, eigenwilligen CDs und Amok laufenden SuSE-Installationen herumschlagen müssen (Danke Jungs, ohne Eure Computerkenntnisse hätte ich dies mit einer Schreibmaschine tippen müssen).

Ein weiteres tiefes Danke geht an meine Eltern, meine Tante Renate, meinen Onkel Peter und dessen bessere Hälfte Helga für Liebe und Unterstützung.

Und dann ist da natürlich noch Gabriele. Ich liebe Dich, ohne Dich hätte dies alles keinen Sinn...

# Selbständigkeitserklärung

Hiermit erkläre ich, dass ich die vorliegende Dissertation selbständig angefertigt und alle benutzten Quellen und Hilfsmittel vollständig angegeben habe. Die Arbeit wurde bisher noch nicht anderweitig als Dissertation eingereicht oder veröffentlicht.

Andreas Rothe  
Juli 2005  
Hamburg