

Anhang

Anhang A

DMRG-Daten

A.1 Daten zum Heisenberg-Modell für $\Delta \leq 1$

Tabelle A.1: Grundzustandsenergien pro Spin im Heisenberg-Modell, $m = 64$.

$m = 64$				
L	$\Delta = 0$ (num.)	$\Delta = 0$ (exakt)	$\Delta = \frac{1}{2}\sqrt{2}$	$\Delta = 1$
4	-0.2795084972	-0.2795084971	-0.3653466293	-0.4040063509
10	-0.3013337092	-0.3013337091	-0.3856502253	-0.4258035207
20	-0.3095372500	-0.3095372499	-0.3934169557	-0.4341236667
40	-0.3138474636	-0.3138474638	-0.3975418595	-0.4385368321
60	-0.3153174832	-0.3153174853	-0.3989574153	-0.4400502496
80	-0.3160589548	-0.3160589612	-0.3996733481	-0.4408154550
100	-0.3165059324	-0.3165059457	-0.4001056007	-0.4412773825
140	-0.3170186965	-0.3170187309	-0.4006021250	-0.4418079260
180	-0.3173044517	-0.3173045144	-0.4008791439	-0.4421038929

Tabelle A.2: Grundzustandsenergien pro Spin im Heisenberg-Modell, $m = 128$.

$m = 128$				
L	$\Delta = 0$ (num.)	$\Delta = 0$ (exakt)	$\Delta = \frac{1}{2}\sqrt{2}$	$\Delta = 1$
4	-0.2795084972	-0.2795084971	-0.3653466293	-0.4040063509
10	-0.3013337092	-0.3013337091	-0.3856502253	-0.4258035207
20	-0.3095372500	-0.3095372499	-0.3934169557	-0.4341236667
40	-0.3138474639	-0.3138474638	-0.3975418599	-0.4385368325
60	-0.3153174853	-0.3153174853	-0.3989574175	-0.4400502524
80	-0.3160589611	-0.3160589612	-0.3996733541	-0.4408154631
100	-0.3165059456	-0.3165059457	-0.4001056126	-0.4412773987
140	-0.3170187303	-0.3170187309	-0.4006021562	-0.4418079652
180	-0.3173045130	-0.3173045144	-0.4008792028	-0.4421039639
236	-0.3175423501	-0.3175423531	-0.4011099480	-0.4423504776
∞	-0.3183098862	-0.3183098862	-	-0.4431471806

Tabelle A.3: End-zu-End-Korrelationsfunktion $|\langle S_1^x S_L^x \rangle|$ im Heisenberg-Modell, $m = 128$.

$m = 128$				
L	$\Delta = 0$ (num.)	$\Delta = 0$ (exakt)	$\Delta = \frac{1}{2}\sqrt{2}$	$\Delta = 1$
4	0.1118033988	0.1118033988	0.0898160927	0.0833333333
10	0.0464140253	0.0464140253	0.0272824518	0.0225022820
20	0.0239439920	0.0239439920	0.0107924964	0.0079868384
40	0.0122119789	0.0122130660	0.0041233987	0.0026905380
60	0.0081972493	0.0082021625	0.0023157764	0.0013928496
80	0.0061643728	0.0061751623	0.0015286022	0.0008649100
100	0.0049334841	0.0049516929	0.0011033302	0.0005941235
140	0.0035116424	0.0035465394	0.0006695407	0.0003331400
180	0.0027110119	0.0027626390	0.0004573319	0.0002136748
236	0.0020366396	0.0021097973	0.0002997344	0.0001303788

Tabelle A.4: Rand-zu-Volumen-Korrelationsfunktion $|\langle S_1^x S_r^x \rangle|$ im Heisenberg-Modell, $m = 64$ und $L = 300$.

$m = 64$			
r	$\Delta = 0$	$\Delta = \frac{1}{2}\sqrt{2}$	$\Delta = 1$
2	0.2122382451	0.2190676146	0.2172193080
6	0.0710993694	0.0488351912	0.0414303923
10	0.0471588137	0.0270250320	0.0211342122
20	0.0275262704	0.0123150818	0.0085291839
30	0.0201465070	0.0077809440	0.0049908539
40	0.0161322030	0.0056053035	0.0033984025
50	0.0135604113	0.0043371844	0.0025131385
70	0.0103953294	0.0029296336	0.0015800992
90	0.0084826266	0.0021709864	0.0011080279
120	0.0066710238	0.0015246451	0.0007293998
150	0.0054901837	0.0011448477	0.0005198393

A.2 Daten zum Heisenberg-Modell für $\Delta > 1$

Tabelle A.5: Grundzustandsenergien pro Spin im Heisenberg-Modell für verschiedene $\Delta > 1$, $m = 64$.

$m = 64$				
L	$\Delta = 1.3$	$\Delta = 1.7$	$\Delta = 2.5$	$\Delta = 5.0$
4	-0.4312839933	-0.5022542959	-0.6227760384	-1.0355324536
10	-0.4548349882	-0.5328785048	-0.6726179253	-1.1802997457
16	-0.4615257628	-0.5418561845	-0.6887087811	-1.2244408759
20	-0.4638451436	-0.5450319165	-0.6946757603	-1.2394287999
28	-0.4665559051	-0.5488127275	-0.7019171642	-1.2565890504
40	-0.4686339520	-0.5517900134	-0.7075831760	
68	-0.4706697913	-0.5548195550	-0.7131053472	
100	-0.4716143074	-0.5562762217		

Tabelle A.6: End-zu-End-Korrelationsfunktion $|\langle S_1^z S_L^z \rangle|$ im Heisenberg-Modell für verschiedene $\Delta > 1$, $m = 64$. Der Grenzwert wurde aus (3.21) und (3.22) bestimmt.

$m = 64$				
L	$\Delta = 1.3$	$\Delta = 1.7$	$\Delta = 2.5$	$\Delta = 5.0$
4	0.0915123138	0.1116870328	0.1406387290	0.1970133307
10	0.0291029772	0.0533820659	0.1076428581	0.2085710227
16	0.0161952639	0.0407748689	0.1104837025	0.2116948272
20	0.0122512090	0.0371321504	0.1138304806	0.2119300723
28	0.0080460875	0.0338929480	0.1181702117	0.2119780816
40	0.0051630009	0.0329587421	0.1201649965	
68	0.0026912263	0.0347993450	0.1205545885	
100	0.0016864002	0.0363917767		
M_S^2	0.0025650843	0.0374330890	0.1205788535	0.2119794720

Tabelle A.7: Korrelationsprofil $\langle S_i^z S_{L/2}^z \rangle$ in einem Heisenberg-Modell von 100 Plätzen für verschiedene $\Delta > 1$, $m = 32$. Die Magnetisierung $M_B^2 = M_S$ wurde aus (3.21) und (3.22) bestimmt.

$m = 32$				
i	$\Delta = 1.3$	$\Delta = 1.5$	$\Delta = 1.7$	$\Delta = 2.0$
2	0.0303386417	0.0916478778	0.1962329419	0.3466317917
4	0.0414146966	0.1224307909	0.2554773553	0.4338793925
6	0.0492538378	0.1425182593	0.2902317079	0.4764225040
8	0.0556629578	0.1576471399	0.3133633715	0.5001936868
10	0.0612487378	0.1697514480	0.3299155721	0.5142910041
12	0.0663080597	0.1797673880	0.3421317097	0.5229170470
14	0.0710147516	0.1882344200	0.3513361677	0.5283048510
16	0.0754828278	0.1955021356	0.3583811691	0.5317186311
18	0.0798023620	0.2018351381	0.3638413430	0.5339052900
20	0.0840527920	0.2074985576	0.3681233807	0.5353186177
22	0.0883108050	0.2126541295	0.3715257272	0.5362400945
24	0.0926574950	0.2174274372	0.3742751618	0.5368475819
26	0.0971850092	0.2219589935	0.3765512674	0.5372561294
28	0.1020040150	0.2263875688	0.3785045265	0.5375430831
30	0.1072535001	0.2308652333	0.3802716439	0.5377629354
32	0.1131152983	0.2355709256	0.3819911218	0.5379603711
34	0.1198380594	0.2407311206	0.3838229338	0.5381883606
36	0.1277811265	0.2466567170	0.3859794581	0.5385201352
38	0.1375033781	0.2538182051	0.3887845842	0.5390846118
40	0.1499610096	0.2630176744	0.3928067233	0.5401446592
42	0.1669888092	0.2758215613	0.3992004635	0.5423111377
44	0.1925881657	0.2957423272	0.4106846233	0.5472189686
46	0.2370092394	0.3319099733	0.4347631360	0.5600313300
48	0.3410894134	0.4206207960	0.5025510462	0.6044929723
M_B^2	0.1012933230	0.2528451551	0.3869526539	0.5380560694

A.3 Daten zum nichthermiteschen XX -Modell

Tabelle A.8: Grundzustandsenergie pro Spin im nichthermiteschen XX -Modell für verschiedene Werte von h .

L	$m = 16$	$m = 32$	exakt
h=0			
4	-0.2795084971	-0.2795084971	-0.2795084971
10	-0.3013337091	-0.3013337091	-0.3013337091
20	-0.3095368534	-0.3095372491	-0.3095372499
30	-0.3123925710	-0.3123943316	-0.3123943435
40	-0.3138433922	-0.3138474220	-0.3138474638
h=0.1			
4	-0.2789482163	-0.2789482163	-0.2789482163
10	-0.3011188573	-0.3011188573	-0.3011188573
20	-0.3094283757	-0.3094306127	-0.3094306326
30	-0.3123180250	-0.3123232464	-0.3123233741
40	-0.3137866452	-0.3137939077	-0.3137942663
h=0.5			
4	-0.2646356813	-0.2646356813	-0.2646356813
10	-0.2956604155	-0.2956604155	-0.2956604155
20	-0.3067263955	-0.3067258152	-0.3067258143
30	-0.3105248970	-0.3105233477	-0.3105235195
40	-0.3124428791	-0.3124449718	-0.3124452962
h=0.8			
4	-0.2358495283	-0.2358495283	-0.2358495283
10	-0.2849276370	-0.2849276370	-0.2849276370
20	-0.3014577582	-0.3014437269	-0.3014437620
30	-0.3070480263	-0.3070143454	-0.3070148408
40	-0.3098605265	-0.3098158233	-0.3098174154

A.4 Daten zum q -symmetrischen Heisenberg-Modell

Tabelle A.9: Grundzustandsenergien pro Spin im q -symmetrischen Heisenberg-Modell für verschiedene Werte von r , $m = 128$ für $r = 3$ bis 7 und $m = 64$ für $r = \infty$. Die Grundzustandsenergien in der Tabelle sind ohne die Konstante $\frac{1}{2} \sum_{i=1}^{L-1} \left(\frac{q+q^{-1}}{2} \right)$ im Hamilton-Operator (5.1) angegeben. Der Parameter q ist durch $q = \exp(i\pi/r+1)$ gegeben.

L	r=3	r=4	r=5
4	-0.6604497504	-0.7106979341	-0.7393376252
10	-0.7443482698	-0.7804740657	-0.8012448364
20	-0.7736274980	-0.8054637489	-0.8237779981
30	-0.7835605950	-0.8140295993	-0.8315514220
40	-0.7885618957	-0.8183606853	-0.8354921842
50	-0.7915741125	-0.8209753342	-0.8378746912
60	-0.7935870982	-0.8227252460	-0.8394707437
70	-0.7950273407	-0.8239785686	-0.8406146256
80	-0.7961088422	-0.8249204304	-0.8414746652
	r=6	r=7	r= ∞
4	-0.7570697857	-0.7687664240	-0.8080127018
10	-0.8141726581	-0.8227289432	-0.8516070414
20	-0.8351831299	-0.8427349544	-0.8682473334
30	-0.8424617653	-0.8496856674	-0.8740903837
40	-0.8461580384	-0.8532195604	-0.8770736642
50	-0.8483948783	-0.8553595343	-0.8788844087
60	-0.8498942753	-0.8567946053	-0.8801004992
70	-0.8509693511	-0.8578238629	-0.8809736019
80	-0.8517779192	-0.8585981414	-0.8816309100

Tabelle A.10: Zwei-Punkt-Korrelationen $\langle g_{iL/2} \rangle$ für geradzahliges $L/2$ und verschiedene r . Für den Ising-Fall $r = 3$ sind zusätzlich die exakten Resultate angegeben. (Fortsetzung auf Seite 99)

i	$L = 100$			$L = 84$		$L = 76$
	$r = 3$	exakt	$r = 4$	$r = 5$	$r = 7$	$r = 6$
1	0.02184	0.01996	0.02128	0.02369	0.02221	0.02570
2	-0.00343	0.00000	-0.00433	-0.00806	-0.01038	-0.01074
3	0.02027	0.02002	0.02098	0.02543	0.02507	0.02862
4	-0.00264	0.00000	-0.00552	-0.01052	-0.01387	-0.01426
5	0.02012	0.02014	0.02148	0.02709	0.02746	0.03109
6	-0.00200	0.00000	-0.00649	-0.01229	-0.01643	-0.01683
7	0.02028	0.02032	0.02218	0.02874	0.02970	0.03345
8	-0.00117	0.00000	-0.00725	-0.01381	-0.01866	-0.01909
9	0.02038	0.02057	0.02297	0.03045	0.03192	0.03587
10	-0.00029	0.00000	-0.00804	-0.01527	-0.02073	-0.02124
11	0.02036	0.02089	0.02379	0.03224	0.03413	0.03841
12	0.00047	0.00000	-0.00875	-0.01669	-0.02277	-0.02341
13	0.02064	0.02129	0.02474	0.03409	0.03649	0.04111
14	0.00082	0.00000	-0.00937	-0.01805	-0.02480	-0.02564
15	0.02147	0.02178	0.02589	0.03615	0.03900	0.04412
16	0.00126	0.00000	-0.00990	-0.01944	-0.02699	-0.02805
17	0.02204	0.02236	0.02705	0.03833	0.04176	0.04749
18	0.00130	0.00000	-0.01035	-0.02096	-0.02938	-0.03081
19	0.02292	0.02306	0.02832	0.04075	0.04486	0.05148
20	0.00114	0.00000	-0.01077	-0.02273	-0.03209	-0.03408
21	0.02395	0.02390	0.02968	0.04356	0.04846	0.05637
22	0.00080	0.00000	-0.01133	-0.02489	-0.03518	-0.03798
23	0.02515	0.02489	0.03116	0.04707	0.05274	0.06250
24	0.00031	0.00000	-0.01198	-0.02736	-0.03883	-0.04281
25	0.02659	0.02608	0.03281	0.05136	0.05794	0.07052
26	-0.00026	0.00000	-0.01281	-0.03039	-0.04323	-0.04903
27	0.02810	0.02751	0.03474	0.05685	0.06449	0.08152
28	-0.00071	0.00000	-0.01386	-0.03416	-0.04874	-0.05744
29	0.02963	0.02925	0.03703	0.06410	0.07304	0.09749
30	-0.00088	0.00000	-0.01513	-0.03902	-0.05586	-0.06951

(Fortsetzung von Seite 98)

31	0.03118	0.03139	0.03982	0.07411	0.08473	0.12240
32	-0.00083	0.00000	-0.01665	-0.04555	-0.06553	-0.08840
33	0.03324	0.03407	0.04338	0.08869	0.10161	0.16615
34	-0.00116	0.00000	-0.01840	-0.05487	-0.07948	-0.12260
35	0.03743	0.03750	0.04795	0.11148	0.12785	0.26882
36	-0.00062	0.00000	-0.02055	-0.06937	-0.10141	-0.20715
37	0.04186	0.04203	0.05406	0.15146	0.17374	0.79271
38	-0.00017	0.00000	-0.02336	-0.09542	-0.14127	
39	0.04841	0.04824	0.06269	0.24608	0.28131	
40	0.00030	0.00000	-0.02711	-0.15914	-0.24081	
41	0.05787	0.05726	0.07535	0.73237	0.82757	
42	0.00043	0.00000	-0.03244			
43	0.07218	0.07149	0.09505			
44	-0.00013	0.00000	-0.04068			
45	0.09646	0.09715	0.12940			
46	-0.00001	0.00000	-0.05532			
47	0.15716	0.15712	0.21162			
48	-0.00001	0.00000	-0.09016			
49	0.45718	0.45718	0.63472			

Tabelle A.11: Zwei-Punkt-Korrelationen $\langle g_{iL/2} \rangle$ für ungeradzahliges $L/2$ und verschiedene r . Für den Ising-Fall $r = 3$ sind zusätzlich die exakten Resultate angegeben. (Fortsetzung auf Seite 100)

	$L = 90$			$L = 82$		$L = 74$
i	$r = 3$	exakt	$r = 4$	$r = 5$	$r = 7$	$r = 6$
1	0.00085	0.00000	-0.00712	-0.01266	-0.01567	-0.01636
2	-0.00164	0.00078	0.00253	0.00488	0.00769	0.00734
3	0.00009	0.00000	-0.00878	-0.01453	-0.01840	-0.01894
4	-0.00039	0.00157	0.00356	0.00680	0.01056	0.01019
5	0.00024	0.00000	-0.00938	-0.01562	-0.02026	-0.02070
6	0.00078	0.00238	0.00434	0.00832	0.01270	0.01242
7	0.00042	0.00000	-0.00975	-0.01649	-0.02181	-0.02222
8	0.00229	0.00322	0.00519	0.00973	0.01458	0.01448
9	0.00033	0.00000	-0.01007	-0.01729	-0.02327	-0.02370
10	0.00390	0.00412	0.00604	0.01113	0.01644	0.01656

(Fortsetzung von Seite 99)

11	-0.00002	0.00000	-0.01045	-0.01814	-0.02481	-0.02529
12	0.00551	0.00507	0.00702	0.01266	0.01835	0.01879
13	-0.00021	0.00000	-0.01080	-0.01915	-0.02646	-0.02715
14	0.00676	0.00611	0.00818	0.01443	0.02048	0.02135
15	0.00004	0.00000	-0.01111	-0.02030	-0.02836	-0.02931
16	0.00822	0.00724	0.00957	0.01649	0.02279	0.02431
17	-0.00009	0.00000	-0.01162	-0.02177	-0.03054	-0.03195
18	0.00939	0.00851	0.01122	0.01885	0.02540	0.02774
19	-0.00006	0.00000	-0.01228	-0.02359	-0.03310	-0.03512
20	0.01054	0.00995	0.01318	0.02154	0.02838	0.03182
21	-0.00003	0.00000	-0.01316	-0.02577	-0.03609	-0.03893
22	0.01177	0.01160	0.01532	0.02458	0.03192	0.03695
23	0.00004	0.00000	-0.01425	-0.02823	-0.03967	-0.04367
24	0.01322	0.01354	0.01779	0.02839	0.03623	0.04362
25	0.00023	0.00000	-0.01561	-0.03123	-0.04404	-0.04974
26	0.01503	0.01586	0.02061	0.03314	0.04163	0.05272
27	0.00030	0.00000	-0.01719	-0.03489	-0.04947	-0.05788
28	0.01762	0.01870	0.02394	0.03934	0.04865	0.06597
29	0.00014	0.00000	-0.01904	-0.03955	-0.05645	-0.06960
30	0.02140	0.02227	0.02811	0.04786	0.05822	0.08719
31	-0.00034	0.00000	-0.02121	-0.04575	-0.06587	-0.08831
32	0.02660	0.02691	0.03357	0.06036	0.07216	0.12640
33	-0.00081	0.00000	-0.02377	-0.05472	-0.07950	-0.12290
34	0.03293	0.03323	0.04129	0.08050	0.09439	0.21901
35	0.00022	0.00000	-0.02720	-0.06913	-0.10131	-0.20715
36	0.04264	0.04233	0.05273	0.11791	0.13521	0.71265
37	0.00020	0.00000	-0.03223	-0.09577	-0.14159	
38	0.05690	0.05661	0.07107	0.20576	0.23115	
39	0.00041	0.00000	-0.04039	-0.15911	-0.24078	
40	0.08247	0.08233	0.10500	0.67357	0.74143	
41	-0.00031	0.00000	-0.05564			
42	0.14210	0.14233	0.18386			
43	0.00005	0.00000	-0.09009			
44	0.44240	0.44240	0.59981			

Anhang B

Zur Lösung des XX -Modells

Der Hamilton-Operator des XX -Modells mit imaginärem Randfeld

$$H = \sum_{n=1}^{L-1} (\sigma_n^+ \sigma_{n+1}^- + \sigma_{n+1}^+ \sigma_n^-) + \frac{ih}{2} (\sigma_1^z - \sigma_L^z) \quad (\text{B.1})$$

soll diagonalisiert werden¹. Dazu geht man zuerst von den Pauli-Operatoren σ^+ und σ^- zu Fermi-Operatoren c und c^\dagger durch eine Jordan-Wigner-Transformation [3] über:

$$c_n = \prod_{j=1}^{L-1} (-\sigma_j^z) \sigma_n^- \quad (\text{B.2})$$

$$c_n^\dagger = \sigma_n^+ \prod_{j=1}^{L-1} (-\sigma_j^z). \quad (\text{B.3})$$

Aus $\sigma_n^+ \sigma_n^- = \frac{1}{2} (1 + \sigma_n^z)$ folgt durch Kombination der Gleichungen (B.2) und (B.3)

$$\sigma_n^z = 2c_n^\dagger c_n - 1. \quad (\text{B.4})$$

Der Hamilton-Operator (B.1) schreibt sich dann

$$H = \sum_{n=1}^{L-1} (c_n^\dagger c_{n+1} + c_{n+1}^\dagger c_n) + ih (c_1^\dagger c_1 - c_L^\dagger c_L), \quad (\text{B.5})$$

wobei die c_n und c_n^\dagger die fermionischen Vertauschungsrelationen

$$[c_n^\dagger, c_m]_+ = \delta_{nm} \quad \text{und} \quad [c_n, c_m]_+ = [c_n^\dagger, c_m^\dagger]_+ = 0 \quad (\text{B.6})$$

¹Die Kopplungskonstante und das Randfeld wurden zur Vereinfachung etwas anders gewählt als im Kapitel 4.

erfüllen. Gesucht sind nun Operatoren $a_q = \sum_n \Phi_q(n)c_n$ und $a_q^\dagger = \sum_n \Phi_q^*(n)c_n^\dagger$, die ebenfalls die fermionischen Vertauschungsrelationen (B.6) erfüllen und gleichzeitig den Hamilton-Operator (B.5) diagonalisieren, d.h. es soll gelten

$$H = \sum_q \varepsilon_q a_q^\dagger a_q + \text{const.} \quad (\text{B.7})$$

Die Φ bestimmt man durch Koeffizientenvergleich der Ausdrücke $[H, a_q]_-$ aus der Diagonaldarstellung (B.7) und der Darstellung (B.5) des Hamilton-Operators.

1. Die Diagonaldarstellung liefert unter Berücksichtigung der Vertauschungsregeln:

$$\begin{aligned} [H, a_q]_- &= H a_q - a_q H \\ &= \sum_k \varepsilon_k a_k^\dagger a_k a_q - \sum_k a_q \varepsilon_k a_k^\dagger a_k \\ &= \varepsilon_q \left(a_q^\dagger \underbrace{a_q a_q}_{=0} - a_q a_q^\dagger a_q \right) \\ &= -\varepsilon_q \left(1 - a_q^\dagger a_q \right) a_q \\ &= -\varepsilon_q \left(a_q - \underbrace{a_q^\dagger a_q a_q}_{=0} \right) \\ [H, a_q]_- &= -\varepsilon_q a_q = -\varepsilon_q \sum_n \Phi_q(n) c_n. \end{aligned} \quad (\text{B.8})$$

2. Die Darstellung (B.5) ergibt:

$$\begin{aligned} [H, a_q]_- &= \underbrace{\sum_n \left[(c_n^\dagger c_{n+1} + c_{n+1}^\dagger c_n) a_q - a_q (c_n^\dagger c_{n+1} + c_{n+1}^\dagger c_n) \right]}_{\text{Term 1}} \\ &\quad + \underbrace{ih \left[(c_1^\dagger c_1 - c_L^\dagger c_L) a_q - a_q (c_1^\dagger c_1 - c_L^\dagger c_L) \right]}_{\text{Term 2}} \end{aligned} \quad (\text{B.9})$$

- (a) Der erste Term schreibt sich in den Φ als

$$\sum_{n,m} \left[(c_n^\dagger c_{n+1} + c_{n+1}^\dagger c_n) \Phi_q(m) c_m - \Phi_q(m) c_m (c_n^\dagger c_{n+1} + c_{n+1}^\dagger c_n) \right] \quad (\text{B.10})$$

und läßt sich am besten für drei verschiedene Fälle untersuchen:

i. $m = n$:

$$\begin{aligned}
\text{Term 1} &= \sum_n \left[c_n^\dagger c_{n+1} \Phi_q(n) c_n + \underbrace{c_{n+1}^\dagger c_n \Phi_q(n) c_n}_{=0} \right. \\
&\quad \left. - \Phi_q(n) c_n c_n^\dagger c_{n+1} - \underbrace{\Phi_q(n) c_n c_{n+1}^\dagger c_n}_{=0} \right] \\
&= \sum_n \left[c_n^\dagger c_{n+1} \Phi_q(n) c_n - \Phi_q(n) (1 - c_n^\dagger c_n) c_{n+1} \right] \\
\text{Term 1} &= - \sum_n \Phi_q(n) c_{n+1} \tag{B.11}
\end{aligned}$$

ii. $m = n + 1$:

$$\begin{aligned}
\text{Term 1} &= \sum_n \left[\underbrace{c_n^\dagger c_{n+1} \Phi_q(n+1) c_{n+1}}_{=0} + c_{n+1}^\dagger c_n \Phi_q(n+1) c_{n+1} \right. \\
&\quad \left. - \underbrace{\Phi_q(n+1) c_{n+1} c_n^\dagger c_{n+1}}_{=0} - \Phi_q(n+1) c_{n+1} c_{n+1}^\dagger c_n \right] \\
&= \sum_n \left[c_{n+1}^\dagger c_n \Phi_q(n+1) c_{n+1} - \Phi_q(n+1) (1 - c_{n+1}^\dagger c_{n+1}) c_n \right] \\
\text{Term 1} &= - \sum_n \Phi_q(n+1) c_n \tag{B.12}
\end{aligned}$$

iii. $m \neq n$ und $m \neq n + 1$:

$$\begin{aligned}
\text{Term 1} &= \sum_{n,m} \left[c_n^\dagger c_{n+1} \Phi_q(m) c_m + c_{n+1}^\dagger c_n \Phi_q(m) c_m \right. \\
&\quad \left. - \Phi_q(m) c_m c_n^\dagger c_{n+1} - \Phi_q(m) c_m c_{n+1}^\dagger c_n \right] = 0 \tag{B.13}
\end{aligned}$$

(b) Der zweite Term schreibt sich in den Φ als

$$ih \sum_n \Phi_q(n) \left[c_1^\dagger c_1 c_n - c_L^\dagger c_L c_n - c_n c_1^\dagger c_1 + c_n c_L^\dagger c_L \right] \tag{B.14}$$

und wird wie der erste Term für drei spezielle Fälle untersucht:

i. $n = 1$:

$$\begin{aligned}
\text{Term 2} &= ih \Phi_q(1) \left[\underbrace{c_1^\dagger c_1 c_1}_{=0} - c_L^\dagger c_L c_1 - c_1 c_1^\dagger c_1 + c_1 c_L^\dagger c_L \right] \\
&= ih \Phi_q(1) \left[- (1 - c_1^\dagger c_1) c_1 \right] \\
\text{Term 2} &= -ih \Phi_q(1) c_1 \tag{B.15}
\end{aligned}$$

Die erste Gleichung von (B.18) liefert das Verhältnis der Koeffizienten A und B und ist hier nicht weiter von Bedeutung. Die letzte Gleichung gibt die erlaubten Werte von q :

$$\begin{aligned} \Phi_q(L-1) - ih\Phi_q(L) - \varepsilon_q\Phi_q(L) &= 0 \\ -ih\Phi_q(L) - \Phi_q(L+1) + \underbrace{\Phi_q(L+1) + \Phi_q(L-1) - \varepsilon_q\Phi_q(L)}_{\text{entspricht einer inneren Gleichung}} &= 0 \\ \Rightarrow \quad -\Phi_q(L+1) &= ih\Phi_q(L) \end{aligned} \tag{B.23}$$

Dies ist ein homogenes Gleichungssystem in A und B . Das Verschwinden der Determinante der Koeffizientenmatrix liefert die gesuchte Bedingungsgleichung

$$\sin[q(L+1)] + h^2 \sin[q(L-1)] = 0, \tag{B.24}$$

die man leicht numerisch lösen kann. Die Grundzustandsenergie bekommt man dann durch Summation von (B.22) über alle $q \leq \frac{\pi}{2}$. Für $h > 1$ kann diese auch komplex werden. Für $h = 0$ erhält man das Ergebnis für die herkömmliche XX -Kette

$$\varepsilon_q = 2 \cos q \quad q = \frac{\pi}{L+1}n, \quad n = 1, 2, \dots, L. \tag{B.25}$$