

Vollständige Klassifikation der
Quanten-Transfermatrix-Eigenzustände von endlichen
Gittersystemen mit $SU(n,m)$ -Symmetrie

Diplomarbeit im Fach Physik

vorgelegt von Jens Damerau

März 2004
(Korrigierte Fassung: 12.7.2005)

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	5
1.1	Vertex-Modelle	6
1.2	Die Symmetriegruppe $SU(n,m)$	8
1.2.1	Graduierte Vektorräume	8
1.3	Die Yang-Baxter-Algebra	10
1.3.1	Graduierte Yang-Baxter-Algebra	11
1.4	Allgemeinere Integritätsbedingungen	12
2	Modelle mit $SU(n,m)$-Symmetrie	13
2.1	Das Uimin-Sutherland-Modell	13
2.1.1	Definition des Modells	13
2.1.2	Verknüpfung mit dem Perk-Schultz-Modell	14
2.1.3	Zustandssumme	18
2.1.4	Die Quanten-Transfermatrix	19
2.1.5	Freie Energie pro Gitterplatz	21
2.1.6	Korrelationslängen	22
2.1.7	Berücksichtigung äußerer Felder	24
2.1.8	Eigenschaften der Quanten-Transfermatrix	24
2.1.9	Die Monodromiematrix	27
2.1.10	Eigenwertgleichung im Bethe-Ansatz	28
2.1.11	Resultierende Bethe-Ansatzgleichungen	28
2.2	Anwendung auf spezielle physikalische Modelle	30
2.2.1	$SU(3)$ -symmetrisches Modell	30
2.2.2	$SU(4)$ -symmetrisches Modell	30
2.2.3	Supersymmetrisches t-J-Modell	30
2.2.4	Supersymmetrisches erweitertes Hubbard-Modell	31
3	Numerische Ergebnisse	33
3.1	Thermodynamik	33
3.1.1	Berechnung der freien Energie bei endlicher Trotterzahl	33
3.1.2	Berechnung abgeleiteter thermodynamischer Größen	34
3.1.3	Thermodynamik des $SU(3)$ -symmetrischen Modells	35
3.1.4	Thermodynamik des $SU(4)$ -symmetrischen Modells	38
3.1.5	Thermodynamik des supersymmetrischen t-J-Modells	41
3.1.6	Thermodynamik des supersymmetrischen erweiterten Hubbard-Modells	42
3.2	Klassifikation der Eigenwerte und Eigenzustände	45

3.2.1	SU(3)-symmetrisches Modell	47
3.2.2	SU(4)-symmetrisches Modell	51
3.2.3	Supersymmetrisches t-J-Modell	55
3.2.4	Supersymmetrisches erweitertes Hubbard-Modell	59
3.2.5	Abschließende Bemerkung	63
4	Zusammenfassung und Ausblick	65
A	Numerische Methoden	67
A.1	Numerische Lösung der Bethe-Ansatzgleichungen	67
A.1.1	Newton-Verfahren	68
A.1.2	Wahl der Startwerte	73
A.1.3	Anheben der Trotterzahl	74
A.1.4	Einfluß weiterer Parameter	75
A.2	Diagonalisierung der Quanten-Transfermatrix	76
A.3	Berechnung der Ansatzzahlen zu bekannten Eigenwerten	77
A.3.1	Bestimmung des Eigenwertes bei beliebigem Spektralparameter	77
A.3.2	Bethe-Ansatzzahlen für $q = 3$	78
A.3.3	Bethe-Ansatzzahlen für $q > 3$	80
B	Äquivalenz verschiedener Graduierungen	83
B.1	Äquivalenzrelationen bei einer negativen Graduierung	83
B.1.1	Äquivalenz der Bethe-Ansatzgleichungen	83
B.1.2	Äquivalenz der Eigenwerte	87
B.2	Beliebig graduierte Spinkomponenten	89
B.2.1	Zwei negative Graduierungen	89
B.2.2	Beliebige Wahl der Graduierung	90
C	Tabellen der Bethe-Ansatzzahlverteilungen	91
	Literaturverzeichnis	109

Kapitel 1

Einleitung

Vielteilchensysteme spielen eine wichtige Rolle in vielen Bereichen der Physik. Da bei diesen Systemen jedoch die Zahl der Freiheitsgrade mit der Zahl der betrachteten Teilchen exponentiell ansteigt, ist eine Lösung, also z.B. die Berechnung der Zustandssumme im Rahmen einer statistischen Betrachtung, in der Regel nur näherungsweise möglich.

Bei den Näherungsverfahren macht man sich meist zunutze, daß langreichweitige Korrelationen zwischen Teilchen in vielen Fällen vernachlässigt werden können. In der Nähe von kritischen Punkten ist dieses Vorgehen jedoch problematisch, da das Verhalten eines Systems dort wesentlich von langreichweitigen Korrelationen abhängt. Bei bestimmten Systemen sind jedoch exakte Lösungen möglich, man spricht dann von *integrablen Systemen*.

In der klassischen Mechanik folgt die Integrabilität eines Systemes aus dem paarweisen Verschwinden der Poisson-Klammern eines Satzes von unabhängigen, in Orts- und Impulsvariablen analytischen Funktionen. Nach dem Satz von Liouville lassen sich die Bewegungsgleichungen dann durch Quadratur lösen [5]. Man konstruiert dazu eine kanonische Transformation auf neue Wirkungswinkelvariablen, für die die Bewegungsgleichungen trivial sind.

Es existiert jedoch kein quantenmechanisches Analogon zum Satz von Liouville. Ein endlicher Satz von kommutierenden Operatoren reicht hier nicht aus, um Eigenwerte und Eigenzustände des Hamilton-Operators zu konstruieren. Es sind zusätzliche Informationen nötig, die bei allen bekannten, quantenmechanisch exakt lösbaren Modellen von einer Algebra stammen. In diesem Zusammenhang ist die *Yang-Baxter-Algebra* von besonderer Bedeutung, die in Abschnitt 1.3 näher betrachtet wird. Eindimensionale quantenmechanische Modelle, die auf der Yang-Baxter-Algebra beruhen sind stets integrabel.

Die wichtigste auf der Yang-Baxter-Algebra aufbauende Methode, Eigenzustände und Eigenwerte zu berechnen, ist der *Bethe-Ansatz*. Diese Methode wurde 1931 von Bethe zur Lösung der isotropen Spin-1/2-Heisenberg-Kette eingeführt [8] und in den Folgejahren erfolgreich zur Lösung vieler weiterer Modelle verwendet. Das Verfahren wurde dabei stetig erweitert und verfeinert, um weitere Anwendungsgebiete erschließen zu können. Eine der wichtigsten Erweiterungen bestand in der Einführung des geschachtelten Bethe-Ansatzes 1967 von Yang [51], über den erstmals eine Behandlung von Modellen mit mehr als zwei möglichen Zuständen auf jedem Platz der Spinkette möglich war. Quantenmechanische Modelle lassen sich auf diese Weise jedoch nur in einer Dimension lösen.

In der vorliegenden Arbeit werden integrable, eindimensionale Spinketten mit zusätzlicher $SU(n,m)$ -Symmetrie numerisch untersucht. Dabei wird mit einer Variante des Bethe-Ansatzes, dem *algebraischen Bethe-Ansatz* gearbeitet.

Ein generalisiertes Modell mit den genannten Eigenschaften wird in Kapitel 2 vorgestellt, es handelt sich dabei um das *Uimin-Sutherland-Modell* [48, 42]. Dort wird zudem gezeigt, daß sich das Modell stets äquivalent auf zweidimensionale, klassische Gittersysteme abbilden läßt, welche ebenfalls $SU(n,m)$ -Symmetrie besitzen. Dabei handelt es sich um sogenannte *Vertex-Modelle*.

Um die Thermodynamik des Uimin-Sutherland-Modells bei endlichen Temperaturen untersuchen zu können, wird eine Trotter-Suzuki-Zerlegung [47] der Zustandssumme durchgeführt. Dies führt auf ein spezielles zweidimensionales Ersatzmodell, für das eine sogenannte *Quanten-Transfermatrix* definiert wird. Aus der Diagonalisierung dieser Matrix, welche im Rahmen des algebraischen Bethe-Ansatzes erfolgen kann, können neben der Thermodynamik zudem Korrelationslängen des Systemes bestimmt werden. Dazu muß ein System von gekoppelten, nichtlinearen Bethe-Ansatzgleichungen gelöst werden. Zu jedem Eigenwert der Quanten-Transfermatrix existiert eine Lösung dieser Gleichungen. Es wird gezeigt, daß die Thermodynamik des Systems im thermodynamischen Limes allein aus dem größten Eigenwert folgt.

Es werden Beispiele für spezielle physikalische Modelle angegeben, die äquivalent zu bestimmten Spezialfällen des allgemeinen Uimin-Sutherland-Modells sind. Behandelt werden in diesem Zusammenhang ein $SU(3)$ -symmetrisches Modell, ein Spin-Orbital-Modell mit $SU(4)$ -Symmetrie, das supersymmetrische t-J-Modell und das supersymmetrische erweiterte Hubbard-Modell.

Für diese Modelle werden in Kapitel 3 die wichtigsten thermodynamischen Größen angegeben, die mit Hilfe einer numerischen Lösung der Bethe-Ansatzgleichungen aus dem größten Eigenwert bestimmt wurden. Details zum Rechenverfahren finden sich in Anhang A.

Problematisch im Rahmen des Bethe-Ansatzes ist jedoch die Identifikation von Lösungen zu den nächstführenden Eigenwerten und zugehörigen Eigenzuständen der Quanten-Transfermatrix. Nicht jede Lösung der Bethe-Ansatzgleichungen liefert nämlich tatsächlich einen existierenden Eigenwert. Es ist daher nötig, sich einen Überblick über die relevanten Lösungen der Ansatzgleichungen und die zugehörigen Verteilungsmuster der komplexen Bethe-Ansatzzahlen zu verschaffen.

In Anhang A wird daher ein Verfahren vorgestellt, mit dem zu bekannten Eigenwerten bzw. Eigenzuständen eindeutig die zugehörigen Bethe-Ansatzzahlverteilungen berechnet werden können.

Mit Hilfe einer numerischen Diagonalisierung der Quanten-Transfermatrix bei geringer Trotterzahl kann auf diese Weise eine vollständige Klassifikation der Eigenwerte und Eigenzustände anhand der zugehörigen Verteilungen der Bethe-Ansatzzahlen gewonnen werden. Ergebnisse für die größten Eigenwerte der betrachteten Modelle sind in Kapitel 3 zu finden.

Schließlich wird in Anhang B gezeigt, wie die Bethe-Ansatzgleichungen und Eigenwerte zu unterschiedlichen Graduierungen zusammenhängen.

1.1 Vertex-Modelle

Im Zusammenhang mit dem algebraischen Bethe-Ansatz sind die sogenannten *Vertex-Modelle* von besonderer Bedeutung. Nach [44, 45] lassen sich d -dimensionale quantenmechanische Modelle stets äquivalent auf $(d + 1)$ -dimensionale Vertex-Modelle abbilden. Da in dieser Arbeit mit eindimensionalen Spinketten gearbeitet wird, werden im folgenden speziell zweidimensionale Vertex-Modelle betrachtet.

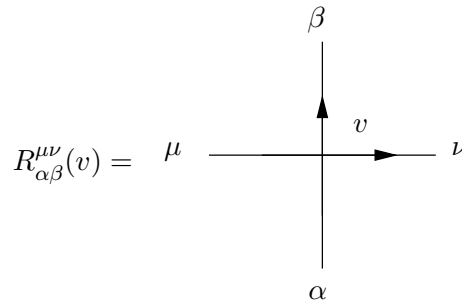


Abbildung 1.1: Zusammenhang zwischen Vertexkonfiguration und der zugehörigen Komponente der R -Matrix. Die Pfeile geben die Orientierung des Vertex an.

Ein solches Vertex-Modell besteht aus einem zweidimensionalen Gitter mit $N \times M$ Kreuzungspunkten bzw. Vertices. Auf den dazwischenliegenden horizontalen und vertikalen Verbindungslinien sitzen jeweils Spinvariablen, die einen von $q \in N$ Werten annehmen können. Jedem Vertex sind je nach Konfiguration der umgebenden Spins bestimmte Wechselwirkungsenergien bzw. Boltzmannngewichte zugeordnet. Letztere lassen sich in einer sogenannten R -Matrix zusammenfassen, siehe dazu Abbildung 1.1. Die Lösbarkeit des Modelles ist dann gegeben, wenn die R -Matrizen in Abhängigkeit eines Spektralparameters v die Yang-Baxter-Gleichung erfüllen. Näheres dazu folgt im Abschnitt 1.3.

Sowohl in horizontaler, als auch in vertikaler Richtung werden hier periodische Randbedingungen angenommen. Damit ergibt sich für das Gitter effektiv die Topologie eines Torus.

Der wohl prominenteste Vertreter dieses Modelltyps ist das Sechs-Vertex-Modell, bei dem jede Spinvariable einen von zwei Zuständen annehmen kann, wobei nur sechs der insgesamt acht möglichen Vertexkonfigurationen mit einem von null verschiedenen Boltzmannngewicht verknüpft sind. Zudem sind bei diesem Modell Boltzmannngewichte zu Vertices mit zueinander invertierten Spinkonfigurationen jeweils gleich, so daß man effektiv auf drei verschiedene Boltzmannngewichte kommt. Der Ursprung des Modelles geht zurück auf die Betrachtung von sogenannten *Eis-Typ-Modellen*, die sich im Zusammenhang einer Beschreibung des Verhaltens von Wassermolekülen auf einem (zweidimensionalen) Gitter ergeben. In der angegebenen, generalisierten Form findet das Modell, je nach spezieller Wahl der drei Gewichte, zudem bei der Beschreibung weiterer Systeme Anwendung. Beispielsweise gelang mit Hilfe des Sechs-Vertex-Modelles die Lösung der eindimensionalen isotropen Spin-1/2 Heisenberg-Kette. Die Lösung des allgemeinen Sechs-Vertex-Modells mit Hilfe des Bethe-Ansatzes findet sich in [7].

Ein besonders elegantes Lösungsverfahren für Vertex-Modelle, das ebenfalls in [7] zu finden ist, ist der *algebraische Bethe-Ansatz* unter Verwendung sogenannter *Transfermatrizen*.

Sofern die lokalen R -Matrizen für alle Vertices gleich sind, nimmt die Reihen-Transfermatrix folgende Gestalt an:

$$\mathcal{T}_{\alpha}^{\beta}(v) = \sum_{\{\mu\}} \prod_{i=1}^N R_{\alpha_i \beta_i}^{\mu_i \mu_{i+1}}(v) \quad (1.1)$$

wobei $\alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_N)$ und $\beta = (\beta_1, \dots, \beta_N)$ auf der linken Seite als Mehrfachindizes zu verstehen sind. Der Parameter v ist ein freier Parameter, der sogenannte *Spektralparameter*.

Mit Hilfe der Transfermatrix $\mathcal{T}(v)$ erhält man eine einfache Darstellung der Zustandssumme des Gitters, indem man die Transfermatrizen aller M Reihen miteinander multipliziert

und anschließend die Spur über den q^N -dimensionalen Raum berechnet.

$$Z = \text{Tr } \mathcal{T}^M(v) \quad (1.2)$$

Bildet man die Spur in der Basis der Eigenzustände der Transfermatrix, so ergibt sich die einfache Form

$$Z = \sum_j \Lambda_j^M \quad (1.3)$$

Die vollständige Lösung des Vertex-Modells ist also gleichbedeutend mit der Kenntnis der Eigenzustände und Eigenwerte der Transfermatrix. Die Diagonalisierung der Transfermatrix wird unter Ausnutzung der Yang-Baxter-Algebra vom algebraischen Bethe-Ansatz geleistet.

Dazu definiert man ein weiteres Objekt, die sogenannte *Monodromie-Matrix*, die in einem Hilfsraum lebt. Die Matrix ist von der Form

$$\mathcal{L}_\nu^{\nu'}(v) := \sum_\mu R_{\alpha_1\beta_1}^{\nu\mu_2}(v) R_{\alpha_2\beta_2}^{\mu_2\mu_3}(v) \cdots R_{\alpha_{N-1}\beta_{N-1}}^{\mu_{N-1}\mu_N}(v) R_{\alpha_N\beta_N}^{\mu_N\nu'}(v) \quad (1.4)$$

Dabei sind mit ν und ν' die Spinvariablen des Hilfsraumes bezeichnet. Die Transfermatrix entsteht aus der Spur über den Hilfsraum.

$$\mathcal{T}(v) = \text{Tr}_{\text{aux}} \mathcal{L}(v) = \sum_\nu \mathcal{L}_\nu^{\nu'}(v) \quad (1.5)$$

1.2 Die Symmetriegruppe $\text{SU}(n, m)$

Symmetrien spielen eine wichtige Rolle bei der Behandlung von quantenmechanischen Systemen. In dieser Arbeit werden speziell Systeme untersucht, die $\text{SU}(n, m)$ -Symmetrie besitzen. Bei der Symmetriegruppe $\text{SU}(n, m)$ handelt es sich um eine auf graduierte Vektorräume erweiterte Form der gewöhnlichen Symmetriegruppe $\text{SU}(N)$. Letztere umfaßt in der fundamentalen Darstellung alle $N \times N$ unitären Matrizen A mit $\det A = 1$ und der Matrixmultiplikation als definierender Verknüpfung. Mit der Gruppe $\text{SU}(N)$ ist die Lie-Algebra $\mathfrak{su}(N)$ verbunden. Die Generatoren dieser Algebra sind $N \times N$ Matrizen a mit den definierenden Eigenschaften $a^\dagger = -a$ und $\text{Tr } a = 0$. Es existieren insgesamt $d = N^2 - 1$ linear unabhängige Matrizen dieses Typs. d ist damit die Dimension der Algebra $\mathfrak{su}(N)$. Weitere Details zur Gruppe $\text{SU}(N)$ und der damit verbundenen Lie-Algebra finden sich in [17, 9].

Es folgt eine kurze Definition graduierter Vektorräume nach [18].

1.2.1 Graduierte Vektorräume

Graduierte Vektorräume besitzen eine zusätzliche Eigenschaft, die *Parität*. Ein Vektorraum V mit $\dim V = n + m$ wird unter Berücksichtigung der Parität zerlegt in einen „geraden“ Unterraum V_0 mit $\dim V_0 = n$ und einen „ungeraden“ Unterraum V_1 mit $\dim V_1 = m$.

$$V = V_0 \oplus V_1 \quad (1.6)$$

Die beiden Unterräume V_0 und V_1 werden als *homogene Komponenten* von V bezeichnet. Für Vektoren aus diesen Unterräumen, $v_0 \in V_0$ und $v_1 \in V_1$, ist eine Paritätsfunktion $p : V_i \rightarrow \mathbb{Z}_2$ definiert, mit

$$p(v_i) = i \quad \text{für } v_i \in V_i \text{ und } i = 0, 1 \quad (1.7)$$

Der Vektorraum V mit dieser Zusatzeigenschaft heißt *graduierter Vektorraum* oder auch *Superraum*.

Um bequemer mit einer konkreten Darstellung arbeiten zu können, definiert man Basisvektoren e_1, \dots, e_{n+m} mit fester Parität

$$p(\alpha) := p(e_\alpha) = \begin{cases} 0 & \text{für } \alpha = 1, \dots, n \\ 1 & \text{für } \alpha = n+1, \dots, n+m \end{cases} \quad (1.8)$$

Der Paritätsbegriff läßt sich auf Tensorprodukte von Operatoren in $\text{End}(V)$ erweitern, indem man eine Basis $e_\alpha^\beta \in \text{End}(V)$ wählt, so daß

$$e_\alpha^\beta e_\gamma = \delta_\gamma^\beta e_\alpha \quad (1.9)$$

Mit der Definition

$$p(e_\alpha^\beta) := p(\alpha) + p(\beta) \quad (1.10)$$

wird auch $\text{End}(V)$ zu einem graduierten Vektorraum. Ein Element $A = \sum_{\alpha\beta} A_\beta^\alpha e_\alpha^\beta \in \text{End}(V)$ ist genau dann homogen bezüglich der Parität, wenn die zugehörige Parität $p(A)$ die Eigenschaft

$$(-1)^{p(\alpha)+p(\beta)} A_\beta^\alpha =: (-1)^{p(A)} A_\beta^\alpha \quad (1.11)$$

erfüllt. Daraus ergibt sich direkt, daß das Produkt zweier solcher homogener Elemente $A, B \in \text{End}(V)$ ebenfalls wieder homogen ist mit

$$p(AB) = p(A) + p(B) \quad (1.12)$$

Daher bildet $\text{End}(V)$ zusammen mit der in (1.10) definierten Parität eine graduierte assoziative Algebra.

Man definiert nun zusätzlich den Superkommutator für zwei homogene Elemente $X, Y \in \text{End}(V)$ der Gestalt

$$[X, Y]_\pm := XY - (-1)^{p(X)p(Y)} YX \quad (1.13)$$

wobei man die Definition anschließend in beiden Argumenten linear auf den gesamten $\text{End}(V)$ erweitert. Das Supertensorprodukt zwischen zwei Matrizen $A, B \in \text{End}(V)$ definiert man als

$$(A \otimes_s B)_{\alpha\beta}^{\mu\nu} := (-1)^{[p(\mu)+p(\nu)]p(\beta)} A_\mu^\nu B_\alpha^\beta \quad (1.14)$$

Außerdem definiert man für $A \in \text{End}(V)$ die Superspur

$$\text{sTr } A := \sum_\alpha (-1)^{p(\alpha)} A_\alpha^\alpha \quad (1.15)$$

Zusammen mit den definierenden Eigenschaften der $SU(N)$ ergibt sich im graduierten Raum $\text{End}(V)$ die graduierte Gruppe $SU(n, m)$. Die damit verbundene Algebra ist die Super-Lie-Algebra $\mathfrak{su}(n, m)$, deren Generatoren $((n+m) \times (n+m))$ -Matrizen a mit den definierenden Eigenschaften $a^\dagger = a$ und $\text{sTr } a = 0$ sind. n steht für die Dimension des Unterraumes V_0 mit „gerader“ Parität, m für die des Unterraumes V_1 mit „ungerader“ Parität. Für nähere Details zu den Eigenschaften von Super-Lie-Algebren sei auf [10] verwiesen.

In den folgenden Rechnungen wird in der Standardbasis des komplexen graduierten Vektorraumes $\mathbb{C}^{(n+m)}$ gearbeitet, d.h. die i -te Komponente des jeweiligen Basisvektors e_i sei 1, während alle anderen Komponenten verschwinden. Zusammen mit (1.9) ergibt sich damit gleichzeitig die Standardbasis des Raumes $\text{End}(\mathbb{C}^{(n+m)})$. Ein Basiselement e_α^β dieses Raumes wird dann durch eine $((n+m) \times (n+m))$ -Matrix repräsentiert, die nur den Eintrag 1 in Reihe α und Spalte β besitzt. Alle anderen Einträge verschwinden.

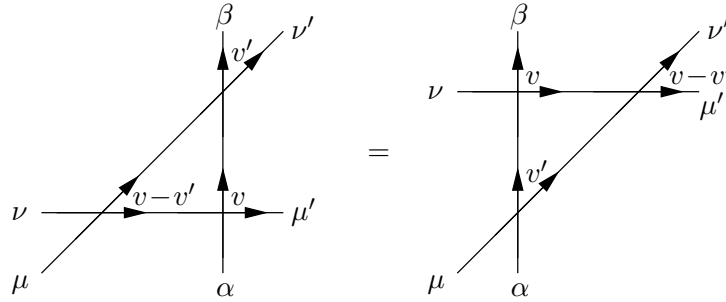


Abbildung 1.2: Graphische Darstellung der Yang-Baxter-Gleichung. Über durchgezogene Linien zwischen den Vertizes wird summiert. Jeder Vertiz ist mit einer R -Matrix verknüpft (siehe Abb. 1.1). Die Pfeile geben die Orientierung der Vertizes an.

1.3 Die Yang-Baxter-Algebra

Eine zentrale Rolle bei der Lösung vieler integrierbarer Modelle spielt die bereits erwähnte Yang-Baxter-Algebra, die unter anderem das Kommutieren von Transfer-Matrizen zu verschiedenen Spektralparametern sicherstellt. Zudem bedingt sie gewisse Vertauschungsrelationen der R -Matrix mit Einträgen der Monodromiematrix, über die die Diagonalisierung mit Hilfe des Bethe-Ansatzes möglich wird. Die Nebendiagonaleinträge der Monodromiematrix lassen sich als Erzeuger bzw. Vernichter interpretieren. Mit ihrer Hilfe können die Eigenzustände der Transfermatrix konstruiert werden, sofern ein geeigneter Referenzeigenzustand existiert. Die Gleichung

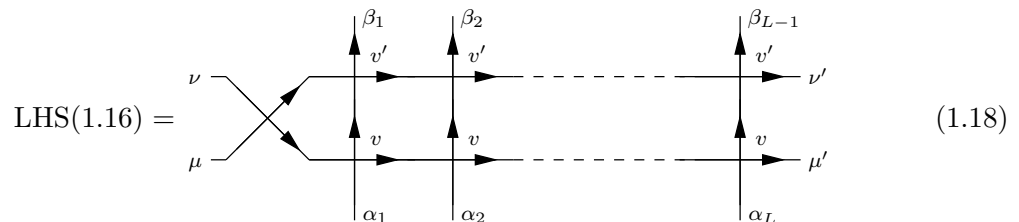
$$\sum_{\rho, \sigma} \mathcal{L}_{\rho}^{\nu'}(v') \mathcal{L}_{\sigma}^{\mu'}(v) R_{\mu\rho}^{\nu\sigma}(v - v') = \sum_{\rho, \sigma} R_{\rho\nu'}^{\sigma\mu'}(v - v') \mathcal{L}_{\nu}^{\sigma}(v) \mathcal{L}_{\mu}^{\rho}(v') \quad (1.16)$$

liefert die Definition der Yang-Baxter-Algebra. Gleichung (1.16) ist dann erfüllt, wenn die darin auftauchenden R -Matrizen der sogenannten *Yang-Baxter-Gleichung* genügen:

$$\sum_{\rho, \sigma, \tau} R_{\tau\beta}^{\rho\nu'}(v') R_{\alpha\tau}^{\sigma\mu'}(v) R_{\mu\rho}^{\nu\sigma}(v - v') = \sum_{\rho, \sigma, \tau} R_{\rho\nu'}^{\sigma\mu'}(v - v') R_{\tau\beta}^{\nu\sigma}(v) R_{\alpha\tau}^{\mu\rho}(v') \quad (1.17)$$

Die Gleichung kann graphisch mit Vertizes dargestellt werden, siehe hierzu die Abbildung 1.2.

Um zu beweisen, daß sich aus der Yang-Baxter-Gleichung (1.17) ebenso die Gültigkeit von (1.16) ergibt, betrachtet man zunächst die linke Seite letzterer Gleichung in graphischer Form.



Man nutzt die Yang-Baxter-Gleichung in der in Abbildung 1.2 dargestellten Form, um die in (1.18) links außen stehende Matrix $R(v - v')$ um eine Position nach rechts zu tauschen. Dabei

vertauschen automatisch die Positionen der Spektralparameter v und v' . Man erhält

$$\text{LHS(1.16)} = \begin{array}{c} \begin{array}{c} \beta_1 \\ \uparrow \\ v \\ \downarrow \\ \alpha_1 \end{array} \quad \begin{array}{c} \beta_2 \\ \uparrow \\ v' \\ \downarrow \\ \alpha_2 \end{array} \quad \dots \quad \begin{array}{c} \beta_{L-1} \\ \uparrow \\ v' \\ \downarrow \\ \alpha_L \end{array} \\ \nu \text{---} \rightarrow \quad \rightarrow \quad \rightarrow \quad \rightarrow \quad \rightarrow \nu' \\ \mu \text{---} \rightarrow \quad \rightarrow \quad \rightarrow \quad \rightarrow \quad \rightarrow \mu' \end{array} \quad (1.19)$$

Durch wiederholte Anwendung der Yang-Baxter-Gleichung kann man $R(v - v')$ schrittweise bis nach rechts außen durchtauschen. Der sich ergebende Ausdruck ist aber gerade die rechte Seite von (1.16).

$$\text{LHS(1.16)} = \begin{array}{c} \begin{array}{c} \beta_1 \\ \uparrow \\ v \\ \downarrow \\ \alpha_1 \end{array} \quad \begin{array}{c} \beta_2 \\ \uparrow \\ v \\ \downarrow \\ \alpha_2 \end{array} \quad \dots \quad \begin{array}{c} \beta_{L-1} \\ \uparrow \\ v \\ \downarrow \\ \alpha_L \end{array} \\ \nu \text{---} \rightarrow \quad \rightarrow \quad \rightarrow \quad \rightarrow \quad \rightarrow \nu' \\ \mu \text{---} \rightarrow \quad \rightarrow \quad \rightarrow \quad \rightarrow \quad \rightarrow \mu' \end{array} = \text{RHS(1.16)} \quad (1.20)$$

Gleichung (1.16) ist also erfüllt.

Aus (1.16) folgt schließlich das Kommutieren zweier Transfermatrizen bei beliebigen Spektralparametern v und v' , indem man beide Seiten mit der Matrix $R^{-1}(v - v')$ multipliziert und anschließend die Spur über die Spinvariablen des Hilfsraumes, d.h. μ und μ' bzw. ν und ν' , bildet.

$$\text{Tr}_{\text{aux}} \mathcal{L}(v')\mathcal{L}(v) = \text{Tr}_{\text{aux}} R(v - v')\mathcal{L}(v)\mathcal{L}(v')R^{-1}(v - v') = \text{Tr}_{\text{aux}} \mathcal{L}(v)\mathcal{L}(v') \quad (1.21)$$

Die linke Seite der letzten Gleichung ist nach (1.5) äquivalent zu

$$[\mathcal{T}(v), \mathcal{T}(v')] = 0 \quad \text{für alle } v, v' \in \mathbb{C} \quad (1.22)$$

Aus der Yang-Baxter-Algebra folgt also die Existenz einer kommutierenden Familie von Transfermatrizen.

1.3.1 Graduierte Yang-Baxter-Algebra

Die Verallgemeinerung der Yang-Baxter-Algebra auf graduierte Vektorräume wurde zuerst von Kulish und Sklyanin in [29] vorgenommen¹.

Unter Berücksichtigung der Graduierung wird die Yang-Baxter-Gleichung zu

$$\begin{aligned} \sum_{\rho, \sigma, \tau} R_{\tau\beta}^{\rho\nu'}(v') R_{\alpha\tau}^{\sigma\mu'}(v) R_{\mu\rho}^{\nu\sigma}(v - v') (-1)^{[p(\sigma) + p(\mu')]p(\rho)} \\ = \sum_{\rho, \sigma, \tau} R_{\rho\nu'}^{\sigma\mu'}(v - v') R_{\tau\beta}^{\nu\sigma}(v) R_{\alpha\tau}^{\mu\rho}(v') (-1)^{[p(\nu) + p(\sigma)]p(\rho)} \end{aligned} \quad (1.23)$$

erweitert. Sofern die R -Matrizen aber kompatibel zur gewählten Graduierung sind, d.h. daß sie die Bedingung

$$R_{\alpha\beta}^{\mu\nu}(v) = (-1)^{p(\alpha) + p(\beta) + p(\mu) + p(\nu)} R_{\alpha\beta}^{\mu\nu}(v) \quad (1.24)$$

¹Eine englische Übersetzung des Papers findet sich in [30].

erfüllen, kann man durch die Definition

$$\tilde{R}_{\alpha\beta}^{\mu\nu}(v) := (-1)^{p(\beta)+p(\nu)} R_{\alpha\beta}^{\mu\nu}(v) \quad (1.25)$$

die zusätzlichen Minuszeichen in (1.23) verschwinden lassen. Für die Matrix $\tilde{R}(v)$ ergibt sich wieder die gewöhnliche Yang-Baxter-Gleichung (1.17). Im folgenden wird stets mit derartigen Matrizen $\tilde{R}(v)$ gearbeitet, wobei die Tilde unterdrückt wird.

1.4 Allgemeinere Integrabilitätsbedingungen

Wie bereits erwähnt, ist die Realisierung der Yang-Baxter-Algebra zwar ein hinreichendes Kriterium für die Integrabilität eines Systemes, jedoch ist sie nicht notwendig. In [3] wird zum Beispiel gezeigt, daß bestimmte 16-Vertex-Modelle auch integrabel sein können, ohne daß deren R -Matrix eine Lösung der Yang-Baxter-Gleichung darstellt. Stattdessen können die dort angesprochenen Modelle über den ebenfalls in [7] beschriebenen Pair-Propagation-Ansatz gelöst werden. Das entscheidende Kriterium, mit dem die Integrabilität dort verbunden ist, sind sogenannte *Pair-Propagation-Gleichungen*. Sie stellen bei Vertex-Modellen offenbar ein allgemeineres Kriterium zur Integrabilität des Systems dar als die Yang-Baxter-Algebra. Alle zur Yang-Baxter-Algebra konformen Lösungen erfüllen gleichzeitig auch diese Pair-Propagation-Gleichungen.

Kapitel 2

Modelle mit $SU(n,m)$ -Symmetrie

In diesem Kapitel soll ein generalisiertes, integrables Modell für eindimensionale, quantenmechanische Systeme vorgestellt werden, die unter Operationen der in Abschnitt 1.2 eingeführten Symmetriegruppe $SU(n,m)$ invariant bleiben. Um die Eigenschaft der Integrabilität auszunutzen zu können, wird dieses auf ein äquivalentes zweidimensionales Gitter-Modell abgebildet, für welches ein Transfermatrix-Zugang möglich ist. Um mit Hilfe des äquivalenten Ersatzmodells Thermodynamik und Korrelationslängen zu berechnen, wird ein kommutierender Satz geeigneter Transfermatrizen, sogenannte *Quanten-Transfermatrizen*, eingeführt, deren Diagonalisierung im Rahmen des algebraischen Bethe-Ansatzes durchgeführt werden kann. Schließlich werden Beispiele für physikalische Modelle angegeben, die sich auf Spezialfälle dieses generalisierten Modells abbilden lassen.

2.1 Das Uimin-Sutherland-Modell

Ein generalisiertes quantenmechanisches Modell, dessen Hamilton-Operator und lokale Wechselwirkungen $SU(n,m)$ -Symmetrie besitzen, ist das sogenannte *Uimin-Sutherland-Modell*, das in [42] vorgeschlagen und dort für den Grundzustand und niedrigliegende Anregungen gelöst wurde.

2.1.1 Definition des Modells

Das Modell beschreibt eine eindimensionale Spinkette mit L Plätzen. Jeder Platz ist mit einer Spinvariable besetzt, die aus q Komponenten $\alpha = 1, \dots, q$ gewählt werden kann. Um die Graduierung des Vektorraumes zu berücksichtigen, besitzen n der Spinkomponenten „gerade“ Parität $p(\alpha) = 0$, während die restlichen m Komponenten „ungerade“ Parität $p(\alpha) = 1$ besitzen. Im folgenden wird die Parität durch geeignete Vorzeichenwahl $\epsilon_\alpha = +1$ für Komponenten der Parität $p(\alpha) = 0$ und $\epsilon_\alpha = -1$ für Parität $p(\alpha) = 1$ berücksichtigt. Außerdem werden stets periodische Randbedingungen angenommen, d.h. Platz $L + 1$ des Gitters entspricht Platz 1.

Jeder Zustand der Spinkette läßt sich angeben in der Basis von Tensorprodukten über Einteilchenzustände $\alpha_i = 1, \dots, q$ auf jedem der Plätze $i = 1, \dots, L$.

$$|\Psi\rangle = |\alpha_1 \dots \alpha_L\rangle = |\alpha_1\rangle \otimes \dots \otimes |\alpha_L\rangle \quad (2.1)$$

Auf den Plätzen seien Permutationsoperatoren $\pi_{i,i+1}$ definiert, die benachbarte Spins an den Positionen i und $i + 1$, $i = 1, \dots, L$, vertauschen und die Graduierung der Komponenten

berücksichtigen. $\pi_{i,i+1}$ wirkt auf die Basiszustände in folgender Weise

$$\pi_{i,i+1}|\alpha_1 \dots \alpha_i \alpha_{i+1} \dots \alpha_L\rangle = (-1)^{\xi_{\alpha_i \alpha_{i+1}}} |\alpha_1 \dots \alpha_{i+1} \alpha_i \dots \alpha_L\rangle \quad (2.2)$$

wobei $\xi_{\alpha_i \alpha_{i+1}} := p(\alpha_i)p(\alpha_{i+1})$, also $\xi_{\alpha_i \alpha_{i+1}} = 1$ für $\epsilon_{\alpha_i} = \epsilon_{\alpha_{i+1}} = -1$, $\xi_{\alpha_i \alpha_{i+1}} = 0$ in allen anderen Fällen.

Der Hamilton-Operator des Uimin-Sutherland-Modells ist definiert als Summe über alle Permutationsoperatoren nächster Nachbarn

$$\mathcal{H}_0 = \sum_{i=1}^L \pi_{i,i+1} \quad (2.3)$$

Um zu beweisen, daß der Hamilton-Operator (2.3) tatsächlich $SU(n,m)$ invariant ist, betrachtet man zunächst einen lokalen Permutationsoperator $\pi_{1,2}$ auf zwei Plätzen. Man zeigt für jede unitäre Matrix U aus $SU(n,m)$ die Symmetrie:

$$\begin{aligned} ((U \otimes_s U) \pi_{1,2} (U^{-1} \otimes_s U^{-1}))_{\gamma\delta}^{\alpha\beta} &= \sum_{\bar{\beta}, \bar{\delta}, \tilde{\beta}, \tilde{\delta}} U_{\bar{\beta}}^{\beta} U_{\tilde{\delta}}^{\delta} (-1)^{[p(\bar{\beta})+p(\beta)]p(\delta)} \delta_{\bar{\beta}\delta} \delta_{\tilde{\delta}\bar{\beta}} (-1)^{p(\bar{\beta})p(\tilde{\delta})} \\ &\quad \times (U^{-1})_{\alpha}^{\tilde{\beta}} (U^{-1})_{\gamma}^{\tilde{\delta}} (-1)^{[p(\alpha)+p(\tilde{\beta})]p(\tilde{\delta})} \\ &= \sum_{\bar{\beta}, \bar{\delta}} U_{\bar{\beta}}^{\beta} U_{\tilde{\delta}}^{\delta} (U^{-1})_{\alpha}^{\bar{\delta}} (U^{-1})_{\gamma}^{\bar{\beta}} \\ &\quad \times (-1)^{[p(\alpha)+p(\delta)]p(\bar{\beta})} (-1)^{p(\beta)p(\delta)} \\ &= \sum_{\bar{\beta}} \delta_{\alpha\delta} U_{\bar{\beta}}^{\beta} (U^{-1})_{\gamma}^{\bar{\beta}} (-1)^{p(\beta)p(\delta)} \\ &= \delta_{\alpha\delta} \delta_{\beta\gamma} (-1)^{p(\alpha)p(\beta)} \\ &= (\pi_{1,2})_{\gamma\delta}^{\alpha\beta} \end{aligned} \quad (2.4)$$

Die globale Symmetrie ergibt sich dann durch Anwendung von $\mathcal{S} := U_1 \otimes_s \dots \otimes_s U_L$ auf die globalen Operatoren. Man erhält schließlich

$$\mathcal{S} \mathcal{H}_0 \mathcal{S}^{-1} = \mathcal{H}_0 \quad (2.5)$$

Wie schon zu Beginn des Abschnittes erwähnt, läßt sich eine Reihe von physikalisch interessanten eindimensionalen, integralen Modellen der Festkörperphysik auf Spezialfälle des Uimin-Sutherland-Modells mit fest gewählten Graduierungen abbilden. Eine Auswahl möglicher Anwendungen wird in Abschnitt 2.2 diskutiert.

2.1.2 Verknüpfung mit dem Perk-Schultz-Modell

Nach [44, 45] ist es möglich, jedes d -dimensionale quantenmechanische Gittermodell auf ein $(d+1)$ -dimensionales klassisches Gittermodell abzubilden. Im Falle des Uimin-Sutherland-Modells ist das zugehörige zweidimensionale klassische Gegenstück eine Erweiterung des sogenannten *Perk-Schultz-Modells*, das zuerst in [34] beschrieben wurde. Es handelt sich beim Perk-Schultz-Modell um eine Generalisierung des gewöhnlichen 6-Vertex-Modells [7] für mehr als zwei Komponenten bzw. Spinzustände.

Das Perk-Schultz-Modell ist definiert auf einem zweidimensionalen Gitter mit $L \times N$ Gitterplätzen. Jeder lokalen Vertexkonfiguration ist eine feste Energie und ein entsprechendes Boltzmanngewicht zugeordnet. Es wird wieder von periodischen Randbedingungen ausgegangen, sowohl in Richtung von L , als auch in Richtung von N . Die Topologie des Gitters entspricht also der eines Torus.

Das Perk-Schultz-Modell [34] ist im isotropen Limes mit der R -Matrix

$$R_{\alpha\beta}^{\mu\nu}(v) = \delta_{\alpha\nu}\delta_{\mu\beta} + v \cdot (-1)^{\xi_{\alpha\mu}} \cdot \delta_{\alpha\beta}\delta_{\mu\nu} \quad (2.6)$$

verknüpft, wobei $v \in \mathbb{C}$ der sogenannte *Spektralparameter* ist. Die Zuordnung der Einträge der R -Matrix zu einer bestimmten Vertexkonfiguration erfolgt wie in Abbildung 1.1 der Einleitung. Insgesamt gibt es in diesem Modell $2q^2 - q$ Vertex-Konfigurationen, die einen von Null verschiedenen Beitrag liefern. Man kann sich leicht davon überzeugen, daß die $(q^2 \times q^2)$ -dimensionale R -Matrix aus (2.6) die Yang-Baxter-Gleichung (1.17) löst. Das Modell ist daher integrierbar und kann mit Hilfe eines geschachtelten Bethe-Ansatzes gelöst werden. Die zugehörige Reihentransfermatrix definiert man als

$$\mathcal{T}_\alpha^\beta(v) := \sum_{\{\mu\}} \prod_{i=1}^L R_{\alpha_i\beta_i}^{\mu_i\mu_{i+1}}(v) \quad (2.7)$$

Man beachte, daß die Indizes α und β auf der linken Seite als Vielfachindizes $\alpha = (\alpha_1 \dots \alpha_L)$ und $\beta = (\beta_1 \dots \beta_L)$ aufzufassen sind, und daß aufgrund der periodischen Randbedingung $\mu_{L+1} = \mu_1$ ist. In Abschnitt 1.3 wurde bereits gezeigt, daß damit eine Familie kommutierender Transfermatrizen vorliegt.

$$[\mathcal{T}(v), \mathcal{T}(v')] = 0 \quad \text{für alle } v, v' \in \mathbb{C} \quad (2.8)$$

Die Zustandssumme $Z_{L,N}$ der möglichen Konfigurationen des Gitters läßt sich mit Hilfe der Transfermatrix einfach ausdrücken als

$$Z_{L,N} = \text{Tr } \mathcal{T}^N(v) \quad (2.9)$$

wobei hier die Spur über einen q^L -dimensionalen Raum gebildet wird.

Die Transfermatrix $\mathcal{T}(v)$ geht für den sogenannten *Shift-Punkt* an der Stelle $v = 0$ in den Rechtsschiebeoperator über, der alle Einteilchenzustände einer gegebenen Spinkonfiguration einen Platz auf der Kette weiterschiebt

$$\mathcal{T}(0)|\alpha_1 \dots \alpha_L\rangle = |\alpha_L \alpha_1 \dots \alpha_{L-1}\rangle \quad (2.10)$$

Der zu einem Gittermodell zugehörige Hamilton-Operator wird definiert als erster Entwicklungsterm des natürlichen Logarithmus der Transfermatrix um den Shift-Punkt. Im Falle der Transfermatrix des Perk-Schultz-Modells (2.7) ergibt dies gerade den Hamilton-Operator des Uimin-Sutherland-Modells

$$\mathcal{H}_0 = \left. \frac{d}{dv} \ln \mathcal{T}(v) \right|_{v=0} = \sum_{i=1}^L \pi_{i,i+1} \quad (2.11)$$

Um dies zu zeigen, betrachtet man zunächst die Ableitung von $\mathcal{T}(v)$ an der Stelle $v = 0$. Nach der Produktregel ergibt sich

$$\left. \frac{d}{dv} \mathcal{T}_\alpha^\beta(v) \right|_{v=0} = \sum_{\{\mu\}} \sum_{i=1}^L R_{\alpha_1\beta_1}^{\mu_1\mu_2}(0) \cdots \underbrace{\left. \frac{d}{dv} R_{\alpha_i\beta_i}^{\mu_i\mu_{i+1}}(v) \right|_{v=0}}_{\text{Position } i} \cdots R_{\alpha_L\beta_L}^{\mu_L\mu_1}(0) \quad (2.12)$$

Unter Berücksichtigung, daß $R_{\alpha\beta}^{\mu\nu}(0) = \delta_{\alpha\nu}\delta_{\mu\beta}$ und $\left.\frac{d}{dv}R_{\alpha\beta}^{\mu\nu}(v)\right|_{v=0} = (-1)^{\xi_{\alpha\nu}}\delta_{\alpha\beta}\delta_{\mu\nu}$ ist, folgt

$$\begin{aligned}
\sum_{\mu_{i+1}} \left.\frac{d}{dv}R_{\alpha_i\beta_i}^{\mu_i\mu_{i+1}}(v)\right|_{v=0} R_{\alpha_{i+1}\beta_{i+1}}^{\mu_{i+1}\mu_{i+2}}(0) &= \sum_{\mu_{i+1}} (-1)^{\xi_{\alpha_i\mu_{i+1}}}\delta_{\alpha_i\beta_i}\delta_{\mu_i\mu_{i+1}}\delta_{\alpha_{i+1}\mu_{i+2}}\delta_{\mu_i\beta_{i+1}} \\
&= (-1)^{\xi_{\alpha_i\mu_i}}\delta_{\alpha_i\beta_i}\delta_{\mu_i\beta_{i+1}}\delta_{\alpha_{i+1}\mu_{i+2}} \\
&= \sum_{\mu_{i+1}} (-1)^{\xi_{\mu_i\mu_{i+1}}}\delta_{\alpha_i\mu_{i+1}}\delta_{\mu_{i+1}\beta_i}\delta_{\mu_i\beta_{i+1}}\delta_{\alpha_{i+1}\mu_{i+2}} \\
&= \sum_{\mu_{i+1}} \sum_{\rho_i} \sum_{\sigma_i} (-1)^{\xi_{\rho_i\sigma_i}}\delta_{\alpha_i\mu_{i+1}}\delta_{\mu_i\rho_i}\delta_{\rho_i\beta_{i+1}}\delta_{\mu_{i+1}\sigma_i}\delta_{\sigma_i\beta_i}\delta_{\alpha_{i+1}\mu_{i+2}} \\
&= \sum_{\mu_{i+1}} \sum_{\rho_i} \sum_{\sigma_i} R_{\alpha_i\rho_i}^{\mu_i\mu_{i+1}}(0) R_{\alpha_{i+1}\sigma_i}^{\mu_{i+1}\mu_{i+2}}(0) \cdot (-1)^{\xi_{\rho_i\sigma_i}} R_{\rho_i\sigma_i}^{\beta_i\beta_{i+1}}(0)
\end{aligned} \tag{2.13}$$

Damit folgt aus (2.12)

$$\begin{aligned}
\left.\frac{d}{dv}\mathcal{T}_\alpha^\beta(v)\right|_{v=0} &= \sum_{i=1}^L \sum_{\{\mu\}} \sum_{\rho_i} \sum_{\sigma_i} R_{\alpha_1\beta_1}^{\mu_1\mu_2}(0) \cdots R_{\alpha_i\rho_i}^{\mu_i\mu_{i+1}}(0) R_{\alpha_{i+1}\sigma_i}^{\mu_{i+1}\mu_{i+2}}(0) \cdots R_{\alpha_L\beta_L}^{\mu_L\mu_1}(0) \\
&\quad \times (-1)^{\xi_{\rho_i\sigma_i}} R_{\rho_i\sigma_i}^{\beta_i\beta_{i+1}}(0) \\
&= \sum_{i=1}^L \sum_{\rho_i} \sum_{\sigma_i} \mathcal{T}_\alpha^{(\beta_1 \dots \rho_i \sigma_i \dots \beta_L)}(0) \cdot (-1)^{\xi_{\rho_i\sigma_i}} \delta_{\rho_i\beta_{i+1}} \delta_{\sigma_i\beta_i} \\
&= \sum_{i=1}^L \sum_{\{\gamma\}} \mathcal{T}_\alpha^\gamma(0) \cdot (-1)^{\xi_{\beta_i\beta_{i+1}}} \mathbb{1}_{(\gamma_1 \dots \gamma_L)}^{(\beta_1 \dots \beta_{i+1}\beta_i \dots \beta_L)} \\
&= \sum_{i=1}^L (\mathcal{T}(0) \pi_{i,i+1})_\alpha^\beta \\
&= (\mathcal{T}(0) \sum_{i=1}^L \pi_{i,i+1})_\alpha^\beta \\
&= (\mathcal{T}(0) \mathcal{H}_0)_\alpha^\beta
\end{aligned} \tag{2.14}$$

Dieser Zusammenhang läßt sich auch graphisch darstellen, siehe hierzu die Abbildung 2.1. Aus (2.14) folgt der gesuchte Zusammenhang (2.11) des Hamiltonoperators des Uimin-Sutherland-Modells mit der Transfermatrix des Perk-Schultz-Modells.

Ausgehend von (2.8) betrachtet man

$$0 = \left.\frac{\partial}{\partial v'} [\mathcal{T}(v'), \mathcal{T}(v)]\right|_{v'=0} \stackrel{(2.14)}{=} [\mathcal{T}(0)\mathcal{H}_0, \mathcal{T}(v)] \stackrel{(2.8)}{=} \mathcal{T}(0) [\mathcal{H}_0, \mathcal{T}(v)] \tag{2.15}$$

Damit ist gezeigt, daß der Hamilton-Operator des Uimin-Sutherland-Modells mit der Transfermatrix $\mathcal{T}(v)$ bei beliebiger Wahl des Spektralparameters v stets vertauscht.

$$[\mathcal{T}(v), \mathcal{H}_0] = 0 \quad \text{für alle } v \in \mathbb{C} \tag{2.16}$$

$$\begin{aligned}
 \mathcal{T}'(0) &= \sum_{i=1}^L \text{---} \begin{array}{c} \beta_1 \\ | \\ \alpha_1 \end{array} \text{---} \dots \text{---} \begin{array}{c} \beta_{i-1} \\ | \\ \alpha_{i-1} \end{array} \text{---} \begin{array}{c} \beta_i \\ | \\ \alpha_i \end{array} \text{---} \begin{array}{c} \beta_{i+1} \\ | \\ \alpha_{i+1} \end{array} \text{---} \dots \text{---} \begin{array}{c} \alpha_L \\ | \\ \alpha_L \end{array} \\
 &= \sum_{i=1}^L \text{---} \begin{array}{c} \beta_1 \\ | \\ \alpha_1 \end{array} \text{---} \dots \text{---} \begin{array}{c} \beta_{i-1} \\ | \\ \alpha_{i-1} \end{array} \text{---} \begin{array}{c} \beta_i \\ | \\ \alpha_i \end{array} \text{---} \begin{array}{c} \beta_{i+1} \\ | \\ \alpha_{i+1} \end{array} \text{---} \dots \text{---} \begin{array}{c} \alpha_L \\ | \\ \alpha_L \end{array} \\
 &\quad \quad \quad \begin{array}{c} \beta_i \quad \beta_{i+1} \\ \diagdown \quad \diagup \\ \pi_{i,i+1} \\ \diagup \quad \diagdown \end{array}
 \end{aligned}$$

Abbildung 2.1: Graphische Darstellung der Ableitung der Transfermatrix am Shift-Punkt $v = 0$. Geschlossene Linien zwischen zwei Spinvariablen liefern nur dann einen Beitrag, wenn die Spins übereinstimmen. Im Hilfsraum gelten periodische Randbedingungen. Im zweiten Schritt wurde jeder Summand in einen Permutationsoperator $\pi_{i,i+1}$ und einen Rechtsschiebeoperator aufgeteilt.

Dies ermöglicht die simultane Diagonalisierung von Hamilton-Operator und Transfermatrix. Mit der Diagonalisierung der Transfermatrix im Rahmen eines geschachtelten Bethe-Ansatzes sind damit auch die Eigenzustände des Hamilton-Operators bekannt. Die vollständige Berechnung der Eigenzustände der Transfermatrix des Perk-Schultz-Modelles wurde in [39] durchgeführt.

An dieser Stelle ist anzumerken, daß man aus höheren Ableitungen des Logarithmus der Transfermatrix am Shiftpunkt

$$\mathcal{Y}_n = \left. \frac{d^n}{dv^n} \ln \mathcal{T}(v) \right|_{v=0} \quad \text{mit } n \in \mathbb{N} \quad (2.17)$$

unendlich viele weitere Operatoren erhalten kann, die mit $\mathcal{T}(0)$ vertauschen.

Im Zusammenhang der vorliegenden Arbeit sind allerdings weniger die Eigenzustände der Transfermatrix oder des Hamilton-Operators selbst von Interesse, sondern vielmehr die Thermodynamik des Systems bei endlichen Temperaturen. Um das Problem daher auf eine Form zu bringen, in der freie Energie und Korrelationslängen berechnet werden können, definiert man zusätzlich eine neue R -Matrix $\overline{R}(v)$ für einen um 90 Grad gegen den Uhrzeigersinn gedrehten Vertex (siehe Abbildung 2.2)

$$\overline{R}_{\alpha\beta}^{\mu\nu}(v) = R_{\nu\mu}^{\alpha\beta}(v) \quad (2.18)$$

Auch die Matrix $\overline{R}(v)$ ist eine Lösung der Yang-Baxter-Gleichung. Man bildet damit analog zu (2.7) die Reihen-Transfermatrix

$$\overline{\mathcal{T}}_{\alpha}^{\beta}(v) = \sum_{\{\mu\}} \prod_{i=1}^L \overline{R}_{\alpha_i\beta_i}^{\mu_i\mu_{i+1}}(v) \quad (2.19)$$

$$\bar{R}_{\alpha\beta}^{\mu\nu}(v) = \begin{array}{c} \beta \\ \uparrow \\ \mu \leftarrow \nu \\ \downarrow \\ \alpha \end{array} \quad = \quad \begin{array}{c} \mu \\ \uparrow \\ \alpha \rightarrow \beta \\ \downarrow \\ \nu \end{array}$$

Abbildung 2.2: Definition der R -Matrix $\bar{R}(v)$ für einen um 90 Grad gegen den Uhrzeigersinn rotierten Vertex

Am Shift-Punkt $v = 0$ wird aus $\bar{\mathcal{T}}(v)$ gerade ein Operator, der alle Spins auf der Kette um einen Platz nach links verschiebt

$$\bar{\mathcal{T}}(0)|\alpha_1 \dots \alpha_L\rangle = |\alpha_2 \dots \alpha_L \alpha_1\rangle \quad (2.20)$$

Die Transfer-Matrix $\bar{\mathcal{T}}(v)$ hängt ebenfalls in natürlicher Weise mit dem Hamilton-Operator des Uimin-Sutherland-Modelles zusammen. Mit einer zu (2.14) analogen Rechnung bestätigt man hier die Gleichung

$$\left. \frac{d}{dv} \bar{\mathcal{T}}(v) \right|_{v=0} = \bar{\mathcal{T}}(0) \mathcal{H}_0 \quad (2.21)$$

und damit schließlich

$$\mathcal{H}_0 = \left. \frac{d}{dv} \ln \bar{\mathcal{T}}(v) \right|_{v=0} = \sum_{i=1}^L \pi_{i,i+1} \quad (2.22)$$

Auch $\bar{\mathcal{T}}(v)$ vertauscht aufgrund von $[\bar{\mathcal{T}}(v), \bar{\mathcal{T}}(v')] = 0$ stets mit dem Hamilton-Operator des Uimin-Sutherland-Modells

$$[\bar{\mathcal{T}}(v), \mathcal{H}_0] = 0 \quad \text{für alle } v \in \mathbb{C} \quad (2.23)$$

Es sei allerdings angemerkt, daß zwei Transfermatrizen $\mathcal{T}(v)$ und $\bar{\mathcal{T}}(v')$ für beliebige $v, v' \in \mathbb{C}$ im allgemeinen nicht miteinander vertauschen.

2.1.3 Zustandssumme

Die Zustandssumme des Uimin-Sutherland-Modelles

$$Z = \text{Tr} e^{-\beta \mathcal{H}_0} \quad (2.24)$$

kann nun mit Hilfe der beiden Transfermatrizen $\mathcal{T}(v)$ und $\bar{\mathcal{T}}(v)$ ausgedrückt werden. Unter Ausnutzung von (2.11) und (2.22) erhält man folgende Entwicklung in der Nähe des Shift-Punktes

$$\ln \mathcal{T}(v) = \ln \mathcal{T}(0) + \mathcal{H}_0 \cdot v + \mathcal{O}(v^2) \quad (2.25a)$$

$$\ln \bar{\mathcal{T}}(v) = \ln \bar{\mathcal{T}}(0) + \mathcal{H}_0 \cdot v + \mathcal{O}(v^2) \quad (2.25b)$$

Durch Potenzieren unter Ausnutzung der Vertauschungsrelationen (2.15) und (2.23) folgt daraus die näherungsweise Darstellung der beiden Transfermatrizen $\mathcal{T}(v)$ und $\bar{\mathcal{T}}(v)$

$$\mathcal{T}(v) = \mathcal{T}(0) e^{\mathcal{H}_0 \cdot v + \mathcal{O}(v^2)} \quad (2.26a)$$

$$\overline{\mathcal{T}}(v) = \overline{\mathcal{T}}(0) e^{\mathcal{H}_0 \cdot v + \mathcal{O}(v^2)} \quad (2.26b)$$

Multipliziert man unter Berücksichtigung von (2.23) die letzten beiden Gleichungen miteinander, so erhält man

$$\mathcal{T}(v)\overline{\mathcal{T}}(v) = \mathcal{T}(0)\overline{\mathcal{T}}(0) e^{2v\mathcal{H}_0 + \mathcal{O}(v^2)} = e^{2v\mathcal{H}_0 + \mathcal{O}(v^2)} \quad (2.27)$$

wobei im letzten Schritt ausgenutzt wurde, daß sich die Wirkungen des Rechts- und des Linkschiebeoperators gegenseitig aufheben. Man wertet nun (2.27) an der Stelle $v = -\beta/N$ aus. Dabei ist β die inverse Temperatur, und $N \in \mathbb{N}$ eine neu eingeführte Größe, die sogenannte *Trotterzahl*. Mit der Wahl $N \gg 1$ ist gewährleistet, daß β/N stets klein gegen eins bleibt. Damit wird (2.27) zu

$$\mathcal{T}(-\beta/N)\overline{\mathcal{T}}(-\beta/N) = e^{-\frac{2\beta}{N}\mathcal{H}_0 + \mathcal{O}((\beta/N)^2)} \quad (2.28)$$

Für große N entspricht die Spur über (2.28) bis auf eine Potenz $N/2$ im wesentlichen bereits der gesuchten Zustandssumme (2.24). Speziell im Limes $N \rightarrow \infty$ gilt

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \text{Tr}(\mathcal{T}(-\beta/N)\overline{\mathcal{T}}(-\beta/N))^{N/2} = \lim_{N \rightarrow \infty} \text{Tr}(e^{-\frac{2\beta}{N}\mathcal{H}_0 + \mathcal{O}((\beta/N)^2)})^{N/2} = \text{Tr} e^{-\beta\mathcal{H}_0} \quad (2.29)$$

Die Zustandssumme des Uimin-Sutherland-Modelles läßt sich also auf folgende Weise darstellen:

$$Z = \text{Tr} e^{-\beta\mathcal{H}_0} = \lim_{N \rightarrow \infty} \text{Tr}(\mathcal{T}(u)\overline{\mathcal{T}}(u))^{N/2} \quad \text{mit } u = -\beta/N \quad (2.30)$$

Dies ist die *Trotter-Suzuki-Zerlegung* der Zustandssumme. Vergleicht man dieses Ergebnis mit der Zustandssumme des gewöhnlichen Perk-Schultz-Modells (2.9), so zeigt sich, daß (2.30) offenbar die Zustandssumme eines erweiterten Perk-Schultz-Modells im Limes $N \rightarrow \infty$ ist, bei dem im Gitter abwechselnd Schichten mit „normalen“ Vertexgewichten $R(u)$ und „gedrehten“ Vertexgewichten $\overline{R}(u)$ in Richtung von N gestapelt werden.

2.1.4 Die Quanten-Transfermatrix

Um die in (2.30) gegebene Zustandssumme des beschriebenen „gestapelten“ Perk-Schultz-Gitters

$$Z_{L,N} = \text{Tr}(\mathcal{T}(u)\overline{\mathcal{T}}(u))^{N/2} \quad (2.31)$$

für endliche Kettenlänge L und endliche Trotterzahl N einfacher berechnen zu können, betrachtet man das Gitter, welches in Abbildung 2.3 dargestellt ist, in „vertikaler“ Richtung. Unter diesem Blickwinkel ergibt sich eine neue Transfermatrix, die der „vertikalen“ Transferrichtung angepaßt ist. Diese Matrix nennt man *Quanten-Transfermatrix* \mathcal{T}^{QTM} , da sie für das quantenmechanische System das Analogon zu Transfermatrizen klassischer Gittersysteme darstellt. Die Zustandssumme des betrachteten Gitters (2.31) läßt sich damit ausdrücken als

$$Z_{L,N} = \text{Tr}(\mathcal{T}^{\text{QTM}}(0))^L \quad (2.32)$$

Wie im klassischen Fall hat man also bei dieser Wahl der Transferrichtung wieder nur Produkte gleichartiger Transfermatrizen zu betrachten. Der Aufbau der Quanten-Transfermatrix ist aus Abbildung 2.3 direkt ablesbar. Sie ist wechselweise zusammengesetzt aus normalen R -Matrizen und solchen, deren zugehöriger Vertex um 90 Grad im Uhrzeigersinn gedreht ist. Diese „gedrehten“ R -Matrizen sind definiert als

$$\tilde{R}_{\alpha\beta}^{\mu\nu}(v) := R_{\mu\nu}^{\beta\alpha}(-v) \quad (2.33)$$

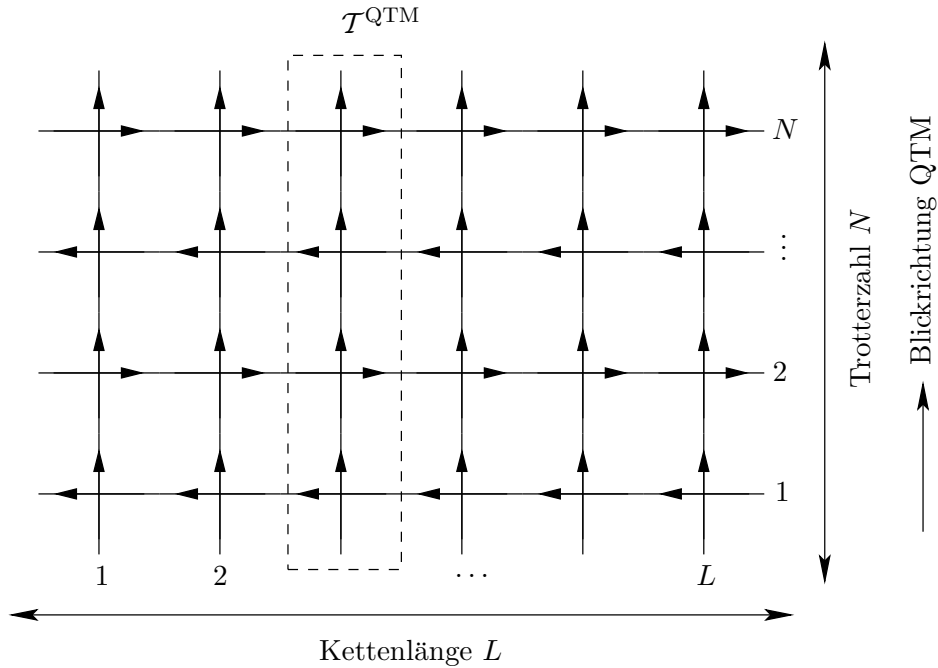


Abbildung 2.3: Gitter des „gestapelten“ Perk-Schultz-Modells. Die Zahl der Gitterplätze in horizontaler Richtung L ist identisch mit der Kettenlänge der zugrundeliegenden Spinkette. In vertikaler Richtung entspricht die Ausdehnung des Gitters der Trotterzahl N . Die alternierenden Reihen korrespondieren mit den Transfermatrizen $\mathcal{T}(u)$ und $\overline{\mathcal{T}}(u)$, während die Spalten (siehe gestrichelte Box) jeweils mit der neu eingeführten Quanten-Transfermatrix $\mathcal{T}^{\text{QTM}}(0)$ zusammenhängen.

$$\tilde{R}_{\alpha\beta}^{\mu\nu}(v) = \begin{array}{c} \beta \\ | \\ \mu \text{ --- } v \\ | \\ \alpha \end{array} = \begin{array}{c} \nu \\ | \\ \beta \text{ --- } -v \\ | \\ \mu \end{array}$$

Abbildung 2.4: R -Matrix $\tilde{R}(v)$ für einen um 90 Grad im Uhrzeigersinn rotierten Vertex

Siehe dazu auch Abbildung 2.4. Die Quanten-Transfermatrix hat somit die Form

$$(\mathcal{T}^{\text{QTM}})_\alpha^\beta(0) := \sum_{\{\mu\}} \prod_{j=1}^{N/2} R_{\alpha_{2j-1}\beta_{2j-1}}^{\mu_{2j-1}\mu_{2j}}(u) \widetilde{R}_{\alpha_{2j}\beta_{2j}}^{\mu_{2j}\mu_{2j+1}}(-u) \quad (2.34)$$

Weiterhin wird ein neuer Spektralparameter v eingeführt, der aus (2.34) eine Familie von kommutierenden Quanten-Transfermatrizen erzeugt, und es letztlich ermöglicht, $\mathcal{T}^{\text{QTM}}(0)$ auf dem Wege des Bethe-Ansatzes zu diagonalisieren. Die allgemeine Form der Quanten-Transfermatrix bei beliebigem Spektralparameter lautet dann

$$(\mathcal{T}^{\text{QTM}})_\alpha^\beta(v) := \sum_{\{\mu\}} \prod_{j=1}^{N/2} R_{\alpha_{2j-1}\beta_{2j-1}}^{\mu_{2j-1}\mu_{2j}}(iv+u) \widetilde{R}_{\alpha_{2j}\beta_{2j}}^{\mu_{2j}\mu_{2j+1}}(iv-u) \quad (2.35)$$

Die Matrix ist von der Dimension $q^N \times q^N$. Der Nachweis, daß bei dieser Definition tatsächlich $[\mathcal{T}^{\text{QTM}}(v), \mathcal{T}^{\text{QTM}}(v')] = 0$ für alle $v, v' \in \mathbb{C}$ erfüllt ist, wird in Abschnitt 2.1.8 erbracht. Physikalisch relevant ist die Quanten-Transfermatrix nur am speziellen Punkt $v = 0$.

Die Zustandssumme des Uimin-Sutherland-Modelles (2.30) läßt sich mit Hilfe der Quanten-Transfermatrix schließlich schreiben als

$$Z = \lim_{N \rightarrow \infty} \text{Tr} (\mathcal{T}^{\text{QTM}}(0))^L \quad (2.36)$$

Die in diesem Abschnitt ausgenutzte Erweiterung der Transfermatrix-Methode auf quantenmechanische Systeme mit Hilfe einer Quanten-Transfermatrix geht zurück auf [46, 25].

2.1.5 Freie Energie pro Gitterplatz

Im thermodynamischen Limes, d.h. für Kettenlänge $L \rightarrow \infty$, kann man mit Hilfe von (2.36) nun die freie Energie pro Gitterplatz berechnen

$$\begin{aligned} f &= - \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{L\beta} \ln Z \\ &= - \frac{1}{\beta} \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{L} \lim_{N \rightarrow \infty} \ln \text{Tr} (\mathcal{T}^{\text{QTM}}(0))^L \\ &= - \frac{1}{\beta} \lim_{N \rightarrow \infty} \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{L} \ln \text{Tr} (\mathcal{T}^{\text{QTM}}(0))^L \end{aligned} \quad (2.37)$$

Im letzten Schritt wurde vorausgesetzt, daß die Grenzwertprozesse $L \rightarrow \infty$ und $N \rightarrow \infty$ vertauschen, und insbesondere die Grenzwerte existieren. Dies läßt sich jedoch für recht allgemeine Systeme rechtfertigen, siehe dazu [47]. Um nun den Limes $L \rightarrow \infty$ in (2.37) durchführen zu können, berechnet man zunächst die Spur in der Basis der Eigenzustände der Quanten-Transfermatrix

$$\text{Tr} (\mathcal{T}^{\text{QTM}}(0))^L = \sum_{i=0}^{q^N-1} \Lambda_i^L(0) \quad (2.38)$$

wobei $\Lambda_i(0)$ für $i = 0, \dots, q^N - 1$ die Eigenwerte der Quanten-Transfermatrix bezeichnen sollen, sortiert nach absteigendem Betrag. Für alle Trotterzahlen N existiert zwischen dem größten und den nächstführenden Eigenwerten der Quanten-Transfermatrix eine Lücke [43].

Im folgenden soll der nichtentartete, größte Eigenwert mit $\Lambda_{\max}(0) \equiv \Lambda_0(0)$ bezeichnet werden. Mit Hilfe von (2.38) folgt dann im thermodynamischen Limes

$$\begin{aligned}
\lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{L} \ln \text{Tr} (\mathcal{T}^{\text{QTM}}(0))^L &= \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{L} \ln \left(\Lambda_{\max}^L(0) + \sum_{i=1}^{q^N-1} \Lambda_i^L(0) \right) \\
&= \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{L} \ln \left(\Lambda_{\max}^L(0) \left[1 + \sum_{i=1}^{q^N-1} \left(\frac{\Lambda_i(0)}{\Lambda_{\max}(0)} \right)^L \right] \right) \\
&= \ln \Lambda_{\max}(0) + \underbrace{\lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{L} \ln \left[1 + \sum_{i=1}^{q^N-1} \underbrace{\left(\frac{\Lambda_i(0)}{\Lambda_{\max}(0)} \right)^L}_{<1} \right]}_{\rightarrow 0} \\
&= \ln \Lambda_{\max}(0)
\end{aligned} \tag{2.39}$$

Setzt man dies nun in (2.37) ein, so erhält man schließlich

$$f = -\frac{1}{\beta} \lim_{N \rightarrow \infty} \ln \Lambda_{\max}(0) \tag{2.40}$$

Die freie Energie pro Gitterplatz ist also im thermodynamischen Limes allein bestimmt durch den größten Eigenwert der Quanten-Transfermatrix im *Trotterlimes* $N \rightarrow \infty$.

2.1.6 Korrelationslängen

In ähnlicher Weise lassen sich mit Hilfe der nächstführenden Eigenwerte $\Lambda_i(0)$ Korrelationsfunktionen und -längen der betrachteten Spinkette berechnen. Man betrachtet eine Zwei-Punkt-Korrelationsfunktion

$$\langle \sigma_1 \sigma_{1+r_1} \rangle = \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{Z} \text{Tr} \left\{ e^{-\beta \mathcal{H}_0} \sigma_1 \sigma_{1+r} \right\} \tag{2.41}$$

für lokale Operatoren σ_i der Art

$$\sigma_i = \sum_{\alpha=1}^q \sigma(\alpha) n_{i,\alpha} \tag{2.42}$$

mit beliebigen Einträgen $\sigma(\alpha)$ für jede Spinkomponente, wobei

$$n_{i,\alpha} = \begin{cases} 1 & \text{wenn Gitterplatz } i \text{ mit Spin } \alpha \text{ besetzt ist} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \tag{2.43}$$

Mit Hilfe von (2.29) kann man (2.41) umformen in

$$\langle \sigma_1 \sigma_{1+r} \rangle = \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{Z} \lim_{N \rightarrow \infty} \text{Tr} \left\{ (\mathcal{T}(u) \overline{\mathcal{T}}(u))^{N/2} \sigma_1 \sigma_{1+r} \right\} \tag{2.44}$$

Der letzte Term mit der Spur beschreibt dabei die Zustandssumme eines Gitters, das ähnlich wie Abbildung 2.3 aufgebaut ist. Allerdings werden in diesem Fall am unteren Ende des Gitters an den Positionen 1 und $1+r$ die lokalen Operatoren σ_1 und σ_{1+r} eingefügt. Dreht

man anschließend die Transferrichtung des Gitters, um mit der Quanten-Transfermatrix zu arbeiten, erhält man hier den Ausdruck

$$\mathrm{Tr} \left\{ (\mathcal{T}(u)\overline{\mathcal{T}}(u))^{N/2} \sigma_1 \sigma_{1+r} \right\} = \mathrm{Tr} \left\{ \sigma (\mathcal{T}^{\mathrm{QTM}})^r \sigma (\mathcal{T}^{\mathrm{QTM}})^{L-r} \right\} \quad (2.45)$$

wobei σ ohne Index hier eine diagonale Matrix mit Einträgen $\sigma_{\mu\mu'} = \sigma(\mu)\delta_{\mu\mu'}$ bezeichnet. Bildet man nun die Spur in der vollständigen Basis der Eigenvektoren der Quanten-Transfermatrix $|\Psi_i\rangle$ (nach absteigender Größe der zugehörigen Eigenwerte Λ_i sortiert) und fügt zudem an geeigneter Stelle die Identität

$$\mathbb{1} = \sum_i |\Psi_i\rangle\langle\Psi_i| \quad (2.46)$$

ein, so erhält man

$$\begin{aligned} \mathrm{Tr} \left\{ \sigma (\mathcal{T}^{\mathrm{QTM}})^r \sigma (\mathcal{T}^{\mathrm{QTM}})^{L-r} \right\} &= \sum_{i,j} \langle\Psi_i|\sigma (\mathcal{T}^{\mathrm{QTM}})^r |\Psi_j\rangle\langle\Psi_j|\sigma (\mathcal{T}^{\mathrm{QTM}})^{L-r} |\Psi_i\rangle \\ &= \sum_{i,j} |\langle\Psi_i|\sigma|\Psi_j\rangle|^2 \Lambda_j^r \Lambda_i^{L-r} \\ &= \Lambda_0^{N-r} \sum_{i,j} |\langle\Psi_i|\sigma|\Psi_j\rangle|^2 \Lambda_j^r (\Lambda_i/\Lambda_0)^{L-r} \end{aligned} \quad (2.47)$$

Im Limes $L \rightarrow \infty$ dominiert in der Summe über i dabei der Summand zu $i = 0$, da $\Lambda_i < \Lambda_0$ für alle $i \neq 0$. Die Zustandssumme

$$\begin{aligned} Z &= \lim_{N \rightarrow \infty} \mathrm{Tr} (\mathcal{T}^{\mathrm{QTM}})^L \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \Lambda_0^L \left(1 + \sum_{i \neq 0} (\Lambda_i/\Lambda_0)^L \right) \end{aligned} \quad (2.48)$$

wird für $L \rightarrow \infty$ allein dominiert durch Λ_0^L . Daraus folgt, daß sich die Korrelationsfunktion (2.41) im thermodynamischen Limes schreiben läßt als

$$\langle \sigma_1 \sigma_{1+r} \rangle = \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_j |\langle \Psi_0 | \sigma | \Psi_j \rangle|^2 (\Lambda_j / \Lambda_{\max})^r \quad (2.49)$$

wobei $\Lambda_{\max} \equiv \Lambda_0$. Man definiert nun Korrelationslängen

$$\xi_i := \left(\ln \frac{\Lambda_{\max}}{\Lambda_i} \right)^{-1} \quad (2.50)$$

die den exponentiellen Abfall der Korrekturterme in der Korrelationsfunktion beschreiben, da sich (2.49) schreiben läßt als

$$\langle \sigma_1 \sigma_{1+r} \rangle = \lim_{N \rightarrow \infty} \left\{ |\langle \Psi_0 | \sigma | \Psi_0 \rangle|^2 + \sum_{i=1}^{q^N-1} |\langle \Psi_0 | \sigma | \Psi_i \rangle|^2 e^{-r/\xi_i} \right\} \quad (2.51)$$

Komplexe Eigenwerte Λ_i führen offensichtlich zu Oszillationen in der Korrelationsfunktion.

2.1.7 Berücksichtigung äußerer Felder

Unter Erhaltung der Integrabilität kann im vorgestellten Quanten-Transfermatrix-Formalismus auch der Einfluß bestimmter äußerer Felder, die die Symmetrie nicht verletzen, und chemischer Potentiale mitberücksichtigt werden. Zusätzlich zum Hamilton-Operator \mathcal{H}_0 betrachtet man dann einen Beitrag \mathcal{H}_{ext} . Man erhält

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_{\text{ext}} = \mathcal{H}_0 - \sum_{i=1}^L \sum_{\alpha=1}^q \mu_{\alpha} n_{i,\alpha} \quad (2.52)$$

wobei der Operator $n_{i,\alpha}$ wieder wie in (2.43) definiert ist. Die Zustandssumme des Uimin-Sutherland-Modelles (2.30) ändert sich dann zu

$$\begin{aligned} Z &= \text{Tr} e^{-\beta(\mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_{\text{ext}})} = \lim_{N \rightarrow \infty} \text{Tr} \left\{ (\mathcal{T}(u) \overline{\mathcal{T}}(u))^{N/2} e^{-\beta \mathcal{H}_{\text{ext}}} \right\} \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \text{Tr} \left\{ (\mathcal{T}(u) \overline{\mathcal{T}}(u))^{N/2} \prod_{i=1}^L e^{\beta \sum_{\alpha=1}^q \mu_{\alpha} n_{i,\alpha}} \right\} \end{aligned} \quad (2.53)$$

Im äquivalenten zweidimensionalen Gittermodell (Abbildung 2.3) bedeutet dies, daß statt der strikt periodischen Randbedingung in Trotterrichtung nunmehr ein neuer horizontaler Vertex-Zweig am Rand angehängt wird, dessen lokale Boltzmanngewichte am jeweiligen Platz i gerade durch $e^{\beta \sum_{\alpha=1}^q \mu_{\alpha} n_{i,\alpha}}$ gegeben sind. Man spricht dann von „gedrehten“ Randbedingungen. Betrachtet man in vertikaler Richtung die sich nun ergebende Quanten-Transfermatrix, so erhält man durch die geänderte Randbedingung lediglich einen Zusatzterm. Für das Uimin-Sutherland-Modell ergibt sich unter Berücksichtigung von \mathcal{H}_{ext}

$$(\mathcal{T}_{\text{ext}}^{\text{QTM}})_{\alpha}^{\beta}(v) = \sum_{\{\nu\}} \prod_{j=1}^{N/2} R_{\alpha_{2j-1}\beta_{2j-1}}^{\nu_{2j-1}\nu_{2j}}(iv+u) \tilde{R}_{\alpha_{2j}\beta_{2j}}^{\nu_{2j}\nu_{2j+1}}(iv-u) e^{\beta \mu_{\nu}} \quad (2.54)$$

Die neue Quantentransfermatrix $\mathcal{T}_{\text{ext}}^{\text{QTM}}(v)$ hat die gleichen Eigenschaften, wie die gewöhnliche Quanten-Transfermatrix $\mathcal{T}^{\text{QTM}}(v)$.

2.1.8 Eigenschaften der Quanten-Transfermatrix

In diesem Abschnitt sollen einige Eigenschaften der Quanten-Transfermatrix untersucht werden, die in den späteren Berechnungen eine Rolle spielen.

Vertauschungsrelation

Quanten-Transfermatrizen zu verschiedenen Spektralparametern vertauschen, analog zu gewöhnlichen Transfermatrizen, stets miteinander

$$[\mathcal{T}^{\text{QTM}}(v), \mathcal{T}^{\text{QTM}}(v')] = 0 \quad \text{für alle } v, v' \in \mathbb{C} \quad (2.55)$$

Um dies zu beweisen, betrachtet man zunächst die Yang-Baxter-Gleichung für Vertexgewichte $R(v)$ und für $\tilde{R}(v)$, wobei letztere durch Drehung und anschließende Ersetzung $u \rightarrow -v$ und $v \rightarrow u - v$ aus der ersten hervorgeht. Der Zusammenhang ist in Abbildung 2.5 gezeigt. Die

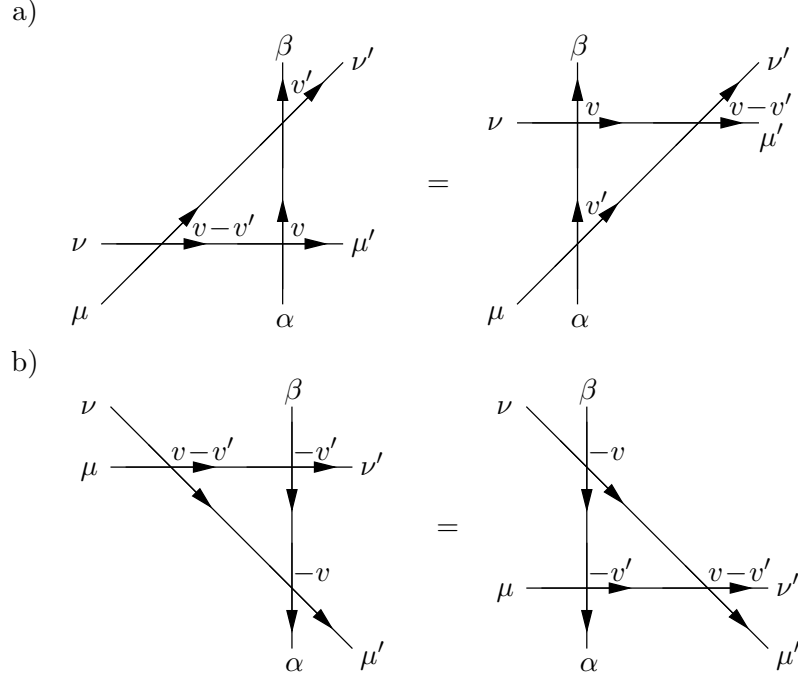


Abbildung 2.5: a) Yang-Baxter-Gleichung für Vertexgewichte $R(v)$. b) Yang-Baxter-Gleichung für Vertexgewichte $\tilde{R}(v)$. Letztere Gleichung geht durch Ersetzung $u \rightarrow -v$ und $v \rightarrow u - v$ und Drehung der Blickrichtung um 90 Grad im Uhrzeigersinn aus a) hervor.

Gleichungen lauten

$$\sum_{\rho, \sigma, \tau} R_{\tau\beta}^{\rho\nu'}(v') R_{\alpha\tau}^{\sigma\mu'}(v) R_{\mu\rho}^{\nu\sigma}(v - v') = \sum_{\rho, \sigma, \tau} R_{\rho\nu'}^{\sigma\mu'}(v - v') R_{\tau\beta}^{\nu\sigma}(v) R_{\alpha\tau}^{\mu\rho}(v') \quad (2.56a)$$

$$\sum_{\rho, \sigma, \tau} \tilde{R}_{\tau\beta}^{\rho\nu'}(v') \tilde{R}_{\alpha\tau}^{\sigma\mu'}(v) \tilde{R}_{\sigma\nu}^{\mu\rho}(v' - v) = \sum_{\rho, \sigma, \tau} \tilde{R}_{\mu'\sigma}^{\rho\nu'}(v' - v) \tilde{R}_{\tau\beta}^{\nu\sigma}(v) \tilde{R}_{\alpha\tau}^{\mu\rho}(v') \quad (2.56b)$$

Auffällig ist dabei, daß beide Gleichungen mit derselben Matrix $R(u - v)$ untereinander verflochten sind. Aus der Definition der Matrix $\tilde{R}(v)$ sowie aus Abbildung 2.5 geht nämlich hervor, daß Gleichung (2.56b) auch geschrieben werden kann als

$$\sum_{\rho, \sigma, \tau} \tilde{R}_{\tau\beta}^{\rho\nu'}(v') \tilde{R}_{\alpha\tau}^{\sigma\mu'}(v) R_{\mu\rho}^{\nu\sigma}(v - v') = \sum_{\rho, \sigma, \tau} R_{\rho\nu'}^{\sigma\mu'}(v - v') \tilde{R}_{\tau\beta}^{\nu\sigma}(v) \tilde{R}_{\alpha\tau}^{\mu\rho}(v') \quad (2.57)$$

Damit ist auch für die Quanten-Transfermatrix der aus Abschnitt 1.3 bekannte Beweis für die Vertauschbarkeit zweier Transfermatrizen anwendbar. Das Produkt zweier Quanten-Transfermatrizen $\mathcal{T}^{\text{QTM}}(v')\mathcal{T}^{\text{QTM}}(v) =: \mathcal{T}'\mathcal{T}$ läßt sich graphisch darstellen als

$$(\mathcal{T}'\mathcal{T})_{\alpha}^{\beta} = \begin{array}{c} \begin{array}{c} \beta_1 \quad \beta_2 \\ \uparrow \quad \uparrow \\ \text{---} \text{---} \text{---} \\ \uparrow \quad \downarrow \\ \alpha_1 \quad \alpha_2 \end{array} \\ \text{---} \text{---} \text{---} \\ \begin{array}{c} \beta_{N-1} \quad \beta_N \\ \uparrow \quad \uparrow \\ \text{---} \text{---} \text{---} \\ \uparrow \quad \downarrow \\ \alpha_{N-1} \quad \alpha_N \end{array} \end{array} \quad (2.58)$$

Es ist nun möglich, an einer beliebigen Stelle der Kette

$$\mathbb{1} = R(i(v - v'))R^{-1}(i(v - v')) = \left[\begin{array}{c} \text{---} \\ \diagup \quad \diagdown \\ \text{---} \\ \diagdown \quad \diagup \\ \text{---} \end{array} \right]^{-1} \quad (2.59)$$

im Hilfsraum einzufügen.

$$(T'T)_{\alpha}^{\beta} = \left[\begin{array}{c} \text{---} \\ \diagup \quad \diagdown \\ \text{---} \\ \diagdown \quad \diagup \\ \text{---} \end{array} \right]^{-1} \begin{array}{c} \beta_1 \quad \beta_2 \quad \dots \quad \beta_{N-1} \quad \beta_N \\ \uparrow \quad \downarrow \quad \dots \quad \uparrow \quad \downarrow \\ \text{---} \quad \text{---} \quad \dots \quad \text{---} \quad \text{---} \\ \uparrow \quad \downarrow \quad \dots \quad \uparrow \quad \downarrow \\ \alpha_1 \quad \alpha_2 \quad \dots \quad \alpha_{N-1} \quad \alpha_N \end{array} \quad (2.60)$$

Aufgrund von (2.56a) und (2.57) kann man $R(i(v - v'))$ nun schrittweise an den Vertizes $R(iv + u)R(iv' + u)$ der ungeraden Plätze bzw. $\tilde{R}(iv - u)\tilde{R}(iv' - u)$ der geraden Plätze vorbeiführen.

$$\begin{aligned} (T'T)_{\alpha}^{\beta} &= \left[\begin{array}{c} \text{---} \\ \diagup \quad \diagdown \\ \text{---} \\ \diagdown \quad \diagup \\ \text{---} \end{array} \right]^{-1} \begin{array}{c} \beta_1 \quad \beta_2 \quad \dots \quad \beta_{N-1} \quad \beta_N \\ \uparrow \quad \downarrow \quad \dots \quad \uparrow \quad \downarrow \\ \text{---} \quad \text{---} \quad \dots \quad \text{---} \quad \text{---} \\ \uparrow \quad \downarrow \quad \dots \quad \uparrow \quad \downarrow \\ \alpha_1 \quad \alpha_2 \quad \dots \quad \alpha_{N-1} \quad \alpha_N \end{array} \\ &= \left[\begin{array}{c} \text{---} \\ \diagup \quad \diagdown \\ \text{---} \\ \diagdown \quad \diagup \\ \text{---} \end{array} \right]^{-1} \begin{array}{c} \beta_1 \quad \beta_2 \quad \dots \quad \beta_{N-1} \quad \beta_N \\ \uparrow \quad \downarrow \quad \dots \quad \uparrow \quad \downarrow \\ \text{---} \quad \text{---} \quad \dots \quad \text{---} \quad \text{---} \\ \uparrow \quad \downarrow \quad \dots \quad \uparrow \quad \downarrow \\ \alpha_1 \quad \alpha_2 \quad \dots \quad \alpha_{N-1} \quad \alpha_N \end{array} \end{aligned} \quad (2.61)$$

In jedem Schritt vertauschen dabei automatisch die lokalen Spektralparameter $iv + u$ und $iv' + u$ bzw. $-iv + u$ und $-iv' + u$ ihre Positionen. Wegen der periodischen Randbedingungen kann $R(i(v - v'))$ nach einem kompletten Durchlauf wieder mit $R^{-1}(i(v - v'))$ zusammengebracht werden. Übrig bleibt das Produkt der beiden Quanten-Transfermatrizen in umgekehrter Reihenfolge

$$(T'T)_{\alpha}^{\beta} = \left[\begin{array}{c} \text{---} \\ \diagup \quad \diagdown \\ \text{---} \\ \diagdown \quad \diagup \\ \text{---} \end{array} \right]^{-1} \begin{array}{c} \beta_1 \quad \beta_2 \quad \dots \quad \beta_{N-1} \quad \beta_N \\ \uparrow \quad \downarrow \quad \dots \quad \uparrow \quad \downarrow \\ \text{---} \quad \text{---} \quad \dots \quad \text{---} \quad \text{---} \\ \uparrow \quad \downarrow \quad \dots \quad \uparrow \quad \downarrow \\ \alpha_1 \quad \alpha_2 \quad \dots \quad \alpha_{N-1} \quad \alpha_N \end{array} = (TT')_{\alpha}^{\beta} \quad (2.62)$$

Damit ist schließlich gezeigt, daß die Quanten-Transfermatrizen wie in (2.55) vertauschen.

Symmetrien

Die Quanten-Transfermatrix weist die volle Symmetrie $SU(n, m)$ des zugrundeliegenden Gittermodelles auf.

Sie ist im allgemeinen komplex, jedoch nicht hermitesch. Am physikalisch relevanten Punkt $v = 0$ wird die Matrix zudem rein reell. Komplexe Eigenwerte sind dort möglich, müssen dann jedoch in komplex konjugierten Paaren auftreten.

Aus dem Aufbau der Quanten-Transfermatrix ergibt sich außerdem, daß diese mit Operatoren der Art

$$\sigma = \sum_{\alpha=1}^q \sigma(\alpha) \sum_{j=1}^{N/2} (n_{2j-1, \alpha} - n_{2j, \alpha}) \quad (2.63)$$

vertauscht, wobei $n_{j, \alpha}$ wie in (2.43) definiert ist und $\sigma(\alpha)$ jeder Spinkomponente ein festes Gewicht zuordnet. Zeigen läßt sich dies analog zur Gesamtspinerhaltung bei gewöhnlichen Transfermatrizen.

Durch die „erweiterte“ Gesamtspinerhaltung (2.63) zerfällt die Quanten-Transfermatrix in mehrere Blöcke, welche jeweils nur in Unterräumen von Zuständen mit festem Gesamtspin wirken. Die Blockstruktur kann insbesondere bei numerischen Rechnungen ausgenutzt werden. Bei einer numerischen Diagonalisierung der Quanten-Transfermatrix etwa, wie sie im Rahmen dieser Arbeit für kleine Trotterzahlen durchgeführt wurde, reduziert sich der Rechen- und Speicheraufwand damit enorm.

Asymptotik

Am physikalisch interessantesten Punkt $v = 0$ geht die Quanten-Transfermatrix für $T \rightarrow \infty$, d.h. $u = 0$, in eine simple Form über, bei der lediglich der größte Eigenwert von Null verschieden ist. Dieser nimmt dann den Wert $\Lambda(v = 0, T = \infty) = q$ an.

Entsprechend folgt der Hochtemperaturlimes der Entropie des Uimin-Sutherland-Modells durch Ableitung von (2.37) nach der Temperatur stets zu $S(T = \infty) = \ln q$.

2.1.9 Die Monodromiematrix

Zum Uimin-Sutherland-Modell kann folgende Monodromiematrix definiert werden:

$$\mathcal{L}_\nu^{\nu'}(v) := \sum_{\{\mu\}} R_{\alpha_1 \beta_1}^{\mu \mu_2}(iv + u) \tilde{R}_{\alpha_2 \beta_2}^{\mu_2 \mu_3}(iv - u) \cdots R_{\alpha_{N-1} \beta_{N-1}}^{\mu_{N-1} \mu_N}(iv + u) \tilde{R}_{\alpha_N \beta_N}^{\mu_N \nu'}(iv - u) \quad (2.64)$$

Der Aufbau besteht wie bei der Quanten-Transfermatrix aus Vertex-Gewichten $R(iv + u)$ und $\tilde{R}(iv - u)$ in alternierender Abfolge. Die Monodromiematrix hängt dann auf übliche Weise mit der Quanten-Transfermatrix zusammen, d.h. die Quanten-Transfermatrix ergibt sich aus der Spur der Monodromiematrix über den Hilfsraum

$$\mathcal{T}^{\text{QTM}}(v) = \text{Tr}_{\text{aux}} \mathcal{L}(v) = \sum_{\nu} \mathcal{L}_\nu^{\nu}(v) \quad (2.65)$$

Mit den Überlegungen aus Abschnitt 2.1.8 ist klar, daß die Monodromiematrix eine Darstellung der Yang-Baxter-Algebra

$$\sum_{\rho, \sigma} \mathcal{L}_\rho^{\nu'}(v') \mathcal{L}_\sigma^{\mu'}(v) R_{\mu \rho}^{\nu \sigma}(i(v - v')) = \sum_{\rho, \sigma} R_{\rho \nu'}^{\sigma \mu'}(i(v - v')) \mathcal{L}_\nu^{\sigma}(v) \mathcal{L}_\mu^{\rho}(v') \quad (2.66)$$

ist. Bis auf einen Faktor i in der R -Matrix ist dies genau der Zusammenhang, der sich auch für das homogene Perk-Schultz-Modell ergibt. Beide Modelle sind Darstellungen der gleichen Algebra. Der Bethe-Ansatz für das gewöhnliche Perk-Schultz-Modell ist daher im Prinzip auf das „gestapelte“ Perk-Schultz-Modell übertragbar. Allerdings sind dabei Zusatzüberlegungen zu den neuen Referenzzuständen des letzteren Modells nötig.

2.1.10 Eigenwertgleichung im Bethe-Ansatz

Die Transfermatrix des Perk-Schultz-Modells wurde mit Hilfe des geschachtelten Bethe-Ansatzes in [39] diagonalisiert. Die aufgrund der gleichen zugrundeliegenden Yang-Baxter-Algebra mögliche Übertragung dieser Ergebnisse auf das modifizierte Perk-Schultz-Modell wurde in [27] durchgeführt. Der Einfluß eines äußeren Feldes \mathcal{H}_{ext} ist zudem in [16] berücksichtigt.

Es ergibt sich demnach für alle Eigenwerte der Quanten-Transfer-Matrix eine Gleichung der Form

$$\Lambda(v) = \sum_{j=1}^q \lambda_j(v) \quad (2.67a)$$

mit

$$\lambda_1(v) = \frac{q_1(v + i\epsilon_1)}{q_1(v)} \phi_+(v) \phi_-(v - i\epsilon_1) e^{\beta\mu_1} \quad (2.67b)$$

$$\lambda_j(v) = \frac{q_{j-1}(v - i\epsilon_j)}{q_{j-1}(v)} \frac{q_j(v + i\epsilon_j)}{q_j(v)} \phi_+(v) \phi_-(v) e^{\beta\mu_j} \quad \text{für } 2 \leq j \leq q-1 \quad (2.67c)$$

$$\lambda_q(v) = \frac{q_{q-1}(v - i\epsilon_q)}{q_{q-1}(v)} \phi_+(v + i\epsilon_q) \phi_-(v) e^{\beta\mu_q} \quad (2.67d)$$

und den zur besseren Übersichtlichkeit eingeführten Funktionen

$$q_j(v) := \prod_{k_j=1}^{M_j} (v - v_{k_j}^j) \quad (2.68a)$$

$$\phi_{\pm}(v) := (v \pm iu)^{N/2} \quad (2.68b)$$

Wie man leicht sieht, gehen in die Lösung der Eigenwertgleichung $(q-1)$ Sätze von Bethe-Ansatzzahlen $v_{k_j}^j \in \mathbb{C}$ ein. Der obere Index $j = 1, \dots, q-1$ steht dabei für die Nummer des Satzes, während mit dem unteren Index $k_j = 1, \dots, M_j$ die Parameter innerhalb eines Satzes gekennzeichnet sind. Eine Lösung der Eigenwertgleichung hängt also noch von insgesamt $M_{\text{ges}} = M_1 + \dots + M_{q-1}$ unbekanntem Ansatzzahlen ab.

2.1.11 Resultierende Bethe-Ansatzgleichungen

Um nun die Bethe-Ansatzzahlen $v_{k_j}^j$ für einen Eigenwert zu bestimmen, sollen aus der Eigenwertgleichung (2.67) die Bethe-Ansatzgleichungen hergeleitet werden. Dazu fordert man für jede mögliche Lösung die Analytizität des Eigenwertes für alle $v \in \mathbb{C}$.

Da nämlich alle Transfermatrizen $\mathcal{T}^{\text{QTM}}(v)$ miteinander vertauschen (2.55) und sich damit simultan diagonalisieren lassen, müssen die zugehörigen Eigenzustände unabhängig vom Spektralparameter v sein. Weiterhin ist aus der Definition der Quanten-Transfermatrix $\mathcal{T}^{\text{QTM}}(v)$ (2.35) ersichtlich, daß all deren Matrixelemente lediglich Polynome in Abhängigkeit von v

sind, deren Grad kleiner oder gleich N ist. Jeder Eigenwert muß sich daher ebenfalls als Polynom in v vom Grad kleiner oder gleich N darstellen lassen. Insbesondere ist jeder Eigenwert damit analytisch in v .

Tatsächlich ist das Polynom $\Lambda(v)$ für eine gegebene Lösung sogar genau vom Grad N , wie man anhand der Eigenwertgleichung (2.67) leicht erkennen kann. (Die ϕ -Funktionen sind jeweils Polynome vom Grad $N/2$, während der Grad der q -Funktionen nicht weiter relevant ist, da diese nur in Quotienten auftauchen.)

Die möglichen Polstellen auf der rechten Seite von (2.67a) müssen durch geeignete Wahl der Bethe-Ansatzzahlen ausgeglichen werden. Polstellen können potentiell immer dann auftreten, wenn eine der Funktionen $q_j(v)$ null wird, das heißt, wenn die Eigenwertgleichung an einer der Bethe-Ansatzzahlen $v = v_{k_j}^j$ ausgewertet wird.

Damit die Residuen der Eigenwertfunktion (2.67) verschwinden, müssen daher die im Folgenden zusammengefaßten Gleichungen, die sogenannten *Bethe-Ansatzgleichungen*, erfüllt sein

$$\frac{\lambda_j(v_{k_j}^j)}{\lambda_{j+1}(v_{k_j}^j)} = -1 \quad \text{für } j = 1, \dots, q-1 \text{ und } k_j = 1, \dots, M_j \quad (2.69)$$

Dabei handelt es sich um ein nichtlineares Gleichungssystem mit $\sum_{j=1}^{q-1} M_j$ vielen Gleichungen für die gleiche Anzahl an unbekanntem Ansatzzahlen. Für jeden Eigenwert der Quanten-Transfermatrix existiert eine passende Lösung dieses Gleichungssystems.

Schreibt man die Gleichungen für $q \geq 4$ explizit auf, treten dabei drei verschiedene Typen auf, da die „Randterme“ $\lambda_1(v)$ und $\lambda_q(v)$ einen leicht anderen Aufbau als die restlichen $\lambda_j(v)$ haben. Es ergeben sich die folgenden Gleichungen

$$\frac{\phi_-(v_{k_1}^1 - i\epsilon_1)}{\phi_-(v_{k_1}^1)} \frac{q_1(v_{k_1}^1 + i\epsilon_1)}{q_1(v_{k_1}^1 - i\epsilon_2)} \frac{q_2(v_{k_1}^1)}{q_2(v_{k_1}^1 + i\epsilon_2)} = -e^{\beta(\mu_2 - \mu_1)} \quad \text{für } 1 \leq k_1 \leq M_1 \quad (2.70a)$$

$$\frac{q_{j-1}(v_{k_j}^j - i\epsilon_j)}{q_{j-1}(v_{k_j}^j)} \frac{q_j(v_{k_j}^j + i\epsilon_j)}{q_j(v_{k_j}^j - i\epsilon_{j+1})} \frac{q_{j+1}(v_{k_j}^j)}{q_{j+1}(v_{k_j}^j + i\epsilon_{j+1})} = -e^{\beta(\mu_{j+1} - \mu_j)} \quad \text{für } 1 \leq k_j \leq M_j \quad (2.70b)$$

$$\frac{q_{q-2}(v_{k_{q-1}}^{q-1} - i\epsilon_{q-1})}{q_{q-2}(v_{k_{q-1}}^{q-1})} \frac{q_{q-1}(v_{k_{q-1}}^{q-1} + i\epsilon_{q-1})}{q_{q-1}(v_{k_{q-1}}^{q-1} - i\epsilon_q)} \frac{\phi_+(v_{k_{q-1}}^{q-1})}{\phi_+(v_{k_{q-1}}^{q-1} + i\epsilon_q)} = -e^{\beta(\mu_q - \mu_{q-1})} \quad \text{für } 1 \leq k_{q-1} \leq M_{q-1} \quad (2.70c)$$

Im Fall $q = 3$ ergeben sich nur die beiden Gleichungstypen (2.70a) und (2.70c).

Einen Sonderfall stellt $q = 2$ dar, in dem es nur einen Gleichungstyp und einen Satz von Bethe-Ansatzzahlen v_k gibt

$$\frac{\phi_-(v_k - i\epsilon_1)}{\phi_-(v_k)} \frac{q(v_k + i\epsilon_1)}{q(v_k - i\epsilon_2)} \frac{\phi_+(v_k)}{\phi_+(v_k + i\epsilon_2)} = -e^{\beta(\mu_2 - \mu_1)} \quad \text{für } 1 \leq k \leq M \quad (2.71)$$

Die in dieser Arbeit verwendeten numerischen Verfahren, Lösungen der Bethe-Ansatzgleichungen (2.70) zu finden, sind in Anhang A beschrieben. Die Ergebnisse dieser Rechnungen bilden den Kern des folgenden Kapitels 3.

2.2 Anwendung auf spezielle physikalische Modelle

Eine Reihe von interessanten physikalischen Modellen weisen $SU(n,m)$ -Symmetrie auf. Sie lassen sich auf Spezialfälle des Uimin-Sutherland-Modelles (2.3) mit fester Graduierung abbilden. An dieser Stelle ist eine Auswahl von vier Modellen angegeben, die im folgenden Kapitel numerisch näher untersucht wurden.

2.2.1 $SU(3)$ -symmetrisches Modell

Ein $SU(3)$ -symmetrisches Modell ergibt sich, wenn $q = 3$ und alle Graduierungen des Uimin-Sutherland-Modelles positiv, $\epsilon_1 = \epsilon_2 = \epsilon_3 = +1$, gewählt werden.

Der Hamilton-Operator dieses Spezialfalles des Uimin-Sutherland-Modells findet beispielsweise Anwendung bei einer $SU(2)$ -symmetrischen Spin-1-Kette. Äquivalent ist nach [21] die Darstellung

$$\mathcal{H}_0 = \sum_{j=1}^L \left\{ \mathbf{S}_j \mathbf{S}_{j+1} + (\mathbf{S}_j \mathbf{S}_{j+1})^2 \right\} \quad (2.72)$$

2.2.2 $SU(4)$ -symmetrisches Modell

Ein Modell mit $SU(4)$ -Symmetrie erhält man für $q = 4$, mit rein positiven Graduierungen, $\epsilon_1 = \epsilon_2 = \epsilon_3 = \epsilon_4 = +1$.

Ein Modell dieses Typs taucht in natürlicher Weise bei der Betrachtung von $SU(2) \times SU(2)$ Spin-Orbital-Modellen auf. Der allgemeine Hamilton-Operator dieser Modelle wurde von Kugel und Khomskii hergeleitet [28].

Betrachtet man speziell eindimensionale Systeme und vernachlässigt anisotrope Beiträge, so nimmt der Hamilton-Operator folgende Form an

$$\mathcal{H}_0 = \sum_{j=1}^L \left(2\mathbf{S}_j \mathbf{S}_{j+1} + \frac{1}{2} \right) \left(2\boldsymbol{\tau}_j \boldsymbol{\tau}_{j+1} + \frac{1}{2} \right) \quad (2.73)$$

wobei die \mathbf{S}_j im Raum der Spins wirken, während die $\boldsymbol{\tau}_j$ in einem Pseudospinraum wirken, der die orbitalen Freiheitsgrade beschreibt.

In [32, 50] wurde gezeigt, daß (2.73) tatsächlich volle $SU(4)$ -Symmetrie aufweist und äquivalent zum $SU(4)$ -symmetrischen Spezialfall des Hamilton-Operators des Uimin-Sutherland-Modells (2.3) ist.

2.2.3 Supersymmetrisches t-J-Modell

Ein weiteres Modell, dessen Hamilton-Operator auf einen Spezialfall des Uimin-Sutherland-Modelles abgebildet werden kann, ist das t-J-Modell am supersymmetrischen Punkt.

Das t-J-Modell beschreibt das Hüpfen von Elektronen zwischen benachbarten Gitterplätzen mit Spinaustausch-Wechselwirkung. Eine stark abstoßende lokale Coulomb-Wechselwirkung verhindert dabei die Doppelbesetzung eines Gitterplatzes. Im eindimensionalen Fall ist der Hamilton-Operator von der Gestalt

$$\mathcal{H}_0 = -t \sum_{j,\sigma} \mathcal{P} (c_{j,\sigma}^\dagger c_{j+1,\sigma} + c_{j+1,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma}) \mathcal{P} + J \sum_j (\mathbf{S}_j \mathbf{S}_{j+1} - n_j n_{j+1}/4) \quad (2.74)$$

wobei der Projektionsoperator $\mathcal{P} = \prod_j (1 - n_{j\uparrow} n_{j\downarrow})$ sicherstellt, daß keine doppelt besetzten Plätze vorkommen.

Am supersymmetrischen Punkt $2t = J$ kann dieses Modell mit Hilfe des Bethe-Ansatzes gelöst werden [38]. Der Hamilton-Operator besitzt an diesem Punkt $SU(2,1)$ -Symmetrie und ist äquivalent zu demjenigen des Uimin-Sutherland-Modelles bei $q = 3$, wobei eine Graduierung $\epsilon_l = -1$, die anderen beiden $\epsilon_j = +1$ gewählt werden [36, 37].

Die einfachbesetzten Zustände mit Spin \uparrow und Spin \downarrow lassen sich mit den positiv graduierten Spinkomponenten des Uimin-Sutherland-Modelles identifizieren. Die verbleibende Spinkomponente mit negativer Graduierung entspricht einem leeren Platz der Spinkette.

Es ist aufgrund der Spin-Umkehr-Symmetrie jedoch nicht relevant, welcher der beiden positiv graduierten Zustände mit Spin \uparrow und welcher mit Spin \downarrow identifiziert wird. Beide Möglichkeiten sind äquivalent.

2.2.4 Supersymmetrisches erweitertes Hubbard-Modell

Wählt man $q = 4$ und jeweils zwei der Spinzustände mit positiver und negativer Graduierung, erhält man einen zum supersymmetrischen erweiterten Hubbard-Modell äquivalenten Hamilton-Operator [13], der von Essler, Korepin und Schoutens vorgeschlagen wurde. Es handelt sich um ein Modell, das Eigenschaften des t-J-Modells und des Hubbard-Modells in sich vereint. Im Gegensatz zum t-J-Modell ist hier auch die Doppelbesetzung eines Gitterplatzes möglich. Die positiv graduierten Spinzustände des Uimin-Sutherland-Modelles identifiziert man wiederum mit Einfachbesetzung eines Gitterplatzes durch ein Elektron mit Spin \uparrow bzw. Spin \downarrow . Die negativ graduierten Zustände mit einem leeren Gitterplatz bzw. mit Doppelbesetzung.

Kapitel 3

Numerische Ergebnisse

In diesem Kapitel werden die numerischen Ergebnisse besprochen, die mit den in Anhang A beschriebenen Methoden berechnet wurden. Dabei wurden zwei zentrale Problemstellungen behandelt.

Zum einen die Berechnung thermodynamischer Größen bei Systemen mit großer aber endlicher Trotterzahl durch Lösung der Bethe-Ansatzgleichungen für den größten Eigenwert. Zum anderen die Klassifikation der nächstführenden Eigenwerte und Eigenzustände der Quanten-Transfermatrix durch die zugehörigen Verteilungen der Bethe-Ansatzzahlen in der komplexen Ebene. Diese wurden aus einer direkten Diagonalisierung der Quanten-Transfermatrix gewonnen. Die maximal behandelbare Trotterzahl ist hier aufgrund des exponentiellen Wachstums der betrachteten Matrix begrenzt.

Mit den Rechenverfahren aus Anhang A ist prinzipiell die Behandlung von beliebigen Uimin-Sutherland-Modellen möglich. Ergebnisse werden hier für einige interessante Spezialfälle angegeben, die sich direkt auf bestimmte physikalische Modelle abbilden lassen. Im einzelnen sind dies die Modelle mit SU(3)- und SU(4)-Symmetrie, das supersymmetrische t-J-Modell und das supersymmetrische erweiterte Hubbard-Modell (EKS-Modell), die am Ende des letzten Kapitels kurz vorgestellt wurden.

Bei allen Berechnungen wurde die Trotterzahl im Rahmen der vorliegenden Programme jeweils maximal gewählt. Bei den Ergebnissen ist die verwendete Trotterzahl stets angegeben.

3.1 Thermodynamik

3.1.1 Berechnung der freien Energie bei endlicher Trotterzahl

In Abschnitt 2.1.5 des letzten Kapitels wurde gezeigt, daß die freie Energie pro Gitterplatz des Uimin-Sutherland-Modells allein bestimmt ist durch den größten Eigenwert der Quanten-Transfermatrix beim Spektralparameter $v = 0$ im Trotterlimes $N \rightarrow \infty$

$$f = - \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{L\beta} \ln Z = - \frac{1}{\beta} \lim_{N \rightarrow \infty} \ln \Lambda_{\max}(0) \quad (3.1)$$

Jedoch können mit Hilfe des eingesetzten, iterativen Lösungsverfahrens der Bethe-Ansatzgleichungen nur Systeme mit endlicher Trotterzahl betrachtet werden. Folglich ist die freie Energie, die aus dem größten Eigenwert der so behandelten, nur endlich großen, Quanten-

Transfermatrix durch

$$f_N = - \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{L\beta} \ln Z_N = - \frac{1}{\beta} \ln \Lambda_{\max, N}(0) \quad (3.2)$$

berechnet wird, mit einem systematischen Fehler behaftet, der von der verwendeten Trotterzahl N abhängt. Im Grenzfall gilt natürlich

$$f = \lim_{N \rightarrow \infty} f_N \quad Z = \lim_{N \rightarrow \infty} Z_N \quad (3.3)$$

Um den durch die Berechnung bei endlicher Trotterzahl N entstehenden Fehler in der freien Energie abschätzen zu können, betrachtet man zunächst die Zustandssumme für endliches N

$$Z_N = \text{Tr}(\mathcal{T}^{\text{QTM}}(0))^L = \text{Tr}(\mathcal{T}(u)\overline{\mathcal{T}}(u))^{N/2} \simeq \text{Tr} e^{-\beta(\mathcal{H}_0 + \mathcal{O}(u))} \quad (3.4)$$

wobei im letzten Schritt $u = -\beta/N$ als klein angenommen werden kann, wenn N hinreichend groß gewählt wird. Berücksichtigt man nur die Korrektur erster Ordnung, wobei der Operator dieser Korrektur mit \mathcal{X} bezeichnet sei, so kann man für kleines u weiter entwickeln

$$\begin{aligned} Z_N &\simeq \text{Tr} e^{-\beta(\mathcal{H}_0 + u\mathcal{X})} \\ &\simeq \text{Tr}(e^{-\beta\mathcal{H}_0} - u\mathcal{X}\beta e^{-\beta\mathcal{H}_0}) \\ &= Z - u\beta \text{Tr} \mathcal{X} e^{-\beta\mathcal{H}_0} \\ &= Z(1 - u\beta \langle \mathcal{X} \rangle) \end{aligned} \quad (3.5)$$

Setzt man dies in (3.2) ein, so erhält man schließlich

$$f_N \simeq f + u \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{L} \langle \mathcal{X} \rangle = f + \mathcal{O}(u) \quad (3.6)$$

einen Fehler der Ordnung u , da der thermodynamische Erwartungswert $\langle \mathcal{X} \rangle$ eine extensive Größe ist. Im Bereich hoher Temperaturen mit $\beta \ll 1$ reichen also bereits geringe Systemgrößen für eine zuverlässige Berechnung der freien Energie des Systems im Trotterlimites. Im interessanten Tieftemperaturbereich $T \lesssim 1.0$ muß die Systemgröße aber entsprechend groß gewählt werden, um das Verhältnis β/N gering zu halten. Aus den numerischen Rechnungen folgt, daß der Korrekturterm bis etwa $\beta/N \approx 0.002$ zu vernachlässigen ist.

Der Grundzustand ist in diesem Zugang stets unerreichbar, da der systematische Fehler für jede feste Trotterzahl N bei $T \rightarrow 0$ divergiert. Allerdings kann die Grundzustandsenergie aus den berechenbaren Daten durch Extrapolation approximiert werden.

3.1.2 Berechnung abgeleiteter thermodynamischer Größen

Aus der freien Energie $f(T, \mu)$, welche direkt aus dem größten Eigenwert der Quanten-Transfermatrix folgt, ergeben sich weitere thermodynamische Größen. Von besonderem Interesse sind z.B. die Entropie $S(T)$, die Wärmekapazität $C(T)$ und gegebenenfalls die Teilchendichte $n(T)$

$$S = - \left(\frac{\partial f}{\partial T} \right)_\mu \quad C = T \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_n \quad n = - \left(\frac{\partial f}{\partial \mu} \right)_T \quad (3.7)$$

Da die durchgeführten Berechnungen der Bethe-Ansatzlösungen bei festem chemischem Potential $\mu = 0$ erfolgten, müssen bei der Berechnung der Wärmekapazität Korrekturen berücksichtigt werden. Man betrachtet

$$\left(\frac{\partial S}{\partial \mu}\right)_T = \left(\frac{\partial n}{\partial T}\right)_\mu \quad \left(\frac{\partial \mu}{\partial T}\right)_n = -\left(\frac{\partial n}{\partial T}\right)_\mu \left(\frac{\partial n}{\partial \mu}\right)_T^{-1} \quad (3.8)$$

woraus folgt, daß

$$\left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_n = \left(\frac{\partial S}{\partial T}\right)_\mu - \left(\frac{\partial n}{\partial T}\right)_\mu^2 \left(\frac{\partial n}{\partial \mu}\right)_T^{-1} \quad (3.9)$$

Speziell für die Modelle mit SU(3)- und SU(4)-Symmetrie gilt stets $n = 1$. Hier verschwindet der Korrekturterm auf der rechten Seite von (3.9).

Die nötigen Ableitungen wurden in den vorliegenden Rechnungen numerisch bestimmt. Die dadurch entstehenden zusätzlichen Fehler stellten sich im Vergleich zu dem durch die endliche Systemgröße auftretenden systematischen Fehler jedoch als vernachlässigbar heraus.

Für das SU(3)-Modell und das SU(4)-Spin-Orbital-Modell wurde zudem die Spin-Suszeptibilität

$$\chi_s = -\left.\frac{\partial^2 f}{\partial h^2}\right|_{h=0} \quad (3.10)$$

berechnet. Dazu wurde zunächst jeweils die Magnetisierung $m(h) = -\partial f / \partial h$ für ein kleines Feld $h = 10^{-4}$ bestimmt. Die zweite numerische Ableitung ergibt sich dann näherungsweise aus $\chi_s = m(h)/h$.

3.1.3 Thermodynamik des SU(3)-symmetrischen Modells

Abbildung 3.1 zeigt die aus der Bethe-Ansatzlösung bei Trotterzahl $N = 6144$ berechnete freie Energie $f(T)$ des SU(3)-symmetrischen Modells.

Es ist bekannt, daß das Tieftemperaturverhalten des SU(3)-symmetrischen Modells von der konformen Feldtheorie beschrieben wird. Man erhält

$$f \simeq f_0 - \frac{\pi c}{6v} T^2 \quad (3.11)$$

wobei die Zentralladung hier $c = 2$ ist [11]. Zudem sind die Geschwindigkeit elementarer Anregungen und die Grundzustandsenergie exakt berechenbar [42], $v = 2\pi/3$ bzw. $f_0 = 1 - \pi\sqrt{3}/9 - \ln(3) \approx -0.70321$.

Tatsächlich zeigt die berechnete Energie das richtige Tieftemperaturverhalten. Aus den berechneten Daten läßt sich die Grundzustandsenergie zu $f_0 \approx 0.704 \pm 0.001$ extrapolieren, was mit der bekannten Lösung im Rahmen des Fehlers gut übereinstimmt. Problematisch bei der Extrapolation ist jedoch, daß sich die Tieftemperaturasymptotik erst bei Temperaturen $T \lesssim 0.3$ einstellt. Im Bereich niedriger Temperaturen werden die berechneten Daten aufgrund der Ordnung $\mathcal{O}(u) = \mathcal{O}(1/(TN))$ des systematischen Fehlers zunehmend ungenau. Damit steht nur ein kleiner Temperaturbereich $0.15 \lesssim T \lesssim 0.3$ für diese Rechnung zur Verfügung.

Die Entropie, gewonnen aus der numerischen Ableitung der freien Energie, ist in Abbildung 3.2 gezeigt. Die nach (3.11) erwartete Tieftemperaturasymptotik ist $S \sim T$. Die Asymptotik bei hohen Temperaturen $S(T \rightarrow \infty) = \ln(3) \approx 1.09861$ ist ebenfalls bekannt.

Man erkennt gut, daß die berechnete Entropie aufgrund der endlichen Trotterzahl etwa ab $T \lesssim 0.1$, das entspricht $|u| \gtrsim 0.002$, unbrauchbar wird. Kurz vor diesem Punkt schmiegt

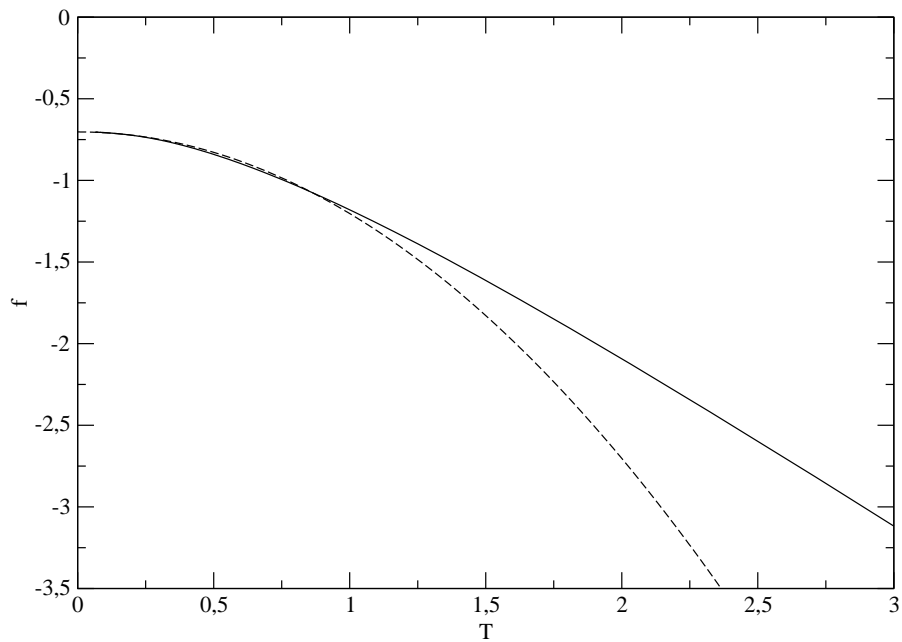


Abbildung 3.1: Berechnete freie Energie des SU(3)-symmetrischen Modells. Die gestrichelte Linie zeigt zusätzlich die nach der konformen Feldtheorie zu erwartende Tieftemperaturasymptotik.

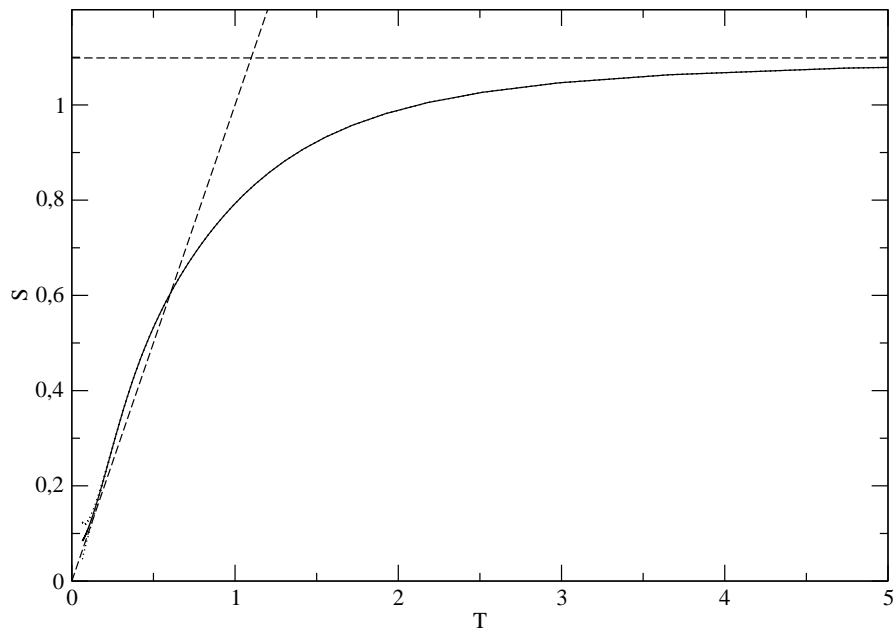


Abbildung 3.2: Berechnete Entropie des SU(3)-symmetrischen Modells. Die gestrichelten Linien zeigen die nach der konformen Feldtheorie zu erwartende Tieftemperaturasymptotik $S \sim T$ und Hochtemperaturasymptotik $S \rightarrow \ln(3)$. Die gepunkteten Linien zeigen eine Abschätzung des systematischen Fehlers.

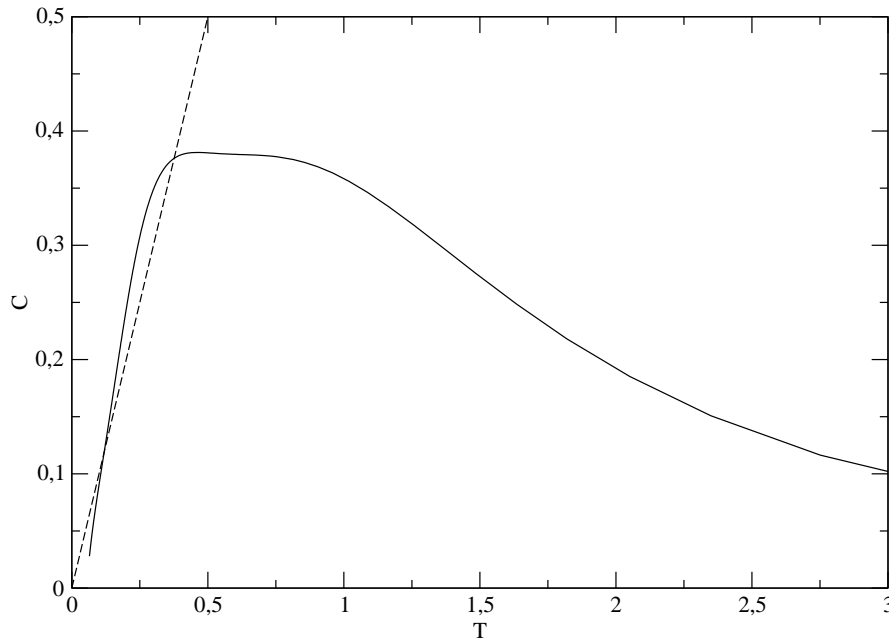


Abbildung 3.3: Berechnete Wärmekapazität des SU(3)-symmetrischen Modells. Gestrichelt ist die nach der konformen Feldtheorie zu erwartende Tieftemperaturasymptotik $C \sim T$ dargestellt.

sich die Entropie jedoch gut an die erwartete Gerade an. Die Hochtemperaturasymptotik entspricht ebenfalls den Erwartungen.

Durch weitere numerische Ableitung dieser Daten erhält man schließlich die Wärmekapazität, die in Abbildung 3.3 wiedergegeben ist. Für große Temperaturen fällt C wie erwartet ab. Im Bereich $T \rightarrow 0$ ist nach (3.11) die Asymptotik $C \sim T$ zu erwarten.

Allerdings folgt die berechnete Wärmekapazität nur grob dem erwarteten Tieftemperaturverlauf, da der systematische Fehler durch die zweite numerische Ableitung bei kleinen Temperaturen besonders stark ins Gewicht fällt. Die Wärmekapazität fällt zu kleinen Temperaturen hin zu stark ab. Der Bereich $T < 0.2$, in dem sich die erwartete Tieftemperaturasymptotik ergeben müßte, wird nicht mit hinreichender Genauigkeit erreicht.

Die Wärmekapazität weist bei $T \approx 0.46$ ein charakteristisches Maximum und bei $T \approx 0.72$ eine Schulter auf. In diesem Temperaturbereich ist der systematische Fehler noch zu vernachlässigen.

Die Spin-Suszeptibilität ist schließlich in der Abbildung 3.4 gezeigt. Dort ist zudem die Suszeptibilität des Grundzustandes $\chi_s(0) = 3/\pi^2$ vermerkt, wie sie aus der konformen Feldtheorie folgt. Auffällig ist, daß die Suszeptibilität bei den niedrigsten dargestellten Temperaturen immer noch ca. 10% oberhalb von $\chi_s(0)$ verläuft. Dies ist jedoch keine Folge des systematischen Fehlers. Das singuläre Verhalten der Suszeptibilität bei $T = 0$ ist vielmehr die Folge von Korrekturen der Ordnung $1/\log T$, wie sie ähnlich bei der Spin-1/2 Heisenberg-Kette beobachtet wurden [12, 26].

Die gezeigten Zusammenhänge stehen in guter Übereinstimmung mit bekannten Ergebnissen, die mit Hilfe von auf den Bethe-Ansatzgleichungen aufbauenden, nichtlinearen Integralgleichungen in [16] berechnet wurden. Im dort gewählten Zugang kann der Trotterlimes

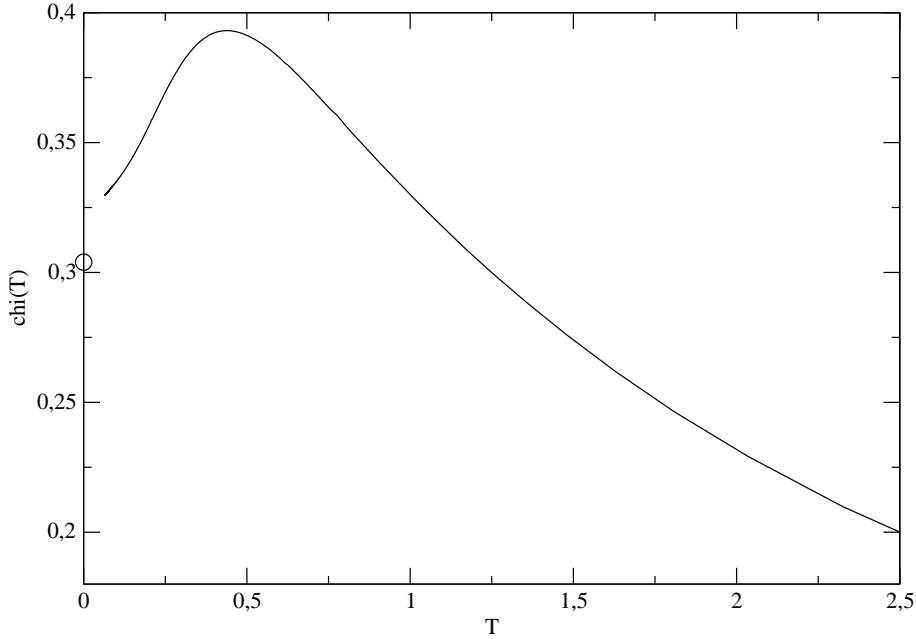


Abbildung 3.4: Berechnete Spin-Suszeptibilität des SU(3)-symmetrischen Modells. Der Kreis zeigt die Suszeptibilität des Grundzustandes $\chi_s(0) = 3/\pi^2$.

$N \rightarrow \infty$ analytisch durchgeführt werden, weshalb die dort angegebenen Zusammenhänge auch im Tieftemperaturbereich gültig sind. Insbesondere erkennt man anhand der dort angegebenen Wärmekapazität, daß sich die aus der konformen Feldtheorie ergebende Tieftemperaturasymptotik tatsächlich erst bei $T < 0.1$ einstellt. Dieser Bereich ist im Rahmen der direkten Bethe-Ansatzlösung bei festen Trotterzahlen bis $N = 6144$, wie sie in dieser Arbeit für das t-J-Modell verwendet wurden, nicht mehr zugänglich.

Die in [16] berechnete Suszeptibilität weist ebenfalls bei den niedrigsten Temperaturen die bereits angesprochene Abweichung vom bei $T = 0$ erwarteten Wert auf. Die Daten stimmen hervorragend mit Abbildung 3.4 überein.

3.1.4 Thermodynamik des SU(4)-symmetrischen Modells

Das SU(4)-symmetrische Modell wird im Limes tiefer Temperaturen durch die Universalitätsklasse des SU(4)₁ Wess-Zumino-Witten-Modells beschrieben [1]. Aus der konformen Feldtheorie folgt für das Tieftemperaturverhalten der freien Energie der Zusammenhang

$$f \simeq f_0 - \frac{\pi c}{6v} T^2 \quad (3.12)$$

wobei die Zentralladung $c = 3$ ist. Aus analytischen Rechnungen [42] ist ebenfalls die Geschwindigkeit elementarer Anregungen $v = \pi/2$, sowie die Grundzustandsenergie $f_0 = 1 - \pi/4 - 3 \ln(2)/2 \approx -0.82512$, exakt bekannt.

Abbildung 3.5 zeigt die aus der numerischen Bethe-Ansatzlösung bei der Trotterzahl $N = 10240$ berechnete freie Energie f .

Man erkennt, daß sich die Daten für $T \lesssim 0.3$ hervorragend an die nach (3.12) zu erwartende Tieftemperaturasymptotik anschmiegen. Die Extrapolation der Grundzustandsenergie wird

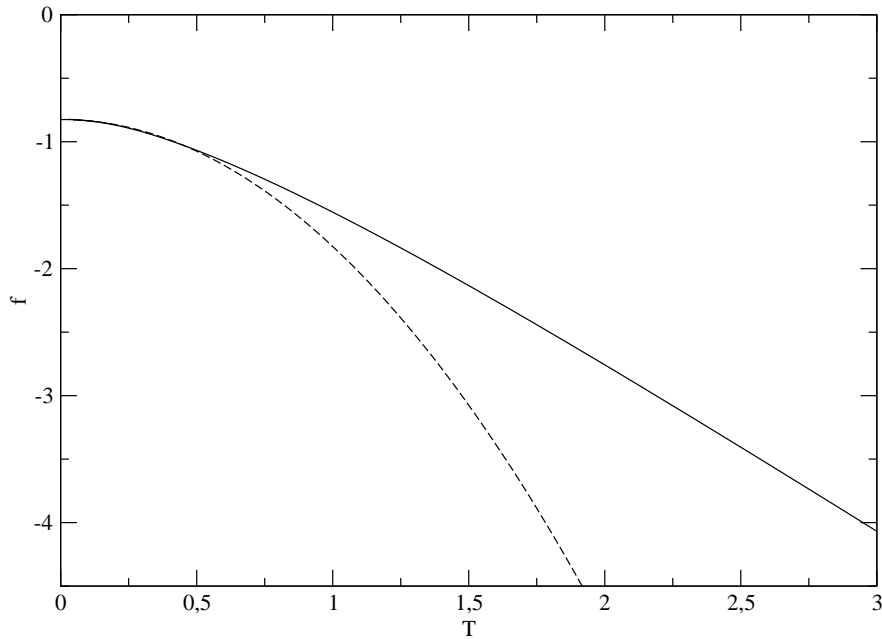


Abbildung 3.5: Berechnete freie Energie des SU(4)-symmetrischen Modells. Die gestrichelte Linie zeigt zusätzlich die nach der konformen Feldtheorie zu erwartende Tieftemperaturasymptotik.

jedoch wie beim SU(3)-Modell auch hier durch den trotzdem noch kleinen Temperaturbereich $0.1 \lesssim T \lesssim 0.3$ erschwert, in dem der systematische Fehler der Ordnung $\mathcal{O}(1/(TN))$ der numerischen Daten klein genug für eine sinnvolle Berechnung ist. Man erhält aus den Daten eine extrapolierte Zustandsenergie von $f_0 \approx 0.825 \pm 0.001$. Im Rahmen des Fehlers stimmt der Wert mit dem exakten Ergebnis überein.

Weiterhin folgt aus der numerischen Ableitung der freien Energie die in Abbildung 3.6 gezeigte Entropie. Nach (3.12) erwartet man für diese ein Tieftemperaturverhalten wie $S \sim 2T$. Im Limes $T \rightarrow \infty$ strebt die Entropie gegen $S(T = \infty) = \ln(4) \approx 1.38629$.

Die berechnete Entropie paßt gut zur bekannten Asymptotik, sofern man den Bereich $T \lesssim 0.05$ vernachlässigt. Für noch kleinere Temperaturen wird der Fehler durch die endliche Trotterzahl zu groß, als daß hier noch sinnvolle Daten ablesbar wären. Insbesondere entspricht das erneute Ansteigen der Entropie in diesem Temperaturbereich nicht den physikalischen Erwartungen.

Durch weitere numerische Ableitung der Daten ergibt sich die in Abbildung 3.7 gezeigte Wärmekapazität. Erwartungsgemäß fällt diese für große T ab. Bei tiefen Temperaturen erwartet man eine Asymptotik von $C \sim 2T$.

Tatsächlich erkennt man allerdings in diesem Bereich nur grobe Übereinstimmung mit den berechneten Daten. Die berechnete Wärmekapazität fällt für $T \rightarrow 0$ zu steil ab. Da im relevanten Temperaturbereich $T \lesssim 0.05$ aber der systematische Fehler bereits bei der Entropie bemerkbar wurde, ist die Abweichung hier nicht weiter verwunderlich.

Gut zu erkennen, und in jedem Fall im noch sauber berechenbaren Bereich, sind jedoch ein charakteristisches Maximum der Wärmekapazität bei $T \approx 0.3$ und eine Schulter bei $T \approx 0.9$.

Für das SU(4)-Spin-Orbital-Modell wurde zudem die Spin-Suszeptibilität χ_s bei der Trot-

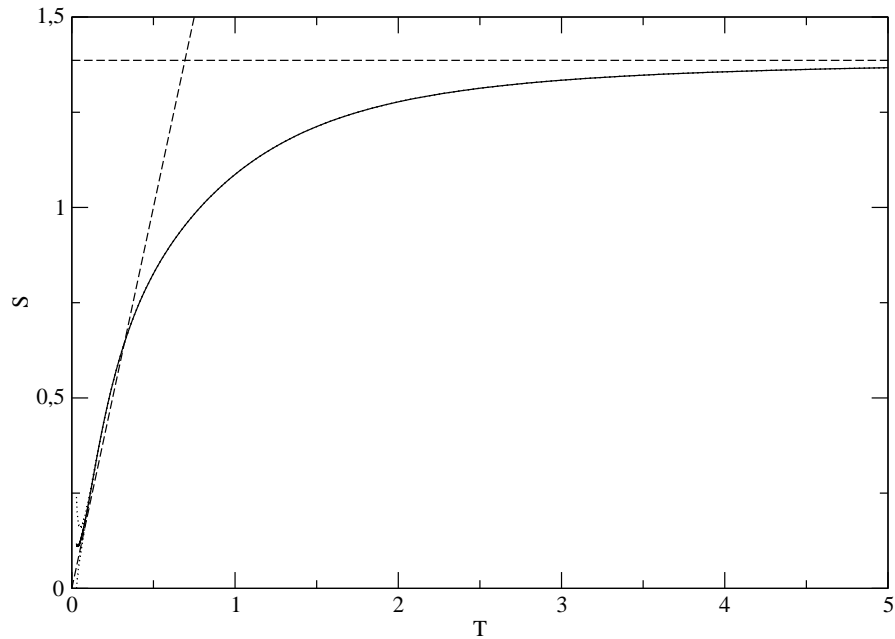


Abbildung 3.6: Berechnete Entropie des SU(4)-symmetrischen Modells. Die gestrichelten Linien zeigen die nach der konformen Feldtheorie zu erwartende Tieftemperaturasymptotik $S \sim 2T$ und die Hochtemperaturasymptotik $S \rightarrow \ln(4)$. Gepunktet ist eine Abschätzung des systematischen Fehlers dargestellt.

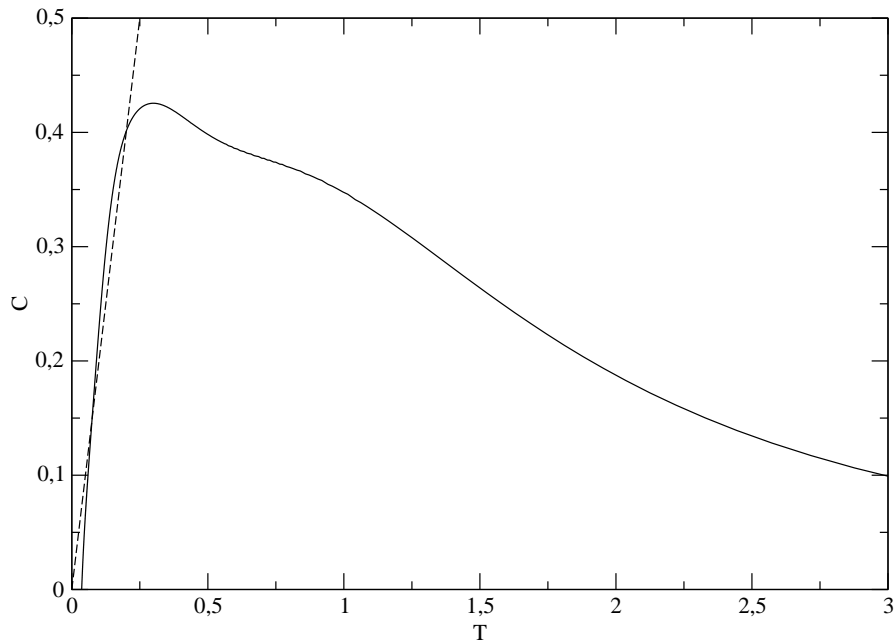


Abbildung 3.7: Berechnete Wärmekapazität des SU(4)-symmetrischen Modells. Gestrichelt ist die nach der konformen Feldtheorie zu erwartende Tieftemperaturasymptotik $C \sim 2T$ dargestellt.

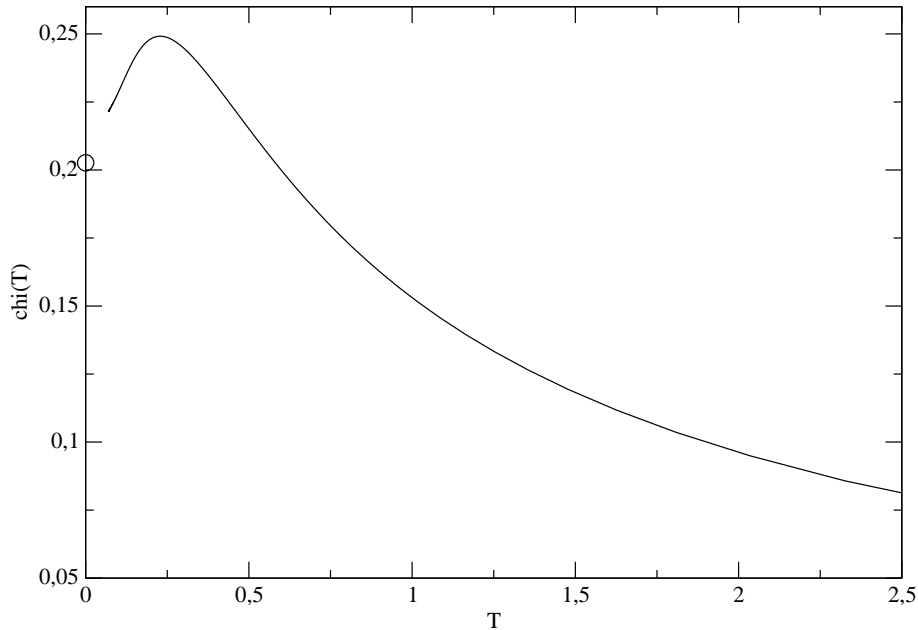


Abbildung 3.8: Berechnete Spin-Suszeptibilität des SU(4)-Spin-Orbital-Modelles. Der Kreis zeigt die zu erwartende Suszeptibilität des Grundzustandes $\chi_s(0) = 2/\pi^2$.

terzahl $N = 6144$ berechnet. Der entsprechende Graph ist Abbildung 3.8 zu entnehmen. Die nach [2] zu erwartende Suszeptibilität des Grundzustandes beträgt $\chi_s(0) = 2/\pi^2$. Dies paßt zu einer linearen Extrapolation der berechneten Daten zu $T = 0$.

Die hier berechneten Daten stehen insgesamt in guter Übereinstimmung mit entsprechenden numerischen Ergebnissen, die mit Hilfe von TMRG-Rechnungen [40] bzw. Monte-Carlo-Simulationen [15] gewonnen wurden. Dabei liegt die bei den Monte-Carlo-Simulationen erzielte Genauigkeit im Tieftemperaturbereich weit über den Möglichkeiten der hier verwendeten direkten Lösung der Bethe-Ansatzgleichungen.

3.1.5 Thermodynamik des supersymmetrischen t-J-Modells

Die Berechnungen zum t-J-Modell erfolgten bei festem chemischen Potential $\mu = 0$ und einer Trotterzahl $N = 6144$. Die freie Energie ist in Abbildung 3.9 gezeigt. Der Tieftemperaturbereich wird auch hier von der konformen Feldtheorie beschrieben. Man erwartet danach einen Verlauf wie

$$f \simeq f_0 - \frac{\pi}{6} \left(\frac{c_s}{v_s} + \frac{c_c}{v_c} \right) T^2 \quad (3.13)$$

wobei v_s und v_c die Geschwindigkeiten der Spinon- bzw. Holon-Anregungen sind, während die Zentralladungen $c_s = 1$ und $c_c = 1$ sind [22].

Die Parameter v_s und v_c sind nach [6] abhängig von der Teilchendichte n . Da bei den vorliegenden Daten jedoch μ konstantgehalten ist, und damit eine temperaturabhängige Teilchendichte vorliegt, ist eine Extrapolation dieser Parameter aus den berechneten Daten schlecht möglich.

Gut zu erkennen ist dagegen, daß sich eine Grundzustandsenergie von $f_0 = -1$ ergibt. Dies ist damit zu erklären, daß ein rein bosonischer Grundzustand ohne Teilchenbesetzung

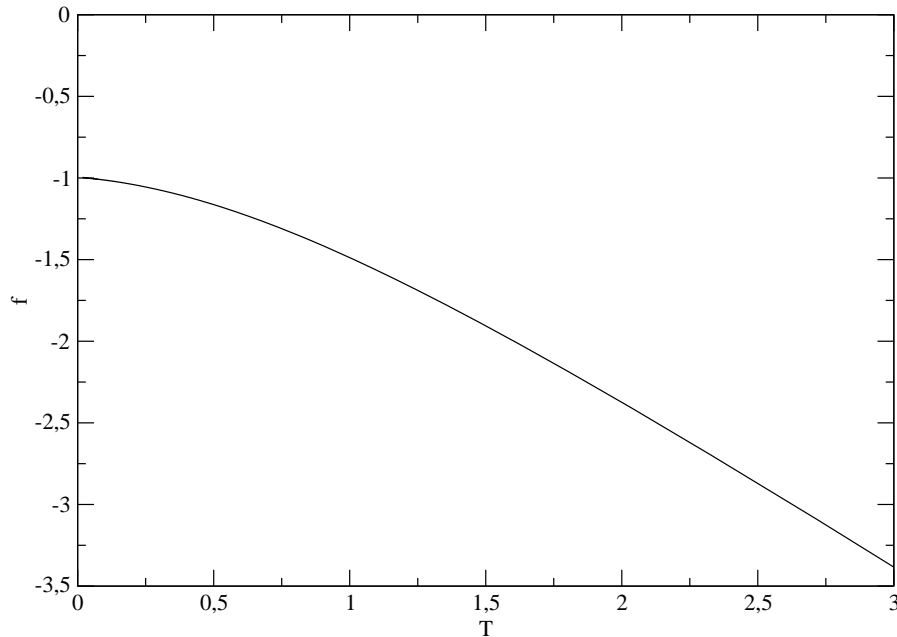


Abbildung 3.9: Berechnete freie Energie des supersymmetrischen t-J-Modells bei $\mu = 0$.

vorliegt, für den die angegebene Energie analytisch nach [42] folgt.

Die Beobachtung paßt zudem gut zur berechneten Temperaturabhängigkeit der Teilchendichte, die in Abbildung 3.10 gezeigt ist. Tatsächlich fällt diese für kleine Temperaturen gegen null ab. Für große Temperaturen nähert sich n der oberen Schranke $n(T = \infty) = 2/3$.

Die berechnete Entropie ist in Abbildung 3.11 dargestellt. Die Hochtemperaturasymptotik $S(T = \infty) = \ln(3) \approx 1.09861$, paßt erwartungsgemäß gut zu den berechneten Daten. Für kleine Temperaturen $T \lesssim 0.1$ zeigt sich, daß die Daten dort aufgrund des systematischen Fehlers unbrauchbar werden.

Schließlich ist die Wärmekapazität des t-J-Modelles in Abbildung 3.12 gezeigt. Der Verlauf des Graphen entspricht ebenfalls den Erwartungen. Die Wärmekapazität fällt sowohl für $T \rightarrow 0$, als auch für $T \rightarrow \infty$ ab. Dazwischen liegt ein Maximum bei $T \approx 0.95$.

Ähnliche Berechnungen zum t-J-Modell mit Hilfe der TMRG-Methode finden sich beispielsweise in [41]. Die dort angegebenen Daten wurden jedoch bei endlichen chemischen Potentialen berechnet. Die Daten können daher nur für einen groben, qualitativen Vergleich herangezogen werden. Die Ergebnisse sind jedoch miteinander konsistent. Exakte Ergebnisse bei fester Teilchendichte finden sich in [23].

3.1.6 Thermodynamik des supersymmetrischen erweiterten Hubbard-Modells

Die Daten für das supersymmetrische erweiterte Hubbard-Modell (EKS-Modell) wurden bei festem $\mu = 0$ und einer Trotterzahl $N = 4096$ berechnet. Die freie Energie ist in Abbildung 3.13 dargestellt.

Nach [14, 42] ergibt sich, daß die Grundzustandsenergie des EKS-Modells mit derjenigen des t-J-Modells übereinstimmen muß. Tatsächlich ergibt sich auch aus den berechneten Daten für das EKS-Modell, wie bereits zuvor beim t-J-Modell, die Grundzustandsenergie $f_0 = -1$.

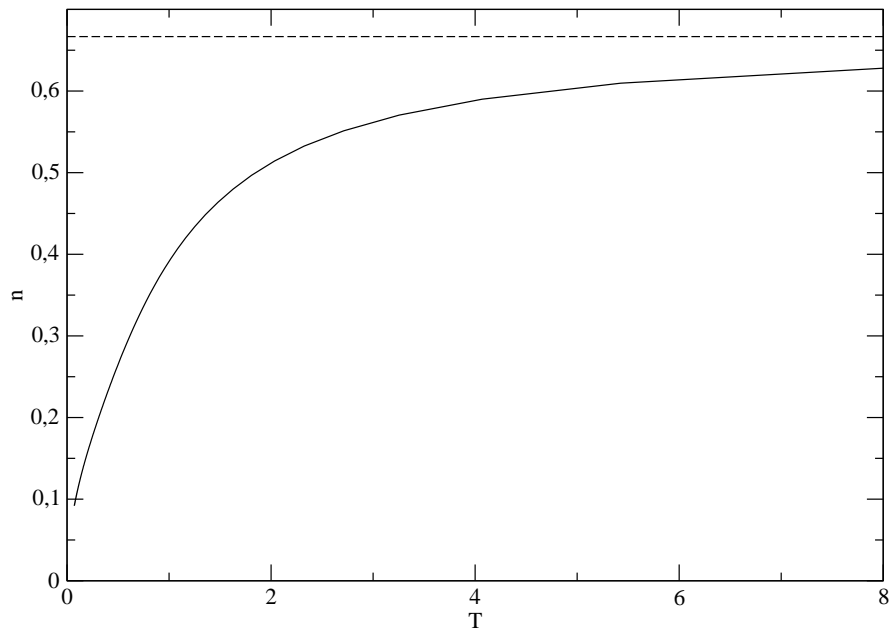


Abbildung 3.10: Berechnete Teilchendichte des supersymmetrischen t-J-Modells bei $\mu = 0$. Die zu erwartende Hochtemperaturasymptotik $n \rightarrow 2/3$ ist gestrichelt dargestellt.

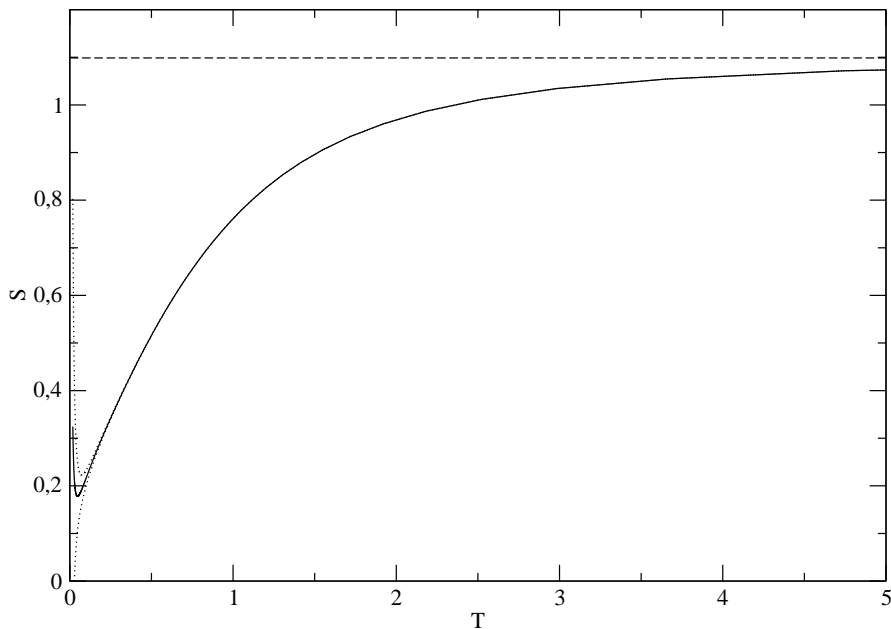


Abbildung 3.11: Berechnete Entropie des supersymmetrischen t-J-Modells bei $\mu = 0$. Die gestrichelte Linie zeigt die zu erwartende Hochtemperaturasymptotik $S \rightarrow \ln(3)$. Gepunktet ist eine Abschätzung des systematischen Fehlers dargestellt.

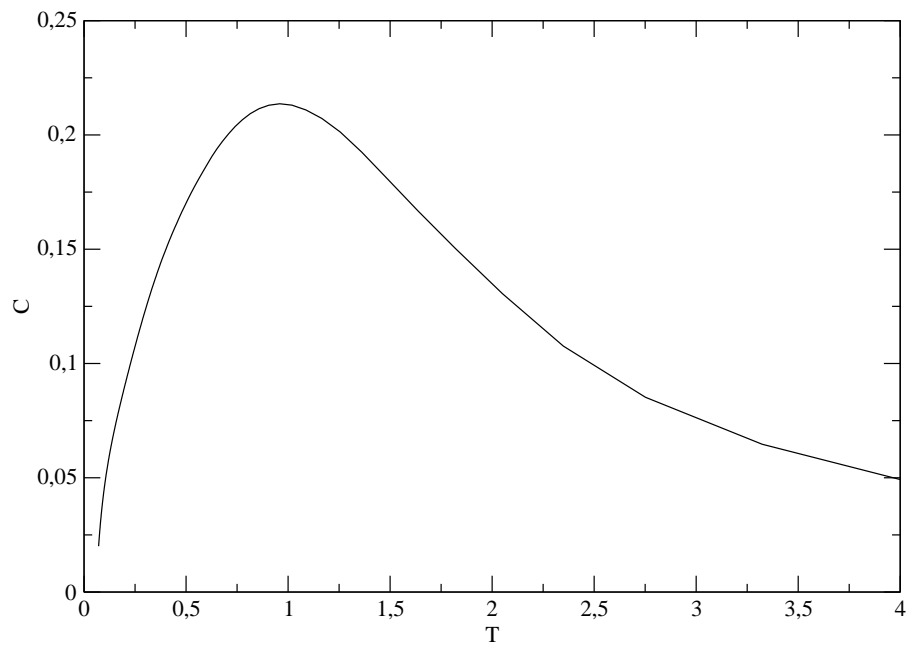


Abbildung 3.12: Berechnete Wärmekapazität des supersymmetrischen t-J-Modells bei $\mu = 0$.

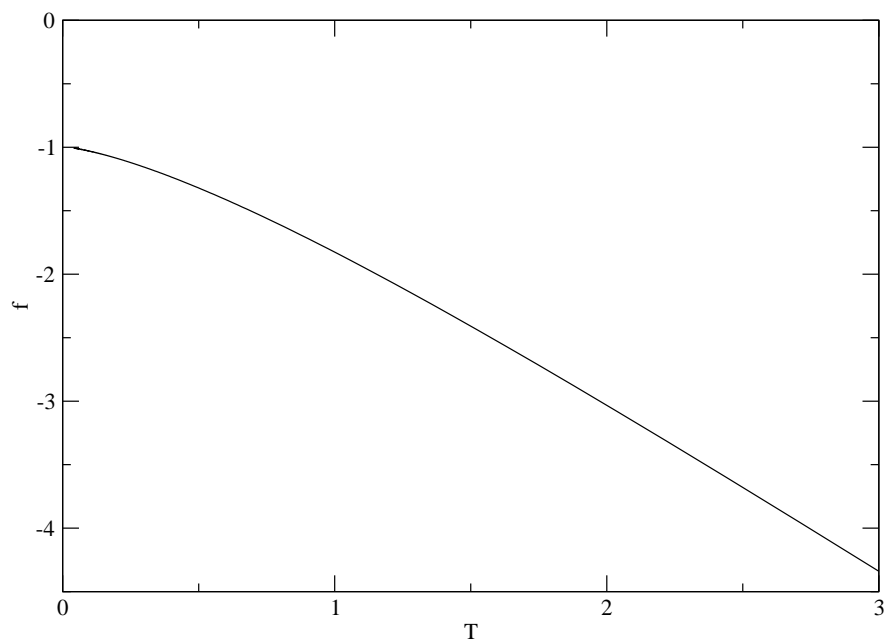


Abbildung 3.13: Berechnete freie Energie des supersymmetrischen erweiterten Hubbard-Modells.

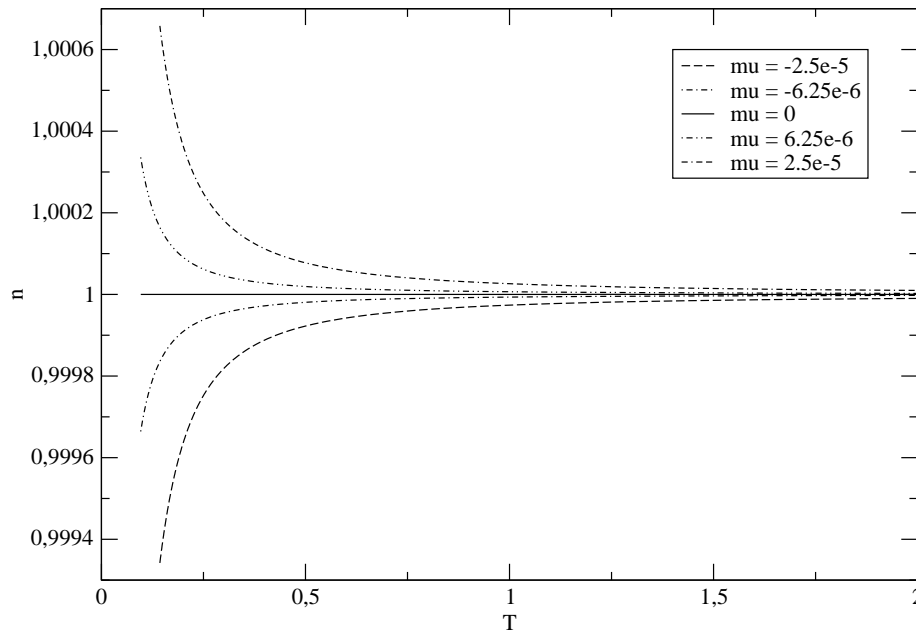


Abbildung 3.14: Berechnete Teilchendichte des supersymmetrischen erweiterten Hubbard-Modells bei kleinen chemischen Potentialen.

Entsprechend ist auch hier ein rein bosonischer Grundzustand zu erwarten.

Dies ist kompatibel mit der berechneten Temperaturabhängigkeit der Teilchendichte bei verschiedenen kleinen chemischen Potentialen μ , siehe Abbildung 3.14. Nahezu über den gesamten Temperaturbereich gilt für alle Kurven praktisch $n = 1$. Bei kleinen Temperaturen $T \lesssim 0.3$ fällt die Teilchendichte für $\mu < 0$ jedoch steil ab, für $\mu > 0$ steigt sie steil an. Es ist zu vermuten, daß sich im Grundzustand für $\mu < 0$ die Teilchendichte $n(0) = 0$ und im anderen Fall $n(0) = 2$ ergibt. Bei $\mu = 0$ bleibt im gesamten Temperaturbereich $n = 1$. Zusammen mit den Ergebnissen bei endlichem μ und der bekannten Grundzustandsenergie läßt dies hier auf einen Grundzustand schließen, bei dem eine gleichmäßige Verteilung von unbesetzten und doppeltbesetzten Plätzen der Spinkette vorliegt. Diese Beobachtungen stimmen mit exakten Untersuchungen des Grundzustandes des EKS-Modells in [14] überein.

Abbildung 3.15 zeigt die Entropie des Modells. Bei hohen Temperaturen strebt diese wie zu erwarten asymptotisch gegen $S(T = \infty) = \ln(4) \approx 1.38629$. Im Bereich niedriger Temperaturen erkennt man anhand des Fehlerschlauches leicht, daß die Daten hier ab etwa $T \lesssim 0.12$ unbrauchbar werden.

Die Wärmekapazität des EKS-Modells ist schließlich der Abbildung 3.16 zu entnehmen. Auch der Verlauf dieses Graphen entspricht den Erwartungen. Die Wärmekapazität fällt sowohl für $T \rightarrow 0$, als auch für $T \rightarrow \infty$ ab. Dazwischen liegt ein Maximum bei $T \approx 0.7$.

Leider liegen bei diesem Modell keine mit anderen Methoden berechneten Vergleichsdaten zur Thermodynamik bei endlichen Temperaturen vor.

3.2 Klassifikation der Eigenwerte und Eigenzustände

Im folgenden werden für die behandelten Modelle die zu den betragsmäßig größten Eigenwerten der Quanten-Transfermatrix zugehörigen Verteilungen der Bethe-Ansatzzahlen ange-

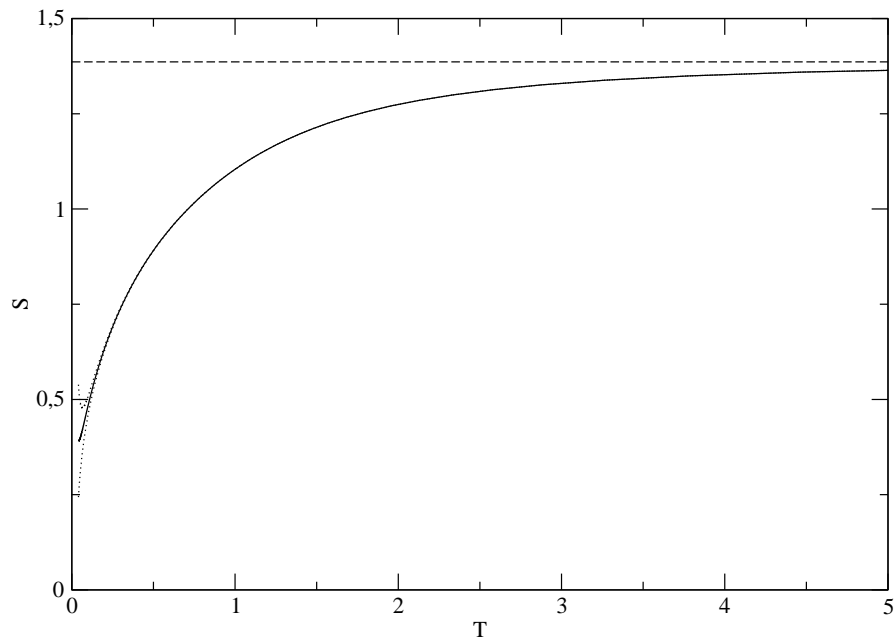


Abbildung 3.15: Berechnete Entropie des supersymmetrischen erweiterten Hubbard-Modells bei $\mu = 0$. Die gestrichelte Linie zeigt die zu erwartende Hochtemperaturasymptotik $S \rightarrow \ln(4)$. Gepunktet ist eine Abschätzung des systematischen Fehlers dargestellt.

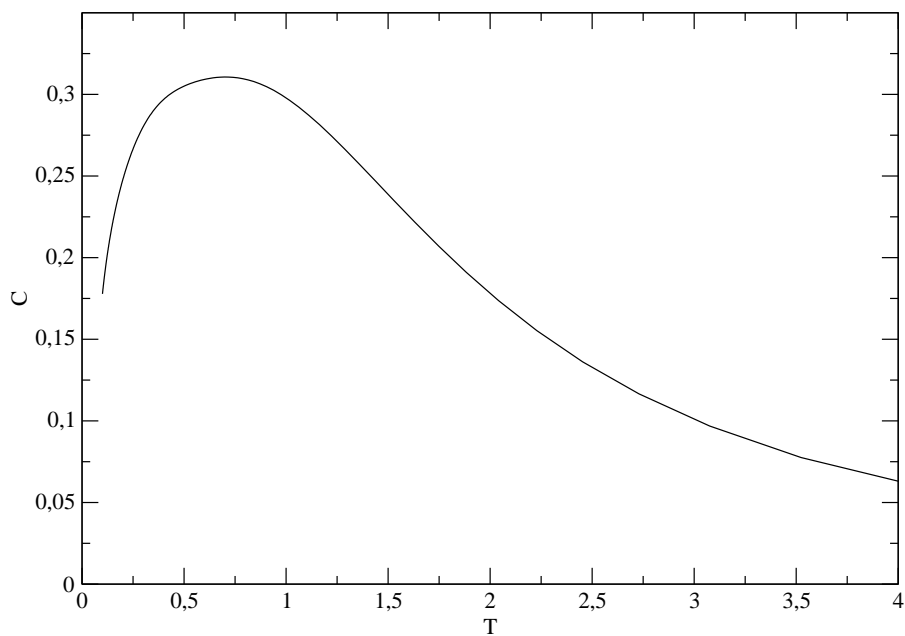


Abbildung 3.16: Berechnete Wärmekapazität des supersymmetrischen erweiterten Hubbard-Modells bei $\mu = 0$.

geben. Die Verteilungen lassen sich mit Hilfe des in Abschnitt A.3 vorgestellten Verfahrens eindeutig aus der Spektralparameterabhängigkeit der jeweiligen Eigenwerte berechnen. Die Eigenwerte selbst wurden durch direkte Diagonalisierung der Quanten-Transfermatrix gewonnen, wobei jeweils die mit den vorliegenden Programmen maximal mögliche Trotterzahl N gewählt wurde. Insgesamt besitzt die Quanten-Transfermatrix wegen ihrer Dimension q^N Eigenwerte und Eigenzustände. Das Verfahren ist prinzipiell für alle Eigenwerte durchführbar. Die an dieser Stelle vorgenommene Beschränkung auf die betragsmäßig größten Eigenwerte rührt allein daher, daß lediglich diese in den Korrelationsfunktionen (2.51) eine wesentliche Rolle spielen und aus Platzgründen nicht alle Ansatzzahlverteilungen dargestellt werden können.

Aufgrund der $SU(n,m)$ -Symmetrie sind die meisten Eigenwerte der betrachteten Modelle entartet, wobei die Entartung bei beliebigem Spektralparameter v besteht. Dies ist damit zu erklären, daß sich die Eigenzustände zu Multipletts formieren. Die Dimension dieser Multipletts, und damit die Entartung der Eigenzustände, können mit Hilfe von Young-Tableaux verstanden werden [17]. Auf diese Weise entartete Eigenzustände werden jeweils von gleichen Bethe-Ansatzzahlverteilungen charakterisiert.

Zudem kommt es am physikalisch interessanten Punkt $v = 0$, an dem die Quanten-Transfermatrix rein reell ist, zu weiterer „zufälliger“ Entartung. Die Entartung betrifft dann Eigenzustände, die von verschiedenen Bethe-Ansatzzahlverteilungen beschrieben werden. Wie sich zeigt, kann man die Bethe-Ansatzverteilungen in solchen Fällen stets durch Spiegelungen ineinander überführen.

Bei den Abbildungen der Ansatzzahlverteilungen 3.17–3.28 werden die Ansatzzahlen des ersten Satzes stets von Kreisen, die des zweiten Satzes von Kreuzen und die des dritten Satzes, der beim $SU(4)$ - und EKS-Modell auftaucht, von Kästchen repräsentiert. Die Abbildungen sind dem Betrag der zugehörigen Eigenwerte nach sortiert und mit Buchstaben des Alphabets bezeichnet. In den Fällen mit zusätzlicher Entartung bei $v = 0$ ist die Reihenfolge willkürlich gewählt. In Fällen, in denen noch eine zweite, mit einem gestrichelten Buchstaben bezeichnete Abbildung vorhanden ist, zeigt diese eine vergrößerte Darstellung der inneren Ansatzzahlen einer Verteilung.

Die Werte der Ansatzzahlen aller abgebildeten Verteilungen sind in den Tabellen des Anhangs C zusammengefaßt. Dort ist zudem, hinter den Eigenwerten, in Klammern jeweils die Anzahl der entarteten Eigenzustände zu jeder Verteilung angegeben.

Die Verteilungen wurden zudem mit Hilfe der Bethe-Ansatzgleichungen (2.70) und der Gleichung für den Eigenwert (2.67) zusätzlich überprüft. Bei einigen Eigenwerten der graduierten Modelle, d.h. des t-J-Modells und des EKS-Modells, kam es dabei zu Komplikationen. Auf diese wird in den entsprechenden Abschnitten einzeln eingegangen.

3.2.1 $SU(3)$ -symmetrisches Modell

Im $SU(3)$ -symmetrischen Modell gibt es zwei Sätze von Bethe-Ansatzzahlen. Die Verteilungen der Ansatzzahlen für die größten Eigenwerte sind einerseits den Abbildungen 3.17–3.19, andererseits den Tabellen C.1–C.4 des Anhangs C zu entnehmen. Die Berechnung erfolgte bei $u = -0.01$ und der Trotterzahl $N = 12$.

Wie man sieht, gilt für den größten Eigenwert (Abb. 3.17a), $M_1 = M_2 = N/2$. Die Verteilung der Ansatzzahlen folgt hyperbelartigen Kurven um den Ursprung, wobei dort ein Häufungspunkt vorliegt.

Der nächstführende Eigenwert (Abb. 3.17b), besitzt eine ähnliche Ansatzzahlverteilung.

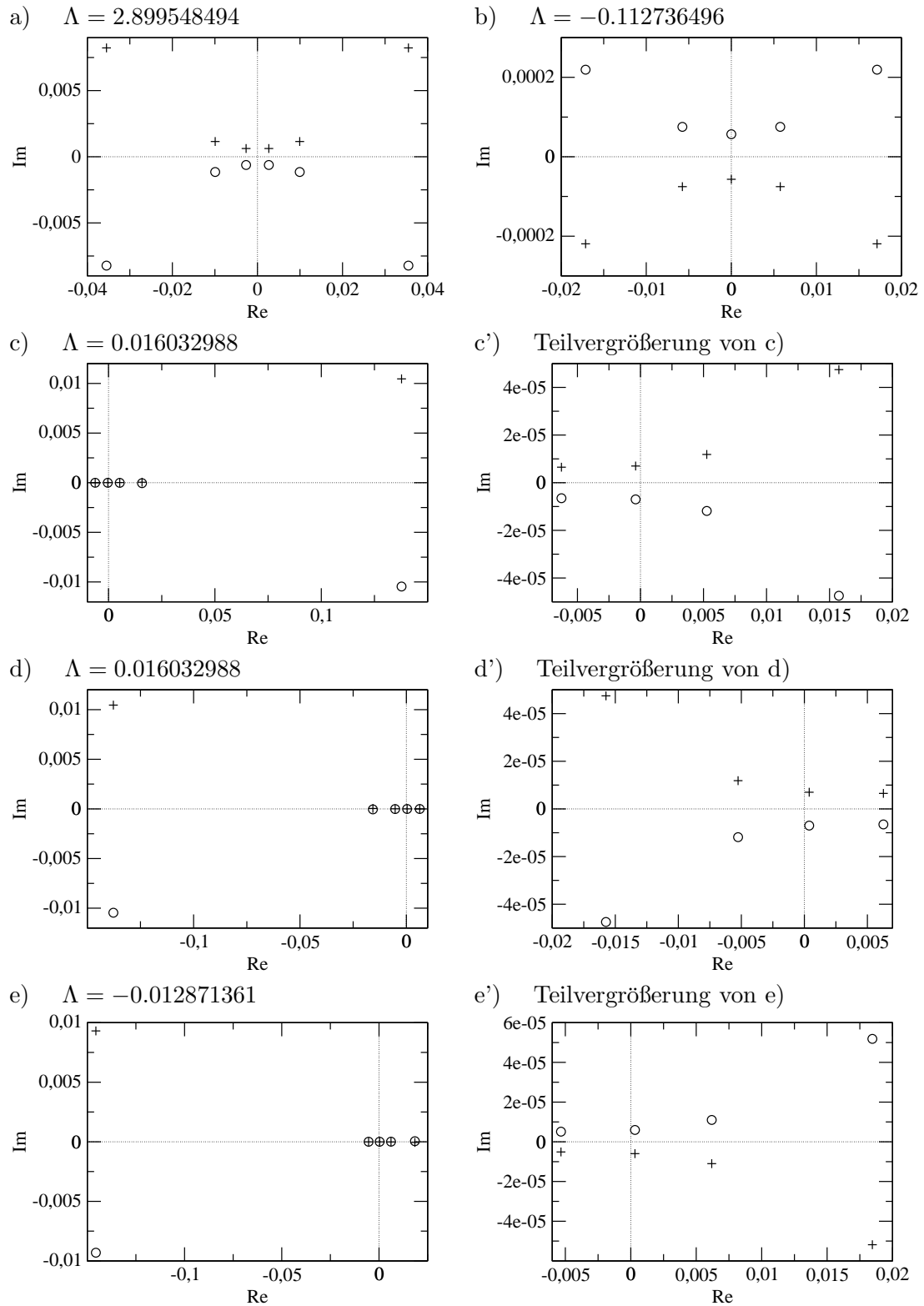


Abbildung 3.17: Ansatzzahl-Verteilungen für die größten Eigenwerte der Quanten-Transfermatrix des SU(3)-symmetrischen Modells bei Trotterzahl $N = 12$ und $u = -0.01$. (Teil 1)

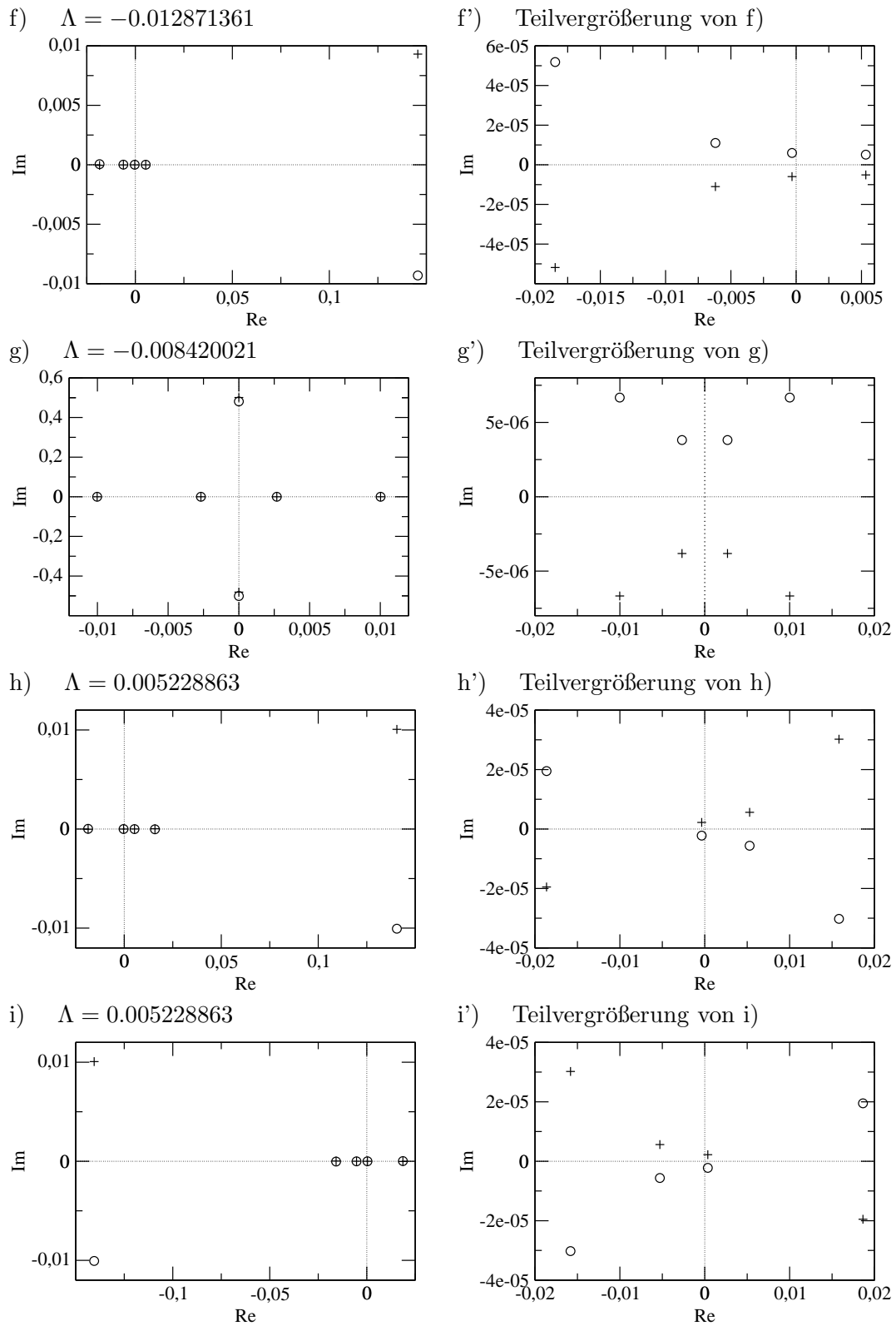


Abbildung 3.18: Ansatzzahl-Verteilungen für die größten Eigenwerte der Quanten-Transformmatrix des SU(3)-symmetrischen Modells bei Trotterzahl $N = 12$ und $u = -0.01$. (Teil 2)

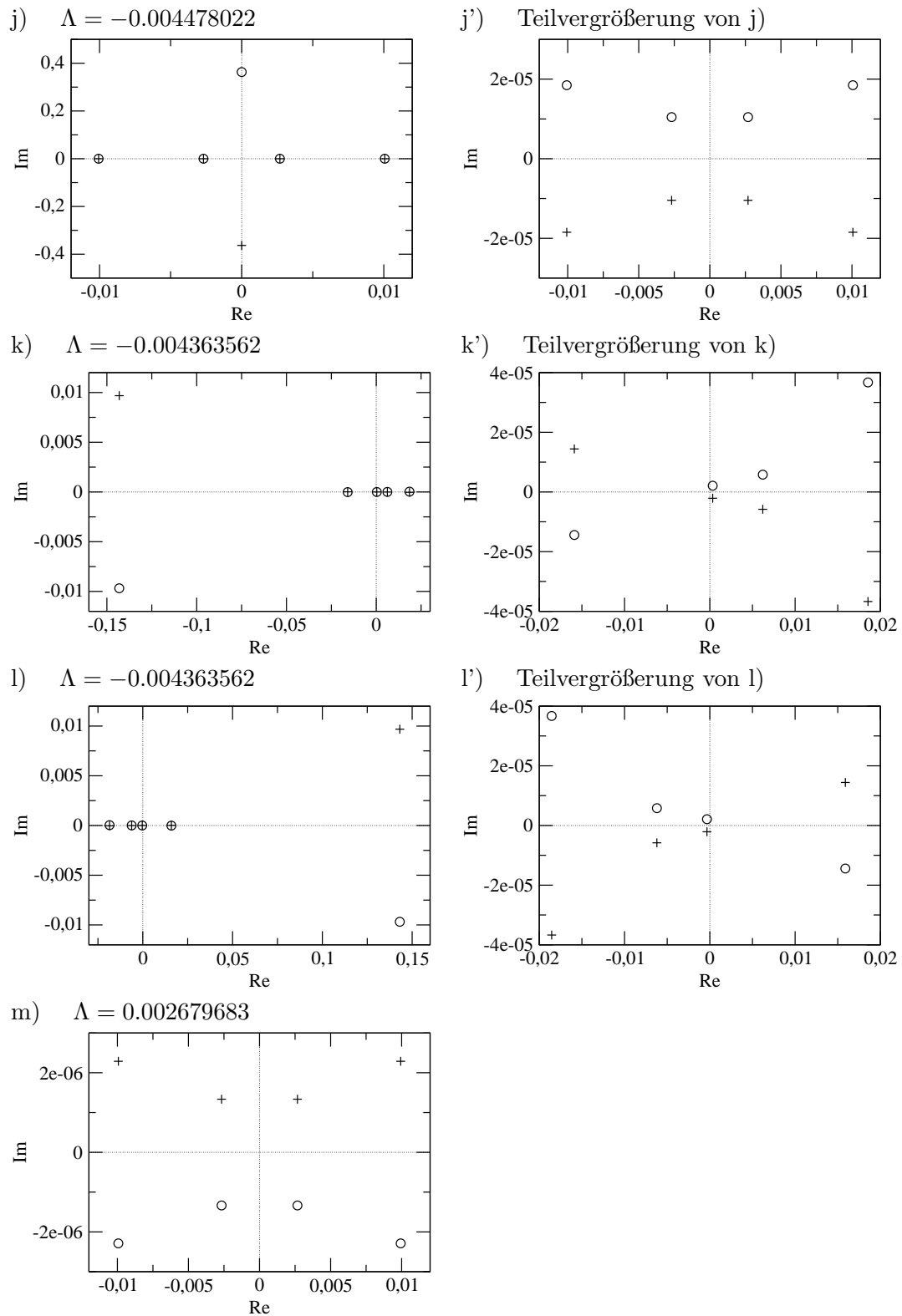


Abbildung 3.19: Ansatzzahl-Verteilungen für die größten Eigenwerte der Quanten-Transfermatrix des SU(3)-symmetrischen Modells bei Trotterzahl $N = 12$ und $u = -0.01$. (Teil 3)

Jedoch befindet dieser sich im Sektor $M_1 = M_2 = N/2 - 1$, d.h. in jedem Satz befinden sich nur fünf statt sechs Ansatzzahlen, die insgesamt näher am Ursprung liegen. Außerdem sind die Vorzeichen der Imaginärteile beider Sätze im Vergleich zur Ansatzzahlverteilung des größten Eigenwertes vertauscht. Offenbar hängt dies mit dem negativen Vorzeichen dieses Eigenwertes zusammen.

Die folgenden zwei Eigenwerte (Abb. 3.17c, 3.17d und 3.17e, 3.18f) sind jeweils bei $v = 0$ zusätzlich entartet. Auch hier befinden sich nur fünf Ansatzzahlen in jedem Satz. Die Verteilungen zu den entarteten Eigenwerten liegen asymmetrisch zum Ursprung, gehen jedoch durch Spiegelung an der imaginären Achse paarweise ineinander über.

Bei jeder dieser Verteilungen besitzt eine Ansatzzahl pro Satz einen weit größeren Imaginärteil als die anderen Ansatzzahlen. Der Unterschied beträgt ungefähr drei Größenordnungen. Um die Verteilung der kleineren Zahlen trotzdem vernünftig darstellen zu können, ist in den Abbildungen 3.17c'–3.18f' dieser Bereich noch einmal vergrößert gezeigt. Tatsächlich zeigt sich hier wieder die typische Verteilung der Zahlen auf hyperbelartigen Kurven. Bei den letzten beiden Verteilungen ist zudem der Imaginärteil der inneren Zahlen beider Ansatzzahlsätze vertauscht. Dies korrespondiert wiederum zum negativen Vorzeichen der zugehörigen Eigenwerte.

Die Ansatzzahlverteilung 3.18g enthält zwei solcher Ausreißer pro Satz, deren Imaginärteile jeweils bei ca. ± 0.5 liegen. Insgesamt sind pro Satz sechs Ansatzzahlen vorhanden; die restlichen vier Zahlen folgen der üblichen hyperbelartigen Verteilung (Abb. 3.18g').

In ähnlicher Weise läßt sich die Betrachtung auf die weiteren Eigenwerte fortführen. Abgesehen von wenigen Ausreißern, ist stets die Verteilung auf hyperbelartigen Kurven um den Ursprung zu erkennen. Ist eine Verteilung asymmetrisch zur imaginären Achse, existiert stets noch ein weiterer Eigenwert, dessen Verteilung durch Spiegelung an dieser Achse aus dem ersten hervorgeht. Beide Eigenwerte stimmen dann speziell bei $v = 0$ überein.

Die gezeigten, größten Eigenwerte des SU(3)-Modells sind alle reell. Anzumerken ist allerdings, daß sich unter den restlichen Eigenwerten der Quanten-Transfermatrix auch komplexe Werte befinden. Diese treten stets paarweise komplex konjugiert auf, da die Quanten-Transfermatrix beim betrachteten Spektralparameter $v = 0$ zwar reell, jedoch nicht symmetrisch ist.

3.2.2 SU(4)-symmetrisches Modell

Das SU(4)-symmetrische Modell wird im Bethe-Ansatz mit drei Sätzen von Ansatzzahlen beschrieben. Den Abbildungen 3.20–3.22 sind die Ansatzzahlverteilungen der größten Eigenwerte zu entnehmen. Die zugehörigen Werte der Ansatzzahlen finden sich zudem in den Tabellen C.5–C.9 des Anhangs C. Die Berechnung erfolgte bei $u = -0.01$ und der Trotterzahl $N = 10$.

Viele der Ansatzzahlverteilungen ähneln sehr den bereits vom SU(3)-Modell bekannten Mustern. Beispielsweise sind die Verteilungen der fünf größten Eigenwerte (Abb. 3.20a–3.21g) sehr ähnlich zu den bekannten Mustern 3.17a–3.18g. Der beim SU(4)-Modell zusätzlich vorhandene Satz von Zahlen liegt dabei meist komplett auf der reellen Achse. Die Realteile stimmen nahezu mit den Zahlen der anderen beiden Sätze überein.

Die Verteilung 3.21g stellt eine Ausnahme dar; hier befinden sich auch zwei Zahlen des zusätzlichen Satzes unter den Ausreißern mit einem Imaginärteil von ± 0.5 .

Ein neues Verteilungsmuster findet sich beim sechstgrößten Eigenwert in Abbildung 3.21h. Ein Satz von Zahlen liegt hier komplett auf der reellen Achse, während die übrigen zwei Sätze

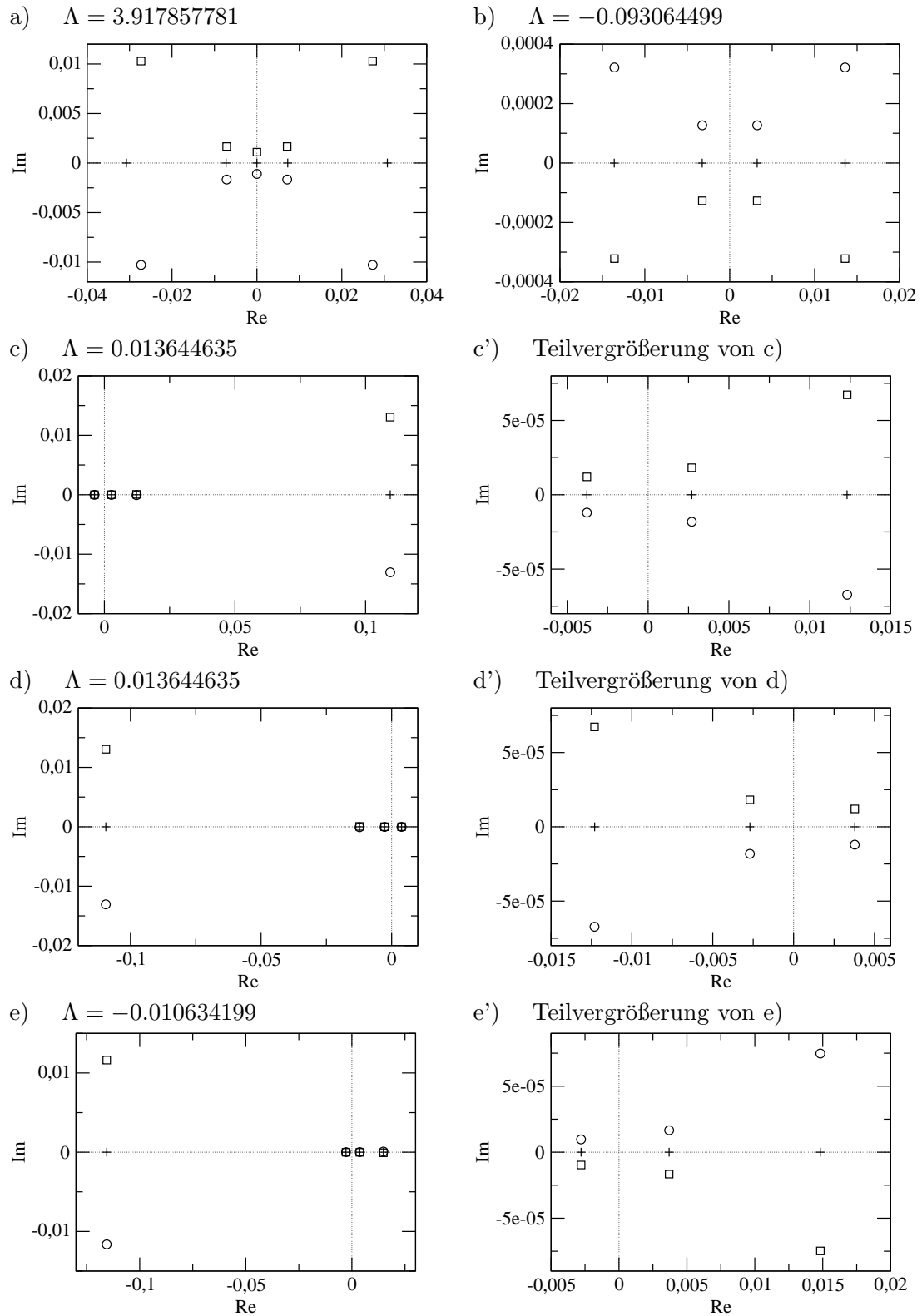


Abbildung 3.20: Ansatzzahl-Verteilungen für die größten Eigenwerte der Quanten-Transfermatrix des SU(4)-symmetrischen Modells bei Trotterzahl $N = 10$ und $u = -0.01$. (Teil 1)

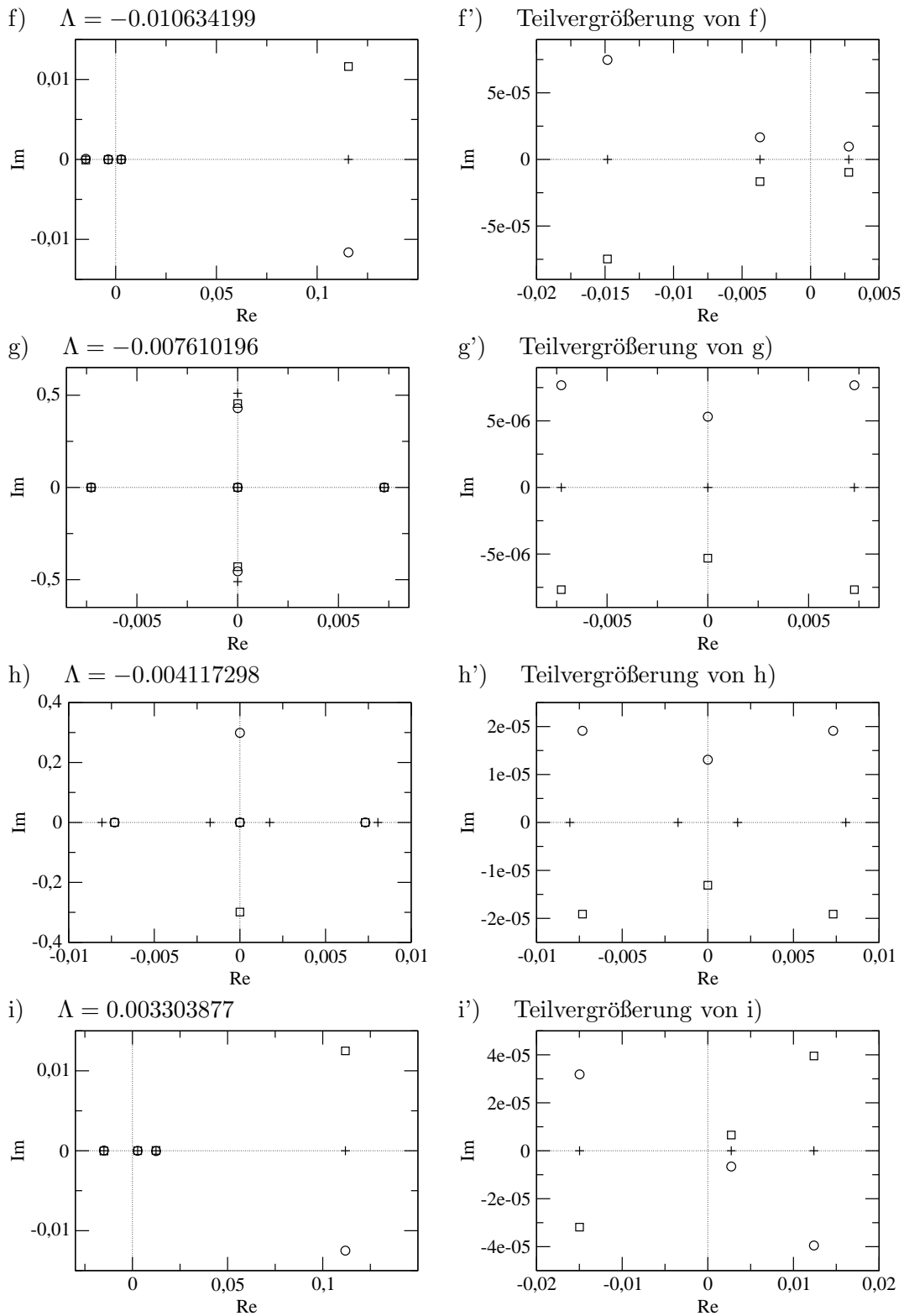


Abbildung 3.21: Ansatzzahl-Verteilungen für die größten Eigenwerte der Quanten-Transfermatrix des SU(4)-symmetrischen Modells bei Trotterzahl $N = 10$ und $u = -0.01$. (Teil 2)

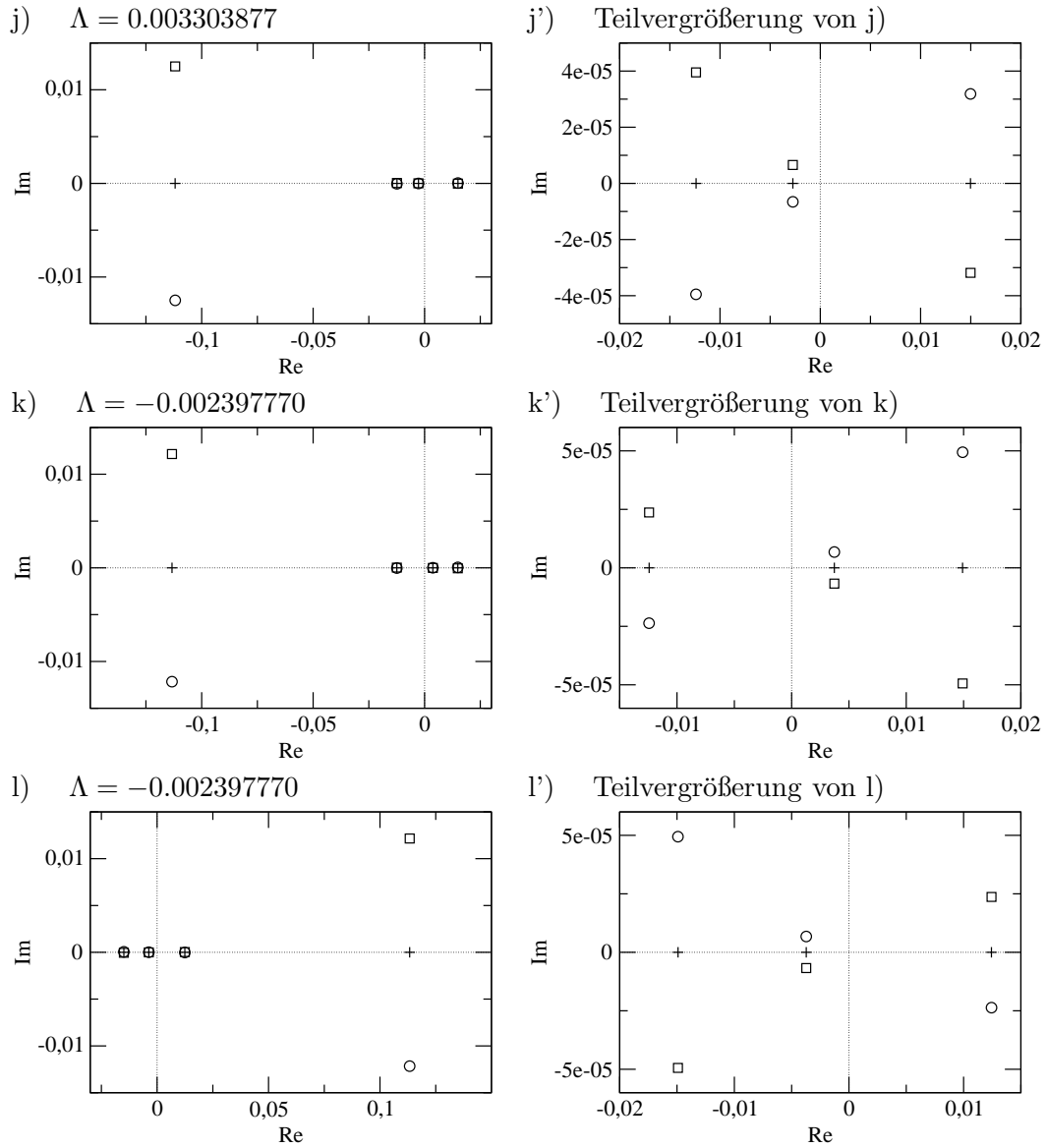


Abbildung 3.22: Ansatzzahl-Verteilungen für die größten Eigenwerte der Quanten-Transfermatrix des SU(4)-symmetrischen Modells bei Trotterzahl $N = 10$ und $u = -0.01$. (Teil 3)

jeweils einen Ausreißer mit Imaginärteil bei ungefähr 0.3 bzw. -0.3 auf der imaginären Achse besitzen.

Die letzten vier angegebenen Ansatzzahlverteilungen (Abb. 3.21i–3.22l) folgen wiederum dem aus dem $SU(3)$ -Modell bekannten System. Siehe dort die Abbildungen 3.18h–3.19k.

Auch bei diesem Modell sind die gezeigten, größten Eigenwerte reell.

3.2.3 Supersymmetrisches t-J-Modell

Das t-J-Modell wird, wie das $SU(3)$ -Modell, von zwei Sätzen von Bethe-Ansatzzahlen beschrieben. An dieser Stelle wird speziell nur die Graduierung $\epsilon_1 = -\epsilon_2 = \epsilon_3 = +1$ des zugrundeliegenden $SU(2,1)$ -Uimin-Sutherland-Modelles betrachtet. Bei dieser Wahl der Graduierung liegt bei den Verteilungen zu den größten Eigenwerten eine höhere Symmetrie vor als bei den anderen beiden Möglichkeiten, da nur hier $M_1 = M_2$ gilt.

Aus den bekannten Ansatzzahlen dieser Graduierung lassen sich nach Anhang B die übrigen Ansatzzahlverteilungen berechnen, die sich bei anderer Wahl der Graduierung ergeben würden. Alle drei möglichen Zugänge sind äquivalent zueinander und liefern dieselben Eigenwerte.

Die Ansatzzahlverteilungen zu den größten Eigenwerten der Quanten-Transfermatrix des t-J-Modells finden sich in den Abbildungen 3.23–3.25. Die Ansatzzahlen und Eigenwerte sind zudem in den Tabellen C.10–C.14 in Anhang C wiedergegeben. Die Zahlen wurden bei $u = -0.01$ und der Trotterzahl $N = 12$ berechnet.

Viele der Eigenwerte und zugehörigen Ansatzzahlverteilungen des t-J-Modells sind sehr ähnlich zu denen des $SU(3)$ -symmetrischen Modells. Dazu zählt der größte Eigenwert, dessen Ansatzzahlverteilung in Abbildung 3.23a dargestellt ist (vergleiche Abb. 3.17a).

Der zweitgrößte Eigenwert des t-J-Modells (Abb. 3.23b) kommt nicht im $SU(3)$ -Modell vor. Bei der Berechnung der Bethe-Ansatzzahlen zu diesem Eigenwert traten zudem Komplikationen auf, da sich der Eigenwert mit Hilfe der Gleichung (2.67) nicht reproduzieren läßt. Es zeigt sich stattdessen, daß diese für einige der Eigenwerte des t-J-Modells offenbar nicht anwendbar ist. Werden darin in diesen Fällen jedoch die Funktionen $\lambda_j(v)$ gegen $\epsilon_j \lambda_j(v)$ ersetzt, und auch die Vorzeichen der daraus abgeleiteten Bethe-Ansatzgleichungen entsprechend angepaßt, ergibt sich wieder eine hervorragende Übereinstimmung mit dem aus der Diagonalisierung bekannten Ergebnis.

Der drittgrößte Eigenwert des t-J-Modells (Abb. 3.23c) macht keine Probleme. Eine sehr ähnliche Verteilung findet sich im $SU(3)$ -Modell beim zweitgrößten Eigenwert (Abb. 3.17b).

Die Ansatzzahlverteilung 3.23d enthält ein neues Muster. Die folgenden Abbildungen 3.23e–3.24h sind bereits ähnlich aus dem $SU(3)$ -Modell bekannt (siehe dort Abb. 3.17c–3.18f).

Die beim zweitgrößten Eigenwert angesprochene Problematik taucht erneut bei den beiden Verteilungen aus Abbildung 3.24i und 3.24j auf. Diese sind erst nach der angesprochenen Anpassung der Vorzeichen mit den Bethe-Ansatzgleichungen kompatibel.

Die folgenden, im t-J-Modell neuen Eigenwerte sind besonders interessant (siehe Abb. 3.25k–3.25n). Diese sind nämlich komplex, und treten in jeweils bei $v = 0$ zusätzlich zweifach entarteten, komplex konjugierten Paaren auf. Das Auftreten in komplex konjugierten Paaren ist damit zu erklären, daß die Quanten-Transfermatrix bei $v = 0$ rein reell ist, wie bereits zuvor angemerkt wurde.

Die zugehörigen Ansatzzahlverteilungen besitzen, anders als in den Fällen reeller Eigenwerte, keine Spiegelsymmetrie. Allerdings kann man die Verteilungen durch Spiegelungen ineinander überführen. Eine Spiegelung an der imaginären Achse führt dabei zu einem geänder-

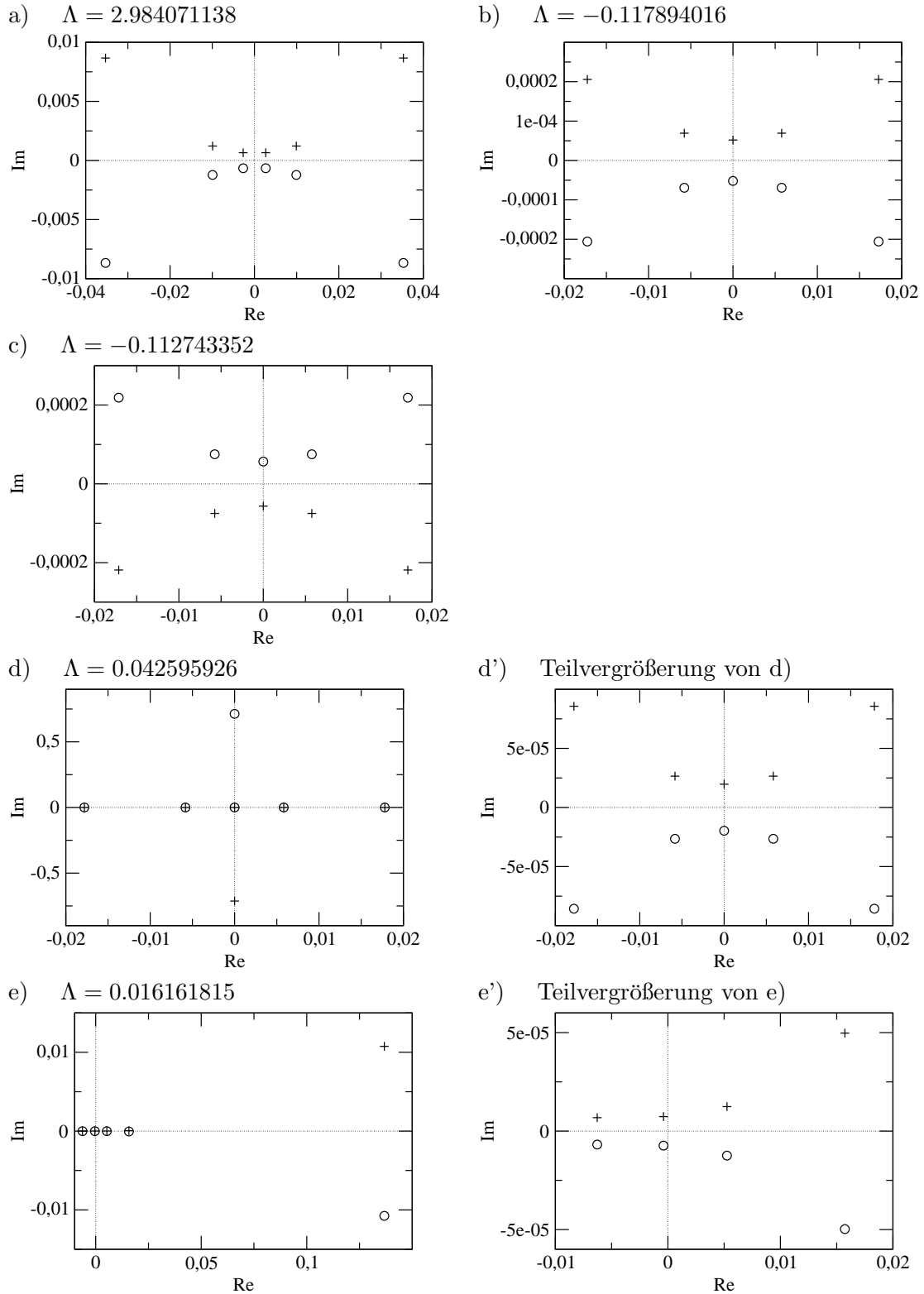


Abbildung 3.23: Ansatzzahl-Verteilungen für die größten Eigenwerte der Quanten-Transfermatrix des supersymmetrischen t-J-Modells bei Trotterzahl $N = 12$ und $u = -0.01$. (Teil 1)

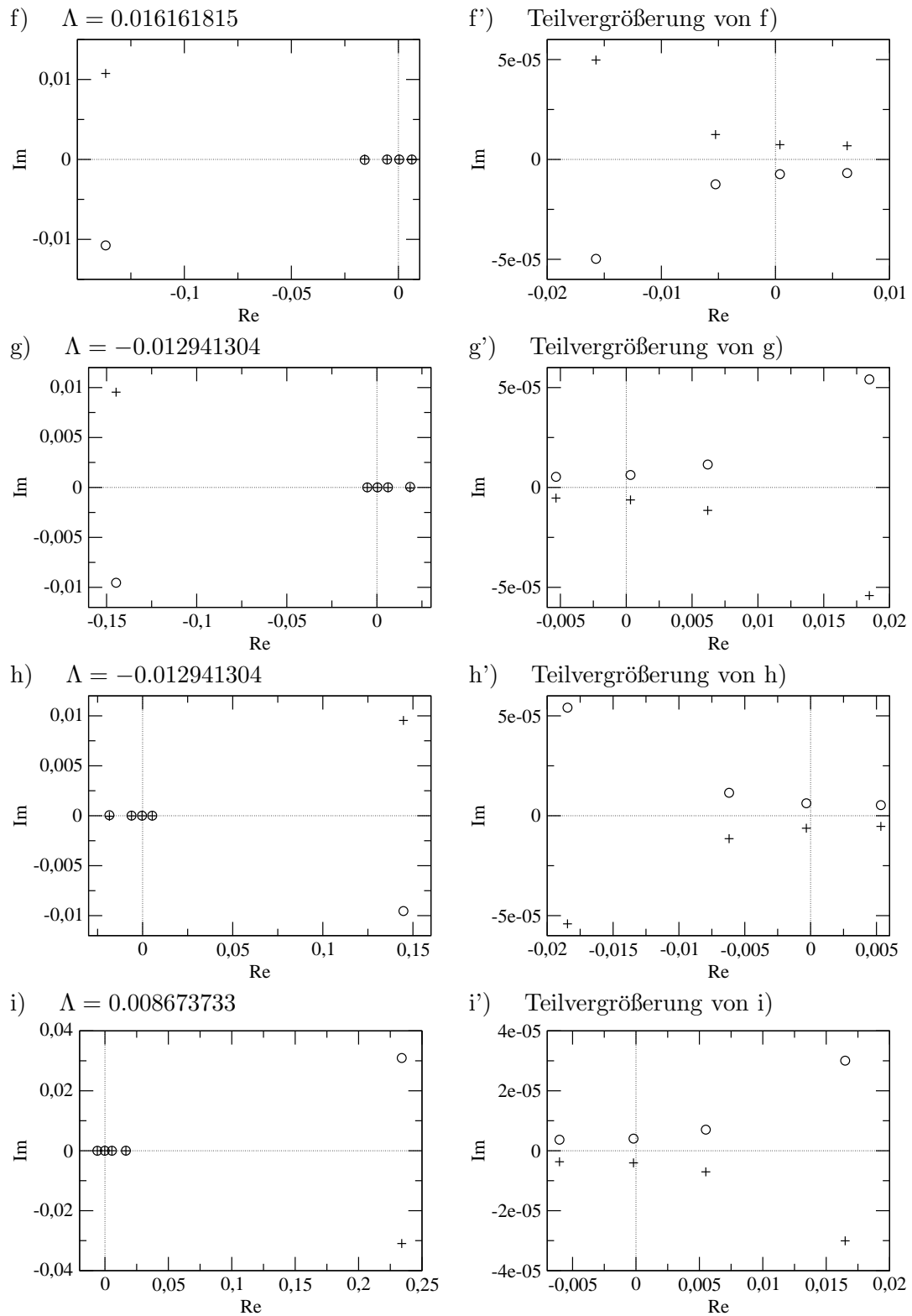


Abbildung 3.24: Ansatzzahl-Verteilungen für die größten Eigenwerte der Quanten-Transfermatrix des supersymmetrischen t-J-Modells bei Trotterzahl $N = 12$ und $u = -0.01$. (Teil 2)

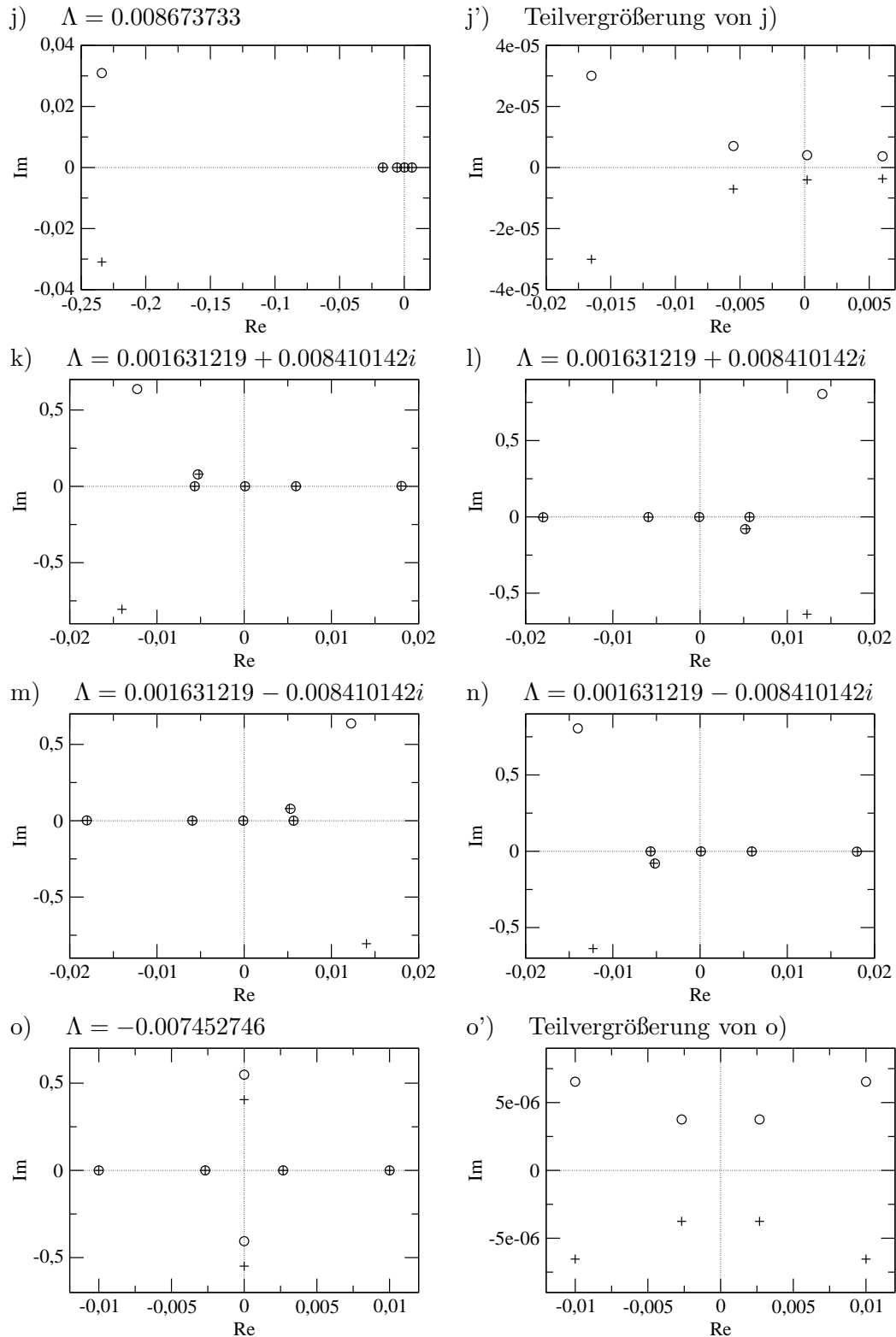


Abbildung 3.25: Ansatzzahl-Verteilungen für die größten Eigenwerte der Quanten-Transfermatrix des supersymmetrischen t-J-Modells bei Trotterzahl $N = 12$ und $u = -0.01$. (Teil 3)

ten Vorzeichen des Imaginärteils des Eigenwertes. Eine Punktspiegelung am Ursprung mit anschließender Vertauschung der beiden Ansatzzählsätze führt jeweils auf die Verteilung des bei $v = 0$ entarteten Eigenwertes.

Durch die betragsmäßig großen komplexen Eigenwerte machen sich Oszillationen in den Korrelationsfunktionen des t-J-Modells bereits bei geringen Abständen bemerkbar.

Der letzte der hier betrachteten Eigenwerte, dessen zugehörige Verteilung der Abbildung 3.25o zu entnehmen ist, ist wiederum rein reell. Die entsprechende Bethe-Ansatzzahlverteilung verläuft symmetrisch zur imaginären Achse mit üblicher hyperbelartiger Verteilung der Zahlen und jeweils zwei Ausreißern in jedem Satz mit verschwindendem Realteil und Imaginärteilen in der Nähe von ± 0.5 .

3.2.4 Supersymmetrisches erweitertes Hubbard-Modell

Ähnlich wie das SU(4)-symmetrische Modell, wird auch das supersymmetrische erweiterte Hubbard-Modell von drei Sätzen von Bethe-Ansatzzahlen beschrieben. Wie schon zuvor beim t-J-Modell wird hier eine der möglichen Graduierungen untersucht, bei der ein hohes Maß an Symmetrie der Bethe-Ansatzzahlverteilungen zu erwarten ist. Bei der gewählten Graduierung $\epsilon_1 = -\epsilon_2 = -\epsilon_3 = \epsilon_4 = +1$ gilt für die zu den größten Eigenwerten zugehörigen Ansatzzahlverteilungen stets $M_1 = M_3$.

Die konkrete Wahl der Graduierung hat jedoch auch hier (siehe Anhang B) keinen Einfluß auf das Eigenwertspektrum. Die Ansatzzahlverteilungen lassen sich problemlos auch in die anderen möglichen Fälle umrechnen, bei denen die beiden positiven und negativen Graduierungen an anderen Spinkomponenten vorgenommen werden.

Die Ansatzzahlverteilungen, die die führenden Eigenwerte bzw. Eigenzustände beschreiben, sind in den Abbildungen 3.26–3.28 gezeigt. Zudem sind die Werte der Ansatzzahlen den Tabellen C.15–C.19 des Anhangs C zu entnehmen. Die Berechnung der angegebenen Ansatzzahlverteilungen erfolgte bei $u = -0.01$ und der Trotterzahl $N = 10$.

Auf den ersten Blick fällt hier die Ähnlichkeit des Eigenwertspektrums zu demjenigen des SU(4)-symmetrischen Modelles auf. Viele der Eigenwerte und zugehörigen Ansatzzahlverteilungen finden sich nahezu unverändert auch im EKS-Modell wieder. Die Verteilungen zu den größten Eigenwerten sind beispielsweise nahezu identisch (Abb. 3.20a bzw. 3.26a).

Das EKS-Modell verfügt jedoch über zusätzliche Eigenwerte, die im SU(4)-Modell nicht vorkommen, beispielsweise die beiden nächstführenden Eigenwerte (Abb. 3.26b und 3.26c). Besonders ist hier außerdem, daß beim zweitgrößten Eigenwert nicht mehr alle Sätze gleich viele Ansatzzahlen enthalten. Stattdessen gilt hier $M_1 = M_3 = 5$, während $M_3 = 4$ ist.

Bei der Berechnung der Bethe-Ansatzzahlverteilung zum drittgrößten Eigenwert (Abb. 3.26c) kommt es zu den bereits im t-J-Modell aufgetretenen Problemen. Erst nach Anpassung der Vorzeichen in Gleichung (2.67) und aller daraus abgeleiteten Gleichungen mittels Ersetzung der Funktionen $\lambda_j(v)$ durch $\epsilon_j \lambda_j(v)$ kann dieser Eigenwert mit Hilfe der berechneten Ansatzzahlverteilung reproduziert werden. Für alle weiteren hier angegebenen Eigenwerte gilt (2.67) jedoch in der ursprünglichen Form.

Die Ansatzzahlverteilungen 3.26d–3.27f finden sich mit nahezu gleichen Werten und mit sehr ähnlichen Eigenwerten auch im SU(4)-Modell wieder. Siehe dort die Muster 3.20b–3.20d.

Die beim SU(4)-Modell direkt folgenden Verteilungen 3.20e und 3.21f finden sich beim EKS-Modell zwar auch wieder, jedoch erst an den Positionen 3.27k bzw. 3.28l.

Dazwischen verfügt das EKS-Modell über zusätzliche, komplexe Eigenwerte (Abb. 3.27g–3.28j). Damit machen sich Oszillationen in den Korrelationsfunktionen hier, ähnlich wie beim

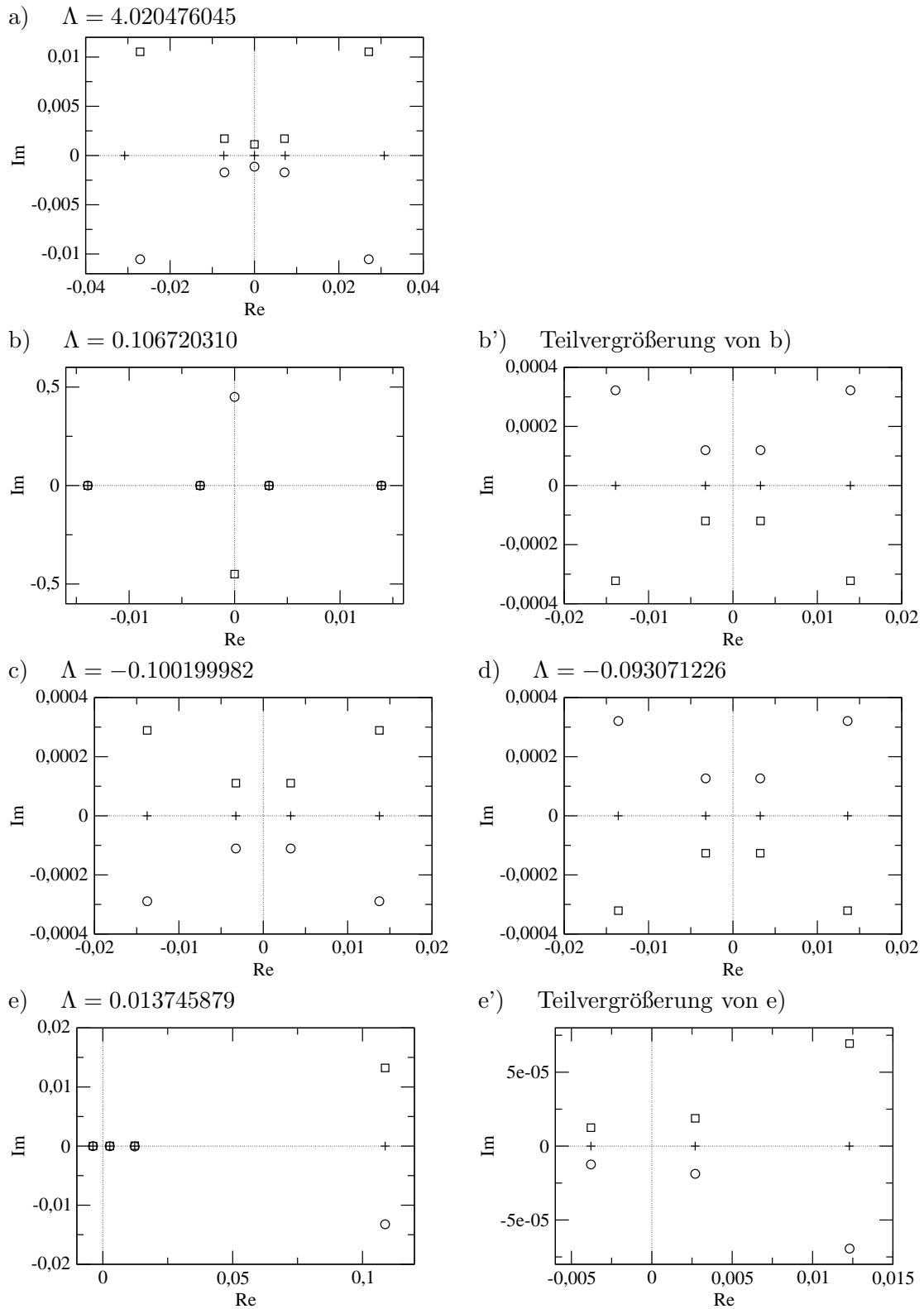


Abbildung 3.26: Ansatzzahl-Verteilungen für die größten Eigenwerte der Quanten-Transfermatrix des supersymmetrischen erweiterten Hubbard-Modells bei Trotterzahl $N = 10$ und $u = -0.01$. (Teil 1)

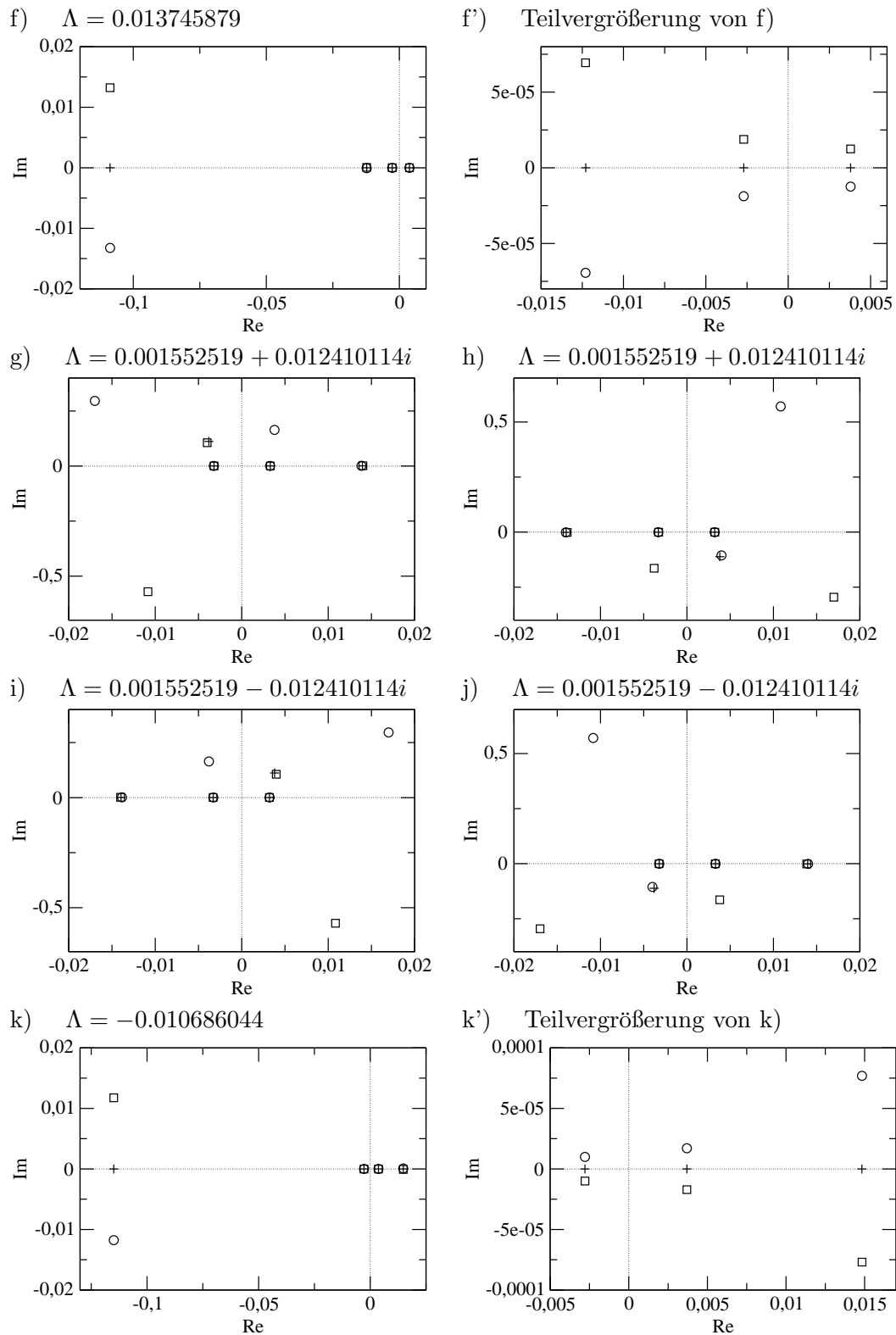


Abbildung 3.27: Ansatzzahl-Verteilungen für die größten Eigenwerte der Quanten-Transfermatrix des supersymmetrischen erweiterten Hubbard-Modells bei Trotterzahl $N = 10$ und $u = -0.01$. (Teil 2)

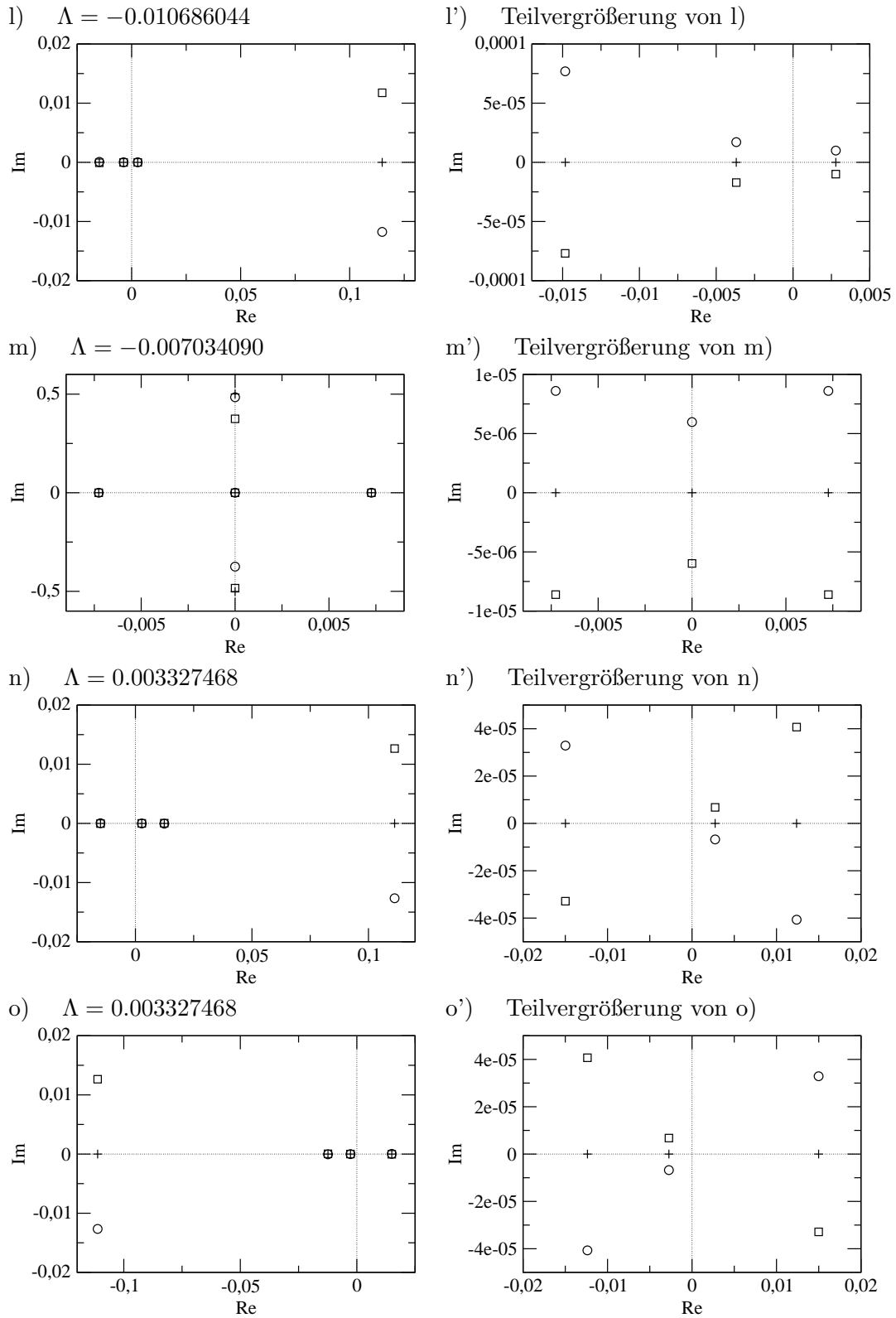


Abbildung 3.28: Ansatzzahl-Verteilungen für die größten Eigenwerte der Quanten-Transformmatrix des supersymmetrischen erweiterten Hubbard-Modells bei Trotterzahl $N = 10$ und $u = -0.01$. (Teil 3)

t-J-Modell, früher bemerkbar als im nichtgraduierten Fall. Die Ansatzzahlverteilungen ähneln sehr denjenigen der komplexen Eigenwerte des t-J-Modells (vergleiche Abb. 3.25k–3.25n). Wie dort sind die Verteilungen asymmetrisch zum Ursprung, lassen sich jedoch über Spiegelungen ineinander überführen.

Der Eigenwert zur Verteilung aus 3.28m kommt ähnlich auch im SU(4)-Modell unter 3.21g vor. Jedoch unterscheiden sich die Werte der Ansatzzahlen und die Eigenwerte hier stärker voneinander, als bei den vorher betrachteten Verteilungen.

Die Muster 3.28n und 3.28o finden sich dagegen wiederum nahezu unverändert auch im SU(4)-Modell (Abb. 3.21i, 3.22j). Einer der angegebenen Eigenwerte des SU(4)-Modells (Abb. 3.21h) kommt im EKS-Modell jedoch nicht vor.

3.2.5 Abschließende Bemerkung

Insgesamt erkennt man anhand der berechneten Verteilungen die enge Verwandtschaft der Modelle zueinander. Die Ansatzzahlverteilungen folgen zwar vielfältigen, jedoch stets ähnlichen Mustern. Stets ist der Ursprung als Häufungspunkt zu erkennen, um den sich die Ansatzzahlen, bis auf einige weit außerhalb liegende Zahlen, auf hyperbelartigen Kurven verteilen.

Bei $v = 0$ zusätzlich entartete Eigenwerte und solche, die in komplex konjugierten Paaren vorkommen, besitzen asymmetrische Bethe-Ansatzzahlverteilungen, die sich jedoch über Spiegelungen ineinander überführen lassen. Eine Spiegelung einer bestimmten Verteilung an der imaginären Achse dreht dabei das Vorzeichen des Imaginärteils des Eigenwertes um. Eine Punktspiegelung am Ursprung mit anschließender Vertauschung der Reihenfolge der Ansatzzahlen überführt einen Eigenwert in sich selbst.

Ein weiteres interessantes Ergebnis ist, daß die Gleichung (2.67), welche im Rahmen des Bethe-Ansatzes alle Eigenwerte liefern sollte, für graduierte Modelle in der angegebenen Form offenbar nicht universell gültig ist. In bestimmten Fällen müssen aus der Graduierung stammende, zusätzliche Vorzeichen in die Gleichung eingebaut werden. Einige Eigenwerte (siehe Abb. 3.23b, 3.24i, 3.25j, 3.26c) konnten mit Hilfe von (2.67) nur reproduziert werden, wenn dabei die Funktionen $\lambda_j(v)$ durch $\epsilon_j \lambda_j(v)$ ersetzt wurden. Auch die Bethe-Ansatzgleichungen (2.70) waren erst nach entsprechender Anpassung der Vorzeichen erfüllt.

Die Wahl der Vorzeichen hat dabei nichts mit der Anzahl M_j der Ansatzzahlen zu tun, die sich in jedem Satz j befinden. Stattdessen scheint die Entartung der Eigenwerte eine Rolle zu spielen. Beim SU(3)- und SU(4)-Modell läßt sich eine eindeutige Verbindung zwischen den Werten der M_j und der Entartung der Eigenwerte herstellen. Beim t-J- und EKS-Modell existieren dagegen teilweise zwei unterschiedliche Entartungsgrade zur selben Konfiguration der M_j (siehe Angaben in den Tabellen in Anhang C). Bei einem der beiden Entartungsgrade muß Gleichung (2.67) modifiziert werden.

Kapitel 4

Zusammenfassung und Ausblick

In dieser Arbeit wurden integrable, eindimensionale Spinketten mit $SU(n,m)$ -Symmetrie untersucht. Ein generalisiertes Modell mit diesen Eigenschaften ist in Kapitel 2 vorgestellt, das Uimin-Sutherland-Modell.

Es wurde gezeigt, daß sich Modelle dieses Typs durch Trotter-Zerlegung der Zustandssumme äquivalent auf zweidimensionale Gittersysteme abbilden lassen, die ebenfalls $SU(n,m)$ -Symmetrie besitzen. Diese Gittersysteme konnten als eine erweiterte Form des Perk-Schultz-Modells identifiziert werden, bei der abwechselnd Reihen mit verschiedenen Boltzmann-gewichten gestapelt sind.

Für dieses Gittermodell wurde eine angepaßte Transfermatrix definiert, die sogenannte Quanten-Transfermatrix, die alternierend aus gewöhnlichen und gedrehten R -Matrizen des Perk-Schultz-Modells aufgebaut ist. Es wurde dabei festgestellt, daß durch Einführung eines Spektralparameters v eine kommutierende Familie solcher Quanten-Transfermatrizen konstruiert werden kann, deren Diagonalisierung unter Ausnutzung der Yang-Baxter-Algebra im Rahmen des geschachtelten Bethe-Ansatzes möglich ist. Es wurde angegeben, wie die Eigenwerte der Quanten-Transfermatrix genutzt werden können, um im thermodynamischen Limes Zustandssumme und Korrelationsfunktionen des Gittermodells bei endlichen Temperaturen zu berechnen. Auch der Einfluß von chemischen Potentialen und mit der Symmetriegruppe kompatiblen äußeren Feldern wurde berücksichtigt. Anhand der aus dem (hier nicht explizit durchgeführten) geschachtelten Bethe-Ansatz folgenden Eigenwertgleichung wurden die Bethe-Ansatzgleichungen aufgestellt.

Vier spezielle physikalische Modelle wurden vorgestellt, die sich auf Spezialfälle des Uimin-Sutherland-Modells abbilden lassen. Im einzelnen sind dies das $SU(3)$ -symmetrische Modell, welches äquivalent zu einer gewissen $SU(2)$ -Spin-1-Kette ist, ein Spin-Orbital-Modell mit $SU(4)$ -Symmetrie, das supersymmetrische t-J-Modell und das supersymmetrische erweiterte Hubbard-Modell.

Mit Hilfe des Newton-Verfahrens wurden die Bethe-Ansatzgleichungen für diese Systeme bei endlicher Trotterzahl für den größten Eigenwert der Quanten-Transfermatrix numerisch gelöst. Aus den gewonnenen Daten konnten mit guter Genauigkeit die wichtigsten thermodynamischen Größen, wie die freie Energie, die Entropie und Wärmekapazität der Systeme berechnet werden. Dabei wurde der durch Betrachtung endlicher Trotterzahlen auftretende systematische Fehler abgeschätzt.

Zudem wurde gezeigt, wie sich aus der Spektralparameterabhängigkeit bekannter Eigenwerte der Quanten-Transfermatrix eindeutig die zugehörigen Bethe-Ansatzzahlverteilungen

berechnen lassen. Die größten Eigenwerte und zugehörigen Eigenzustände der betrachteten Systeme wurden über eine direkte numerische Diagonalisierung der Quanten-Transfermatrix bei geringer Trotterzahl bestimmt. Anhand dieser Daten wurden die entsprechenden Bethe-Ansatzzahlverteilungen berechnet und die Eigenzustände klassifiziert. Die Ergebnisse finden sich in Kapitel 3, die verwendeten numerischen Methoden sind in Anhang A zusammengefaßt. Die Ansatzzahlverteilungen sind konsistent mit den Bethe-Ansatzgleichungen.

Schließlich wurde in Anhang B gezeigt, wie die verschiedenen Möglichkeiten, eine bestimmte Graduierung in die Eigenwertgleichung und die Bethe-Ansatzgleichungen einzubauen, zusammenhängen. Dabei wurde festgestellt, daß alle dabei möglichen Varianten zueinander äquivalent sind. Die Bethe-Ansatzzahlverteilungen sind jeweils unterschiedlich, können aber ineinander umgerechnet werden. Das Eigenwertspektrum ist dagegen stets das gleiche.

Leider erwiesen sich die Lösungen der Bethe-Ansatzgleichungen zu den nächstführenden Eigenwerten als numerisch instabil. Diese Eigenwerte konnten mit den verwendeten Methoden nur bei geringen Trotterzahlen berechnet werden. Damit war es nicht möglich, Korrelationslängen bei endlicher Temperatur mit ausreichender Genauigkeit zu bestimmen. Die Berechnung von Korrelationslängen in diesem Zugang bleibt damit ein offenes Problem.

Ein weiteres Problem ist, daß der durch die Betrachtung endlicher Trotterzahlen vorhandene systematische Fehler bei $T \rightarrow 0$ wie $1/T$ divergiert. Für die Berechnung thermodynamischer Größen aus der direkten Lösung der Bethe-Ansatzgleichungen bei sehr kleinen Temperaturen $T \lesssim 0.05$ sind daher unrealistisch hohe Trotterzahlen ($N \gtrsim 10000$) nötig.

Das Problem kann jedoch in einem alternativen Zugang mit Hilfe von nichtlinearen Integralgleichungen gelöst werden, wobei der Trotterlimes analytisch durchgeführt werden kann. Gelingt es, ein geschlossenes System mit endlich vielen dieser Integralgleichungen zu formulieren, die zudem eine für numerische Berechnungen günstige Form besitzen, kann die Thermodynamik auch im Tieftemperaturbereich sauber beschrieben werden. Für das SU(3)-Modell und das supersymmetrische t-J-Modell sind solche Integralgleichungen bekannt [27, 22, 16]. Im Falle des SU(4)-symmetrischen Modells und des supersymmetrischen erweiterten Hubbard-Modells steht eine geeignete Formulierung allerdings noch aus.

Kurz vor Abschluß der Arbeit wurden bei der Berechnung der Ansatzzahlen zu bestimmten Eigenwerten der Quanten-Transfermatrix des t-J- und des EKS-Modells Unstimmigkeiten zu (2.67) und den daraus hergeleiteten Bethe-Ansatzgleichungen festgestellt. Für graduierte Modelle ist diese Gleichung, welche [16] entnommen wurde, möglicherweise nicht für alle Eigenwerte der Quanten-Transfermatrix gültig. In bestimmten Fällen müssen darin offenbar die Vorzeichen vor den Funktionen $\lambda_j(v)$ an die gewählte Graduierung angepaßt werden. Warum dieses Problem auftaucht, konnte im Rahmen der vorliegenden Arbeit nicht ermittelt werden und bleibt eine offene Fragestellung, die näher untersucht werden sollte.

Anhang A

Numerische Methoden

In diesem Anhang werden die numerischen Verfahren betrachtet, mit denen die in Kapitel 3 angegebenen Ergebnisse berechnet wurden. Dabei wurden drei Problemstellungen behandelt. Zum einen das numerische Auffinden von Lösungen der Bethe-Ansatzgleichungen für möglichst große Systeme (d.h. bei großer Trotterzahl N), um die Thermodynamik des Systems bei endlicher Temperatur mit guter Genauigkeit (Ordnung $\mathcal{O}(\beta/N)$) berechnen zu können. Als zweites die Bestimmung des Eigenwertspektrums der Quanten-Transfermatrix für kleine Systeme. Und schließlich die Berechnung der Bethe-Ansatzzahlen zu den aus der Diagonalisierung der Quanten-Transfermatrix bekannten Eigenzuständen.

A.1 Numerische Lösung der Bethe-Ansatzgleichungen

Die Bethe-Ansatzgleichungen (2.70) bilden ein gekoppeltes, nichtlineares Gleichungssystem in den unbekanntem Ansatzzahlen $v_{k_j}^j \in \mathbb{C}$. Für jeden Satz j von Ansatzzahlen mit M_j Elementen erhält man auch M_j Gleichungen. Insgesamt kommt man also auf

$$M_{\text{ges}} = M_1 + \dots + M_{q-1} \quad (\text{A.1})$$

gekoppelte Gleichungen und die gleiche Anzahl an Unbekannten.

Da die angegebene Form der Eigenwertgleichung (2.67), aus der die Ansatzgleichungen (2.70) hergeleitet wurden, universell für alle Eigenwerte gültig ist, muß zu jedem möglichen Eigenwert der Quanten-Transfermatrix stets eine Lösung der Ansatzgleichungen existieren. In Abschnitt A.3 zeigt sich, daß eine Lösung zu einem bestimmten Eigenwert sogar eindeutig ist.

Anzumerken ist allerdings, daß viele der Eigenwerte aufgrund der $SU(n,m)$ -Symmetrie der Quanten-Transfermatrix entartet sind. Faßt man die Bethe-Ansatzzahlen als Quantenzahlen der Eigenzustände des Systems auf, werden derartig entartete Eigenzustände in dieser Beschreibung nicht voneinander unterschieden.

Die M_j , $j = 1, \dots, q-1$, die beschreiben, wie viele Ansatzzahlen in jedem Satz zu verwenden sind, können Werte im Bereich $0 \leq M_j \leq N/2$ annehmen. Eine bestimmte Konfiguration der M_j soll im folgenden als *Sektor* bezeichnet werden. Jeder Eigenwert kann anhand der M_j der zugehörigen Bethe-Ansatz-Lösung einem Sektor zugeordnet werden. Dabei ist von vorneherein jedoch nicht klar, in welchem Sektor die Lösung zu einem bestimmten Eigenwert zu suchen ist.

Es zeigt sich zudem daß die Bethe-Ansatzgleichungen (2.70) insgesamt mehr Lösungen besitzen als solche, die tatsächlich mit einem Eigenwert der Quanten-Transfermatrix korrespondieren. Ohne weitere Informationen ist einer konkreten Lösung der Bethe-Ansatzgleichungen nicht anzusehen, ob diese tatsächlich relevant ist.

Aus diesen Gründen ist es nötig, sich mit Hilfe eines alternativen Lösungsverfahrens einen Überblick der relevanten Lösungen der Bethe-Ansatzgleichungen zu verschaffen. Ein entsprechendes Verfahren wird in Abschnitt A.3 vorgestellt.

Lediglich die Identifikation der zum größten Eigenwert gehörigen Lösung ist relativ unproblematisch. Dieser ist nicht entartet und geht bei Vertauschung von beliebigen Spinkomponenten gleicher Graduierung in sich selbst über. Daraus kann man schließen, daß sich die Lösung im Sektor $M_j = N/2$ für $j = 1, \dots, q - 1$ befinden muß.

Weiterhin ist bekannt, daß der größte Eigenwert im Limes $T \rightarrow \infty$ ($\beta \rightarrow 0$) gegen die Zahl q der Komponenten des Systemes strebt, da die Quanten-Transfermatrix für $v = 0$ und $u = 0$ in eine simple Form übergeht, deren einziger von Null verschiedener Eigenwert q ist.

A.1.1 Newton-Verfahren

Zur Lösung nichtlinearer Gleichungssysteme existiert kein allgemeines analytisches Lösungsverfahren. Mit Hilfe iterativer Lösungsmethoden ist es in den meisten Fällen numerisch möglich, ausgehend von geeigneten Startwerten für die unbekannt Zahlen in akzeptabler Zeit eine konkrete Lösung zu finden.

In diesem Zusammenhang ist das *Newton-Verfahren* von besonderer Bedeutung, da dieses Verfahren bei hoher numerischer Stabilität in den meisten Fällen gleichzeitig ein gutes Konvergenzverhalten besitzt. Eine gute Einführung in die Anwendung dieses Verfahrens, nebst geeigneten Algorithmen, findet sich in [24, 35]. An dieser Stelle soll nur ein kurzer Abriß gegeben werden. Details zu den genauen Bedingungen, unter denen das Verfahren konvergiert, finden sich in [24].

Ziel des Newton-Verfahrens ist das Auffinden von Nullstellen einer im allgemeinen vektorwertigen Funktion $\mathbf{F} : \mathbb{C}^d \rightarrow \mathbb{C}^d$. Man sucht also eine Lösung \mathbf{x}^* dergestalt, daß

$$\mathbf{F}(\mathbf{x}^*) = 0 \tag{A.2}$$

erfüllt ist.

Um \mathbf{x}^* zu bestimmen, setzt man zuerst mit einer bereits bekannten groben Näherung der Nullstelle als Startwert \mathbf{x}_0 an. Ist über die gesuchte Nullstelle dagegen nichts bekannt, müssen die Startwerte „geraten“ werden, in der Hoffnung, daß diese hinreichend nahe an der gesuchten Nullstelle liegen. Durch wiederholte Anwendung des folgenden Verfahrens bildet man dann eine Folge von Vektoren \mathbf{x}_n , die sogenannte *Newton-Folge*, welche im Falle der Konvergenz des Verfahrens im Limes $n \rightarrow \infty$ gegen die gesuchte Nullstelle \mathbf{x}^* strebt.

Man nähert die Funktion \mathbf{F} in jeder Iteration n an der bekannten Stelle \mathbf{x}_n durch ein sogenanntes *lokales lineares Modell* an, d.h. man betrachtet die Taylorentwicklung von \mathbf{F} am Punkt \mathbf{x}_n bis in die erste Ordnung. Das lokale lineare Modell hat also die Gestalt

$$\mathbf{M}_n(\mathbf{x}) = \mathbf{F}(\mathbf{x}_n) + \mathbf{F}'(\mathbf{x}_n)(\mathbf{x} - \mathbf{x}_n) \tag{A.3}$$

wobei $\mathbf{F}'(\mathbf{x})$ die Jakobi-Matrix am Punkt \mathbf{x} bezeichnet, deren Komponenten gegeben sind durch

$$F'_{ij}(\mathbf{x}) = \frac{\partial F_i}{\partial x_j}(\mathbf{x}) \tag{A.4}$$

Sofern sich die Stelle \mathbf{x}_n genügend nahe an der tatsächlichen Nullstelle \mathbf{x}^* befindet, liefert $\mathbf{M}_n(\mathbf{x})$ eine gute Näherung für das Verhalten der Funktion $\mathbf{F}(\mathbf{x})$ in der Umgebung von \mathbf{x}^* . Man nimmt daher die Nullstelle des lokalen linearen Modelles und verwendet diese als neue Näherung \mathbf{x}_{n+1} der Nullstelle \mathbf{x}^* von \mathbf{F} .

Man setzt dazu \mathbf{x}_{n+1} formal als Nullstelle in (A.3) ein, multipliziert beide Seiten von links mit dem Inversen der Jakobi-Matrix und erhält

$$\mathbf{x}_{n+1} = \mathbf{x}_n - \mathbf{F}'(\mathbf{x}_n)^{-1} \mathbf{F}(\mathbf{x}_n) \quad (\text{A.5})$$

\mathbf{x}_{n+1} dient nun als Startwert für den nächsten Iterationsschritt, der auf die gleiche Weise durchgeführt wird, usw.

Bei der praktischen Anwendung des Verfahrens ist es nicht immer günstig, wie in (A.5) stets einen kompletten sogenannten *Newton-Schritt*

$$\mathbf{s}_n = -\mathbf{F}'(\mathbf{x}_n)^{-1} \mathbf{F}(\mathbf{x}_n) \quad (\text{A.6})$$

zu gehen. Sinnvoller ist es, die Schrittweite um einen Faktor λ (wobei $0 < \lambda \leq 1$) zu verkürzen, um sicherzustellen, daß tatsächlich

$$|\mathbf{F}(\mathbf{x}_{n+1} = \mathbf{x}_n - \lambda \mathbf{s}_n)| < |\mathbf{F}(\mathbf{x}_n)| \quad (\text{A.7})$$

gilt. Ansonsten kann es nämlich im Falle einer an der Stelle \mathbf{x}_n nahezu singulären Jakobi-Matrix vorkommen, daß man sich tatsächlich wieder weit von der gesuchten Nullstelle entfernt.

Unter bestimmten, recht allgemeinen Annahmen (siehe [24]) konvergiert die Newton-Folge für $n \rightarrow \infty$ gegen die gesuchte Nullstelle \mathbf{x}^* von \mathbf{F} . Die Konvergenz des Verfahrens in der Nähe der Nullstelle ist quadratisch. Das bedeutet, daß \mathbf{x}_n in jedem Iterationsschritt ungefähr zwei signifikante Stellen der Lösung hinzugewinnt. In der Praxis bricht man das Verfahren ab, sobald die gesuchte Nullstelle mit einer festgelegten Genauigkeit bekannt ist.

Bei der Betrachtung der Einzelschritte des Newton-Verfahrens fällt auf, daß der größte numerische Rechenaufwand für die Durchführung eines Iterationsschrittes bei der Berechnung und Invertierung der Jakobi-Matrix entsteht. In praktischen Algorithmen wird an dieser Stelle häufig mit Näherungsverfahren gearbeitet, da sich die Jakobi-Matrix in der Nähe einer Nullstelle üblicherweise nur geringfügig ändert.

Eine für den praktischen Gebrauch geeignete, schnelle Implementation des Newton-Verfahrens findet sich zum Beispiel in der numerischen Programmbibliothek NAG [33].

Als letztes sei angemerkt, daß sich die Gleichung (A.5) speziell im eindimensionalen Fall auf die Form reduziert

$$x_{n+1} = x_n - \frac{F(x_n)}{F'(x_n)} \quad (\text{A.8})$$

wobei $F'(x_n)$ hier einfach die Ableitung von $F(x)$ am Punkt x_n ist.

Anwendung auf die Bethe-Ansatzgleichungen

Um das Newton-Verfahren für die Lösung der Bethe-Ansatzgleichungen (2.70) einsetzen zu können, bringt man diese zunächst äquivalent auf die Form

$$\begin{aligned} p_1(v_{k_1}^1) &= \phi_-(v_{k_1}^1 - i\epsilon_1)q_1(v_{k_1}^1 + i\epsilon_1)q_2(v_{k_1}^1)e^{\beta\mu_1} \\ &\quad + \phi_-(v_{k_1}^1)q_1(v_{k_1}^1 - i\epsilon_2)q_2(v_{k_1}^1 + i\epsilon_2)e^{\beta\mu_2} = 0 \end{aligned} \quad (\text{A.9a})$$

$$\begin{aligned}
p_j(v_{k_j}^j) &= q_{j-1}(v_{k_j}^j - i\epsilon_j)q_j(v_{k_j}^j + i\epsilon_j)q_{j+1}(v_{k_j}^j)e^{\beta\mu_j} \\
&\quad + q_{j-1}(v_{k_j}^j)q_j(v_{k_j}^j - i\epsilon_{j+1})q_{j+1}(v_{k_j}^j + i\epsilon_{j+1})e^{\beta\mu_{j+1}} = 0 \quad (\text{A.9b})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
p_{q-1}(v_{k_{q-1}}^{q-1}) &= q_{q-2}(v_{k_{q-1}}^{q-1} - i\epsilon_{q-1})q_{q-1}(v_{k_{q-1}}^{q-1} + i\epsilon_{q-1})\phi_+(v_{k_{q-1}}^{q-1})e^{\beta\mu_{q-1}} \\
&\quad + q_{q-2}(v_{k_{q-1}}^{q-1})q_{q-1}(v_{k_{q-1}}^{q-1} - i\epsilon_q)\phi_+(v_{k_{q-1}}^{q-1} + i\epsilon_q)e^{\beta\mu_q} = 0 \quad (\text{A.9c})
\end{aligned}$$

Die Gleichungen können in dieser Form bereits mit dem mehrdimensionalen Newton-Verfahren gelöst werden. Hierzu wurde für einige der numerischen Berechnungen dieser Arbeit die Routine `nag_zero_nonlin_eqns` aus der bereits erwähnten numerischen Programmbibliothek NAG [33] verwendet. Das Verfahren arbeitet mit einer numerischen Näherung der Jakobi-Matrix, so daß diese nicht explizit berechnet werden muß. Die Routine ist allerdings auf reelle Zahlen beschränkt, so daß sowohl die komplexen Bethe-Ansatzzahlen, als auch die Ansatzgleichungen (A.9) in Real- und Imaginärteil aufgetrennt werden müssen. Effektiv wird mit der Routine also ein reelles, nichtlineares Gleichungssystem mit insgesamt $2M_{\text{ges}}$ Gleichungen und Unbekannten gelöst.

Das mehrdimensionale Newton-Verfahren hat Konvergenzvorteile bei Berechnungen mit kleiner Trotterzahl $N \lesssim 200$. Lösungen zu nächstführenden Eigenwerten können praktisch nur mit dieser Methode bestimmt werden. Die angegebene Routine arbeitet bei Berechnungen mit großer Trotterzahl jedoch langsam. Zudem gibt es Probleme, da die Verteilung der Ansatzzahlen einen Häufungspunkt am Ursprung besitzt, der sich mit zunehmendem N stärker bemerkbar macht. Bei der Berechnung der Ansatzzahlen des größten Eigenwertes bei großen Trotterzahlen $N \gtrsim 200$, wie sie zur Berechnung der Thermodynamik bei kleinen Temperaturen nötig ist, wurde daher ein anderer Weg verfolgt.

Dazu wird jede der M_{ges} Bethe-Ansatzgleichungen jeweils nur in Abhängigkeit einer einzigen Ansatzzahl mit dem eindimensionalen Newton-Verfahren gelöst, wobei die übrigen Zahlen als konstant festgehalten werden. Das Verfahren wird der Reihe nach für jede Ansatzgleichung durchgeführt und solange wiederholt, bis die Zahlen mit einer vorher festgelegten Genauigkeit fixiert sind. Da stets mit der eindimensionalen Variante des Newton-Verfahrens gearbeitet wird, benötigt man für die iterative Lösung jeder Gleichung nur die normale Ableitung nach der jeweils variablen Ansatzzahl. Die verwendeten variablen Ansatzzahlen jeder Gleichung sind der linken Seite von (A.9) zu entnehmen.

Die Ableitung selbst folgt mit Hilfe der Produktregel, wobei die Ableitungen der auftretenden Einzelterme folgendermaßen berechnet werden:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial\phi_{\pm}(v)}{\partial v} &= \frac{N}{2}(v \pm iu)^{N/2-1} \\
&= \frac{N}{2}(v \pm iu)^{-1}(v \pm iu)^{N/2} \\
&= \tilde{\phi}_{\pm}(v)\phi_{\pm}(v)
\end{aligned} \tag{A.10a}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\partial q_j(v)}{\partial v} &= \sum_{k_j=1}^{M_j} \prod_{\substack{k_l=1 \\ k_l \neq k_j}}^{M_j} (v - v_{k_l}^j) \\
&= \sum_{k_j=1}^{M_j} (v - v_{k_j}^j)^{-1} \prod_{k_l=1}^{M_j} (v - v_{k_l}^j) \\
&= \tilde{q}_j(v) q_j(v)
\end{aligned} \tag{A.10b}$$

wobei $\tilde{\phi}_\pm(v) := N/2 \cdot (v \pm iu)^{-1}$ und $\tilde{q}_j(v) := \sum_{k_j=1}^{M_j} (v - v_{k_j}^j)^{-1}$ definiert wurden. Einen Sonderfall stellen die Terme $q_j(v_{k_j}^j \pm i\epsilon_p)$ (mit $p = j$ für „+“ und $p = j + 1$ für „-“) dar, da hier jeweils einer der Linearfaktoren verschwindet, der Term also in Abhängigkeit $v_{k_j}^j$ nur noch ein Polynom vom Grad $M_j - 1$ ist. Für diese Terme gilt

$$\begin{aligned}
\frac{\partial q_j(v_{k_j}^j \pm i\epsilon_p)}{\partial v_{k_j}^j} &= \sum_{\substack{k_n=1 \\ k_n \neq k_j}}^{M_j} \prod_{\substack{k_l=1 \\ k_l \neq k_n}}^{M_j} (v_{k_j}^j \pm i\epsilon_p - v_{k_l}^j) \\
&= \sum_{\substack{k_n=1 \\ k_n \neq k_j}}^{M_j} (v_{k_j}^j \pm i\epsilon_p - v_{k_n}^j)^{-1} \prod_{k_l=1}^{M_j} (v_{k_j}^j \pm i\epsilon_p - v_{k_l}^j) \\
&= \left(\sum_{k_n=1}^{M_j} (v_{k_j}^j \pm i\epsilon_p - v_{k_n}^j)^{-1} \pm i\epsilon_p \right) \prod_{k_l=1}^{M_j} (v_{k_j}^j \pm i\epsilon_p - v_{k_l}^j) \\
&= \left(\tilde{q}_j(v_{k_j}^j \pm i\epsilon_p) \pm i\epsilon_p \right) q_j(v_{k_j}^j \pm i\epsilon_p)
\end{aligned} \tag{A.10c}$$

Insgesamt nehmen die Ableitungen der Ansatzgleichungen (A.9) die folgende Gestalt an

$$\begin{aligned}
p'_1(v_{k_1}^1) &= \left[\tilde{\phi}_-(v_{k_1}^1 - i\epsilon_1) + \tilde{q}_1(v_{k_1}^1 + i\epsilon_1) + \tilde{q}_2(v_{k_1}^1) + i\epsilon_1 \right] \\
&\quad \times \phi_-(v_{k_1}^1 - i\epsilon_1) q_1(v_{k_1}^1 + i\epsilon_1) q_2(v_{k_1}^1) e^{\beta\mu_1} \\
&\quad + \left[\tilde{\phi}_-(v_{k_1}^1) + \tilde{q}_1(v_{k_1}^1 - i\epsilon_2) + \tilde{q}_2(v_{k_1}^1 + i\epsilon_2) - i\epsilon_2 \right] \\
&\quad \times \phi_-(v_{k_1}^1) q_1(v_{k_1}^1 - i\epsilon_2) q_2(v_{k_1}^1 + i\epsilon_2) e^{\beta\mu_2} \tag{A.11a}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
p'_j(v_{k_j}^j) &= \left[\tilde{q}_{j-1}(v_{k_j}^j - i\epsilon_j) + \tilde{q}_j(v_{k_j}^j + i\epsilon_j) + \tilde{q}_{j+1}(v_{k_j}^j) + i\epsilon_j \right] \\
&\quad \times q_{j-1}(v_{k_j}^j - i\epsilon_j) q_j(v_{k_j}^j + i\epsilon_j) q_{j+1}(v_{k_j}^j) e^{\beta\mu_j} \\
&\quad + \left[\tilde{q}_{j-1}(v_{k_j}^j) + \tilde{q}_j(v_{k_j}^j - i\epsilon_{j+1}) + \tilde{q}_{j+1}(v_{k_j}^j + i\epsilon_{j+1}) - i\epsilon_{j+1} \right] \\
&\quad \times q_{j-1}(v_{k_j}^j) q_j(v_{k_j}^j - i\epsilon_{j+1}) q_{j+1}(v_{k_j}^j + i\epsilon_{j+1}) e^{\beta\mu_{j+1}} \tag{A.11b}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
p'_{q-1}(v_{k_{q-1}}^{q-1}) &= \left[\tilde{q}_{q-2}(v_{k_{q-1}}^{q-1} - i\epsilon_{q-1}) + \tilde{q}_{q-1}(v_{k_{q-1}}^{q-1} + i\epsilon_{q-1}) + \tilde{\phi}_+(v_{k_{q-1}}^{q-1}) + i\epsilon_{q-1} \right] \\
&\quad \times q_{q-2}(v_{k_{q-1}}^{q-1} - i\epsilon_{q-1})q_{q-1}(v_{k_{q-1}}^{q-1} + i\epsilon_{q-1})\phi_+(v_{k_{q-1}}^{q-1})e^{\beta\mu_{q-1}} \\
&+ \left[\tilde{q}_{q-2}(v_{k_{q-1}}^{q-1}) + \tilde{q}_{q-1}(v_{k_{q-1}}^{q-1} - i\epsilon_q) + \tilde{\phi}_+(v_{k_{q-1}}^{q-1} + i\epsilon_q) - i\epsilon_q \right] \\
&\quad \times q_{q-2}(v_{k_{q-1}}^{q-1})q_{q-1}(v_{k_{q-1}}^{q-1} - i\epsilon_q)\phi_+(v_{k_{q-1}}^{q-1} + i\epsilon_q)e^{\beta\mu_q} \quad (\text{A.11c})
\end{aligned}$$

Mit diesen Gleichungen läßt sich nun (A.8) im Prinzip auf jede Ansatzgleichung anwenden. Man stellt jedoch fest, daß in der komplexen Ebene benachbarte Ansatzzahlen eines Satzes bei Anwendung des Newton-Verfahrens mit diesen Gleichungen das Bestreben zeigen, aufeinander zuzulaufen. Um diesen Effekt zu verhindern, teilt man die Ansatzgleichungen (A.9) jeweils durch einen Term der Form

$$\check{q}_j(v_{k_j}^j) := \prod_{\substack{k_l=1 \\ k_l \neq k_j}}^{M_j} (v_{k_j}^j - v_{k_l}^j) \quad (\text{A.12})$$

betrachtet also

$$\frac{p_j(v_{k_j}^j)}{\check{q}_j(v_{k_j}^j)} = 0 \quad \text{für } j = 1, \dots, q-1 \quad (\text{A.13})$$

Es handelt sich bei $\check{q}_j(v_{k_j}^j)$ um die in der Eigenwertgleichung (2.67) im Nenner der Terme $\lambda_j(v)$ und $\lambda_{j+1}(v)$ auftretende Funktion $q_j(v)$, bei der für $v = v_{k_j}^j$ der „kritische“ Linearfaktor $(v - v_{k_j}^j)$ entfernt wurde. Dieser Term kann in die Ansatzgleichungen (A.9) auf natürliche Weise übernommen werden, fällt in der speziellen Formulierung (2.69) jedoch heraus. Durch Berücksichtigung dieses Terms bleiben die Bethe-Ansatzzahlen stets voneinander getrennt.

Die Ableitung von $\check{q}_j(v_{k_j}^j)$ läßt sich analog zu (A.10b) angeben als

$$\frac{\partial \check{q}_j(v_{k_j}^j)}{\partial v_{k_j}^j} = \tilde{q}_j(v_{k_j}^j) \check{q}_j(v_{k_j}^j) \quad \text{mit } \tilde{q}_j(v_{k_j}^j) := \sum_{\substack{k_l=1 \\ k_l \neq k_j}}^{M_j} (v_{k_j}^j - v_{k_l}^j)^{-1} \quad (\text{A.14})$$

Leitet man die Ansatzgleichungen in der Form (A.13) nun nach den angegebenen Ansatzzahlen ab, erhält man

$$\frac{\partial (p_j(v_{k_j}^j)/\check{q}_j(v_{k_j}^j))}{\partial v_{k_j}^j} = \frac{p'_j(v_{k_j}^j) - \tilde{q}_j(v_{k_j}^j)p_j(v_{k_j}^j)}{\check{q}_j(v_{k_j}^j)} \quad (\text{A.15})$$

Betrachtet man die sich mit dieser Korrektur ergebenden Iterationsgleichungen bei Anwendung von (A.8), so erkennt man, daß sich der Term $\check{q}_j(v_{k_j}^j)$ wieder heraushebt und nur ein Korrekturterm $\tilde{q}_j(v_{k_j}^j)$ im Nenner, im Vergleich zu den mit den Ansatzgleichungen der Form (A.9) gebildeten Gleichungen, zusätzlich auftritt. Der Newton-Schritt (A.6) läßt sich für die drei Ansatzgleichungstypen mit dem Korrekturterm letztlich auf die Form

$$s_j = -\frac{1 + A_j}{A_j B_{1,j} - B_{2,j}} \quad \text{mit } j = 1, \dots, q-1 \quad (\text{A.16})$$

bringen, wobei definiert sind

$$A_j := \begin{cases} \frac{\phi_-(v_{k_1}^1 - i\epsilon_1)}{\phi_-(v_{k_1}^1)} \frac{q_1(v_{k_1}^1 + i\epsilon_1)}{q_1(v_{k_1}^1 - i\epsilon_2)} \frac{q_2(v_{k_1}^1)}{q_2(v_{k_1}^1 + i\epsilon_2)} e^{\beta(\mu_1 - \mu_2)} & \text{für } j = 1 \\ \frac{q_{j-1}(v_{k_j}^j - i\epsilon_j)}{q_{j-1}(v_{k_j}^j)} \frac{q_j(v_{k_j}^j + i\epsilon_j)}{q_j(v_{k_j}^j - i\epsilon_{j+1})} \frac{q_{j+1}(v_{k_j}^j)}{q_{j+1}(v_{k_j}^j + i\epsilon_{j+1})} e^{\beta(\mu_j - \mu_{j+1})} & \text{für } j = 2, \dots, q-2 \\ \frac{q_{q-2}(v_{k_{q-1}}^{q-1} - i\epsilon_{q-1})}{q_{q-2}(v_{k_{q-1}}^{q-1})} \frac{q_{q-1}(v_{k_{q-1}}^{q-1} + i\epsilon_{q-1})}{q_{q-1}(v_{k_{q-1}}^{q-1} - i\epsilon_q)} \frac{\phi_+(v_{k_{q-1}}^{q-1})}{\phi_+(v_{k_{q-1}}^{q-1} + i\epsilon_q)} e^{\beta(\mu_{q-1} - \mu_q)} & \text{für } j = q-1 \end{cases} \quad (\text{A.17a})$$

$$B_{1,j} := \begin{cases} \tilde{\phi}_-(v_{k_1}^1 - i\epsilon_1) + \tilde{q}_1(v_{k_1}^1 + i\epsilon_1) & \text{für } j = 1 \\ \tilde{q}_2(v_{k_1}^1) - \tilde{q}_1(v_{k_1}^1) + i\epsilon_1 & \\ \tilde{q}_{j-1}(v_{k_j}^j - i\epsilon_j) + \tilde{q}_j(v_{k_j}^j + i\epsilon_j) & \text{für } j = 2, \dots, q-2 \\ \tilde{q}_{j+1}(v_{k_j}^j) - \tilde{q}_j(v_{k_j}^j) + i\epsilon_j & \\ \tilde{q}_{q-2}(v_{k_{q-1}}^{q-1} - i\epsilon_{q-1}) + \tilde{q}_{q-1}(v_{k_{q-1}}^{q-1} + i\epsilon_{q-1}) & \text{für } j = q-1 \\ \tilde{\phi}_+(v_{k_{q-1}}^{q-1}) - \tilde{q}_{q-1}(v_{k_{q-1}}^{q-1}) + i\epsilon_{q-1} & \end{cases} \quad (\text{A.17b})$$

$$B_{2,j} := \begin{cases} \tilde{\phi}_-(v_{k_1}^1) + \tilde{q}_1(v_{k_1}^1 - i\epsilon_2) & \text{für } j = 1 \\ \tilde{q}_2(v_{k_1}^1 + i\epsilon_2) - \tilde{q}_1(v_{k_1}^1) - i\epsilon_2 & \\ \tilde{q}_{j-1}(v_{k_j}^j) + \tilde{q}_j(v_{k_j}^j - i\epsilon_{j+1}) & \text{für } j = 2, \dots, q-2 \\ \tilde{q}_{j+1}(v_{k_j}^j + i\epsilon_{j+1}) - \tilde{q}_j(v_{k_j}^j) - i\epsilon_{j+1} & \\ \tilde{q}_{q-2}(v_{k_{q-1}}^{q-1}) + \tilde{q}_{q-1}(v_{k_{q-1}}^{q-1} - i\epsilon_q) & \text{für } j = q-1 \\ \tilde{\phi}_+(v_{k_{q-1}}^{q-1} + i\epsilon_q) - \tilde{q}_{q-1}(v_{k_{q-1}}^{q-1}) - i\epsilon_q & \end{cases} \quad (\text{A.17c})$$

In dieser Form wird jede der Ansatzgleichungen ausgehend von der Startwertverteilung der Reihe nach jeweils in Abhängigkeit eines Parameters solange optimiert, bis sich keine wesentlichen Änderungen mehr ergeben, die Genauigkeit der berechneten Nullstelle also in der Größenordnung der Maschinengenauigkeit (ca. 10^{-19} bei Verwendung des Datentyps `long double` auf modernen PCs) liegt. Die Berechnung wird für den kompletten Block der Ansatzgleichungen solange wiederholt, bis sich der nach (2.67) berechnete Eigenwert nicht mehr wesentlich ändert. Als Fehlergrenze hat sich hier eine Genauigkeit auf 13 Nachkommastellen als sinnvoll herausgestellt. Das vorgestellte Verfahren ist in dieser Form im Schnitt nach ca. 50 Schritten „auskonvergiert“, wobei ein Schritt in der einmaligen Abarbeitung aller Ansatzgleichungen besteht.

Zudem wird bei einigen der Rechnungen für große Systeme ($N \gtrsim 4000$) ein erweiterter Datentyp eingesetzt, bei dem der Exponent in einer Integervariable getrennt verwaltet wird. Damit ergibt sich ein größerer zugänglicher Zahlenbereich, der sonst auftretenden internen Überläufen in den berechneten Größen A_j , $B_{1,j}$ oder $B_{2,j}$ aus (A.16) vorbeugt.

A.1.2 Wahl der Startwerte

Die Wahl der Startwerte im ersten Iterationsschritt ist entscheidend dafür, ob das Newton-Verfahren konvergiert, und wenn ja, zu welcher Lösung.

Zur Berechnung der zum größten Eigenwert der Quanten-Transfermatrix gehörenden Lösung der Bethe-Ansatzgleichungen hat es sich für kleine Trotterzahlen N als günstig herausgestellt, eine zu Abbildung A.1 analoge Startwertverteilung zu wählen, bei der die Ansatzzahlen

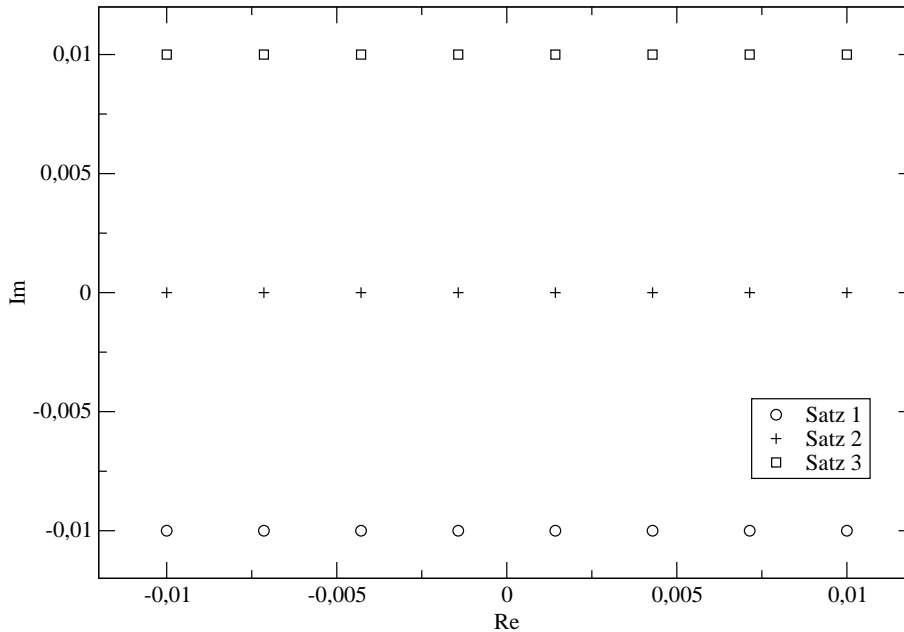


Abbildung A.1: Verteilung der Startwerte. Beispiel für $q = 4$, $N = 16$. Die Ansatzzahlen des ersten Satzes haben einen Imaginärteil $-0,01$, die des letzten Satzes $0,01$. Alle Ansatzzahlen der übrigen Sätze (hier nur der zweite) werden äquidistant dazwischen verteilt. Die Ansatzzahlen innerhalb jedes Satzes sind äquidistant mit Realteilen zwischen $-0,01$ und $0,01$ angeordnet.

in der komplexen Ebene in einem Rechteck oder Quadrat um den Ursprung angeordnet sind.

Zur Berechnung einer Lösung zu anderen Eigenwerten sind jedoch weitere Informationen nötig, da das Newton-Verfahren hier nur bei gut angepaßten Startwertverteilungen konvergiert. Anhaltspunkte hierzu liefert das in Abschnitt A.3 vorgestellte Verfahren, mit dem Lösungen der Bethe-Ansatzgleichungen für kleine Trotterzahlen alternativ aus einer numerischen Diagonalisierung der Quanten-Transfermatrix gewonnen werden können.

A.1.3 Anheben der Trotterzahl

Die Berechnung der Lösung zum größten Eigenwert mit Hilfe der im letzten Abschnitt angegebenen Startwertverteilung funktioniert der Erfahrung nach nur gut in bestimmten Parameterbereichen. Bei Trotterzahlen $N \gtrsim 100$ treten damit generell Probleme mit internen Überläufen auf. Um die Trotterzahl weiter anzuheben, müssen geeignete Startwerte aus bereits bekannten Lösungen extrapoliert werden.

Es fällt auf, daß die Ansatzzahlen einer Lösung stets auf hyperbelartigen Kurven angeordnet sind, wobei ein Häufungspunkt bei Null vorliegt. Vergrößert man die Trotterzahl, bleiben die betragsmäßig größten Ansatzzahlen nahezu an ihrer Position, während die Dichte der Verteilung in der Nähe des Ursprungs zunimmt (siehe Abbildung A.2). Die hyperbelartigen Kurven biegen sich dann stärker zum Ursprung.

Der Häufungspunkt beim Ursprung ist der Hauptgrund für die numerische Instabilität der Rechnungen bei großer Trotterzahl. Bei einer Trotterzahl von $N = 1024$ unterscheiden sich

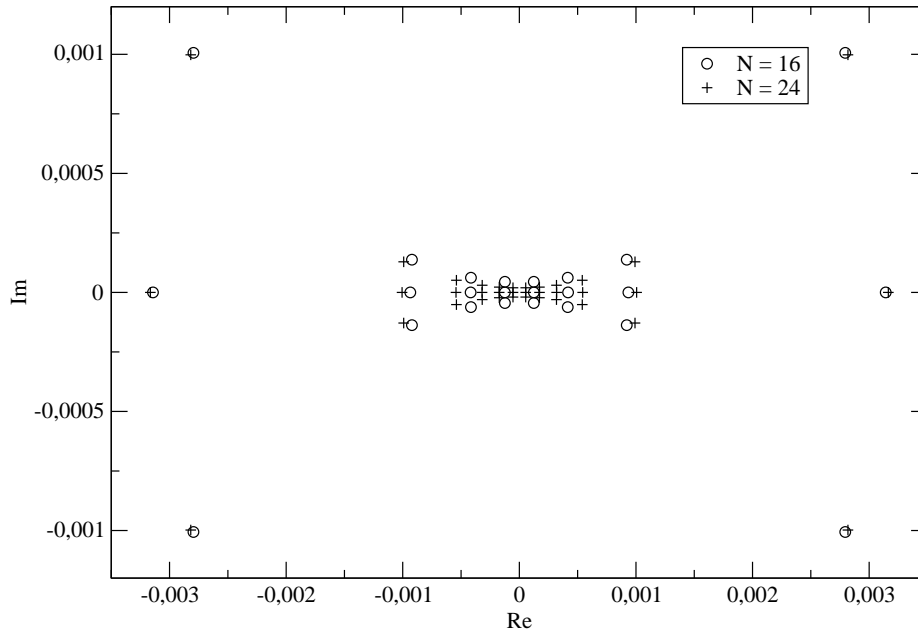


Abbildung A.2: Lösungen der Bethe-Ansatzgleichungen für den größten Eigenwert für $q = 4$, $\beta = 0.01$, alle $\epsilon_j = +1$, ohne äußeres Feld zu Trotterzahlen $N = 16$ und $N = 24$.

die Werte der betragsmäßig größten Ansatzzahlen von den betragsmäßig kleinsten bereits um fünf Größenordnungen.

Die Beobachtungen lassen sich wie folgt zur Berechnung einer geeigneten Startwertverteilung nutzen. Zunächst paßt man die Positionen der Ansatzzahlen der bekannten Lösung an die beim System mit angehobener Trotterzahl erwartete Verteilung an. Die Deformation der hyperbelartigen Kurven ahmt man dazu durch Anpassung der Koordinaten aller Punkte mit Hilfe einer empirisch ermittelten, beispielsweise quadratischen Funktion nach. Anschließend fügt man die neu hinzugekommenen Ansatzzahlen ausgehend vom Ursprung der komplexen Ebene jeweils zwischen zwei „alte“ Parameter ein, siehe dazu Abbildung A.3. Eine so entstandene Startkonfiguration liefert in den meisten Fällen gute Konvergenz gegen die gesuchte Lösung.

Die Trotterzahl kann dabei für Lösungen zum größten Eigenwert ohne Konvergenzeinbußen üblicherweise bis auf das ca. 1,5-fache in einem einzigen Schritt erhöht werden. Die Berechnung der Ansatzzahlen zu nächstführenden Eigenwerten verhält sich numerisch jedoch instabiler. Lediglich kleine Trotterzahlen $N \lesssim 100$ konnten für diese Eigenwerte tatsächlich behandelt werden.

A.1.4 Einfluß weiterer Parameter

Sollen basierend auf einer bekannten Lösung andere Parameter als die Trotterzahl geändert werden, beispielsweise die inverse Temperatur β , kann prinzipiell die bereits bekannte Lösung ohne weitere Anpassung als neue Startwertverteilung angesetzt werden, sofern die Änderungen geringfügig sind. Sonst müssen auch hier die Koordinaten der Ansatzzahlen der alten Lösung vor der Anwendung des Newton-Verfahrens empirisch an das erwartete Ergebnis angepaßt werden.

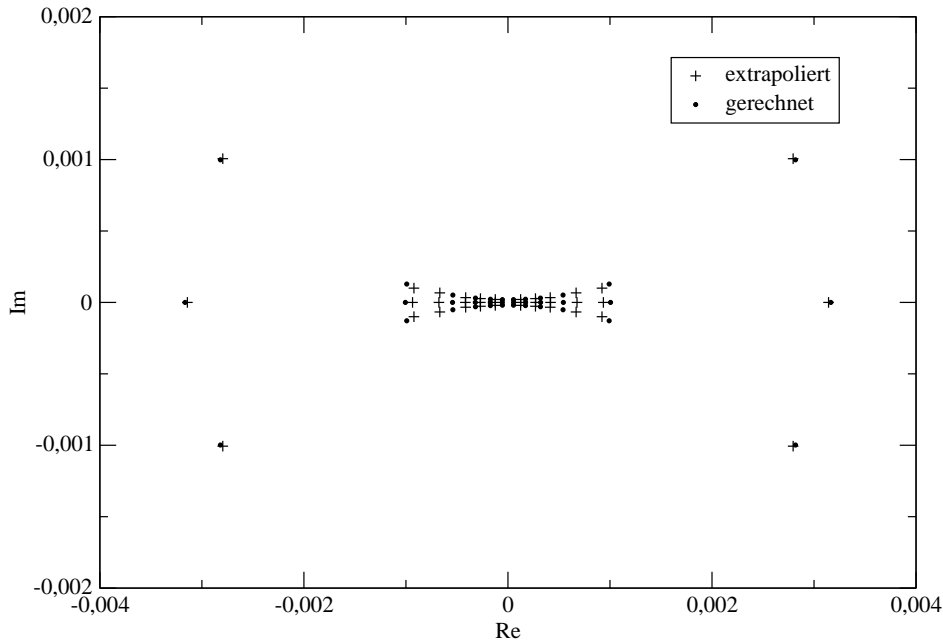


Abbildung A.3: Beispiel für extrapolierte Startwerte. Ausgehend von der Lösung für den größten Eigenwert bei $N = 16$ extrapoliert zu $N = 24$ (bei festen Parametern $q = 4$, $\beta = 0.01$, $\epsilon_j = +1$). Zum Vergleich ist zusätzlich die berechnete Lösung angegeben.

Besonders für die inverse Temperatur ist es wichtig, Anpassungen in größeren Schritten vornehmen zu können, da nur bei relativ klein gewähltem $\beta \approx 0.01$ mit dem Verfahren des vorigen Abschnittes die Trotterzahl schließlich auf sehr große $N \gtrsim 4000$ gebracht werden kann. Besonders interessant ist aber gerade das Tieftemperaturverhalten ($\beta \gtrsim 1$) der betrachteten Modelle. Eine möglichst große Schrittweite $\Delta\beta$ hilft daher enorm, die nötige Rechenzeit bis zum interessanten Bereich gering zu halten.

Auf diese Weise wurden die angegebenen thermodynamischen Größen in Kapitel 3 berechnet.

A.2 Diagonalisierung der Quanten-Transfermatrix

Alternativ zum Bethe-Ansatz ist – zumindest für kleine Trotterzahlen N – auch eine direkte numerische Diagonalisierung der Quanten-Transfermatrix (2.35) möglich. Gute und schnelle Routinen zur Berechnung ausgewählter Eigenwerte und Eigenzustände einer Matrix finden sich zum Beispiel in dem Paket ARPACK [31]. In den für diese Arbeit angestellten Berechnungen wurde zudem die Erweiterung ARPACK++ [20] eingesetzt, die ein bequemes Interface zur verwendeten Programmiersprache C++ bereitstellt und zudem effektive Methoden für dünnbesetzte Matrizen enthält. Letzteres ist von Vorteil, da nicht alle Symmetrien der Quanten-Transfermatrix bei der Berechnung berücksichtigt werden, weshalb viele der Matrixelemente Null sind. Nur von Null verschiedene Elemente werden bei der Berechnung tatsächlich im Speicher abgelegt.

Die Quanten-Transfermatrix hat insgesamt $q^N \times q^N$ Einträge, vgl. (2.35). Rechen- und Speicheraufwand bei der Aufstellung und Diagonalisierung der Matrix steigen daher expo-

nentiell mit der Trotterzahl N an. Der nötige Rechenaufwand läßt sich allerdings deutlich reduzieren, indem man Symmetrien der Matrix berücksichtigt, siehe hierzu den Abschnitt 2.1.8.

Bei den Berechnungen der vorliegenden Arbeit wurde ausgenutzt, daß die Quanten-Transfermatrix in Blöcke mit jeweils festem „erweiterten“ Gesamtspin im Sinne von (2.63) zerfällt. Es zeigte sich, daß die betragsmäßig größten Eigenwerte der betrachteten Modelle nahezu vollzählig im Block der Zustände mit verschwindendem Gesamtspin vorkommen.

Numerische Berechnungen der Eigenvektoren und Eigenwerte der Quanten-Transfermatrix waren so für $q = 3$ bis $N = 12$ und für $q = 4$ bis $N = 10$ in akzeptabler Zeit möglich. Begrenzt werden die Berechnungen hauptsächlich durch die Größe des verfügbaren Arbeitsspeichers. Durch Ausnutzung weiterer Symmetrien könnte die maximal berechenbare Systemgröße prinzipiell noch gesteigert werden.

A.3 Berechnung der Ansatzzahlen zu bekannten Eigenwerten

Zu Beginn dieses Kapitels wurde bereits erwähnt, daß die bloße Lösung der Bethe-Ansatzgleichungen nicht in jedem Fall auf einen Eigenzustand der Quanten-Transfermatrix schließen läßt. Zudem sagt eine gegebene Lösung ohne weitere Informationen nichts darüber aus, welcher Eigenwert mit diesen Ansatzzahlen beschrieben wird. Aus diesem Grund ist es wichtig, einen Überblick über die Eigenwerte und zugehörigen Verteilungsmuster der Bethe-Ansatzzahlen zu gewinnen.

A.3.1 Bestimmung des Eigenwertes bei beliebigem Spektralparameter

Im vorigen Abschnitt wurde besprochen, wie man für Systeme mit geringer Trotterzahl alle Eigenzustände und Eigenwerte der Quanten-Transfermatrix durch direkte Diagonalisierung berechnen kann. Hier soll dies zunächst ausgenutzt werden, um die Abhängigkeit eines bestimmten Eigenwertes $\Lambda(v)$ vom Spektralparameter v zu bestimmen.

Aus (2.67) folgt, daß jeder Eigenwert in Abhängigkeit von v ein Polynom vom Grad N sein muß. Schreibt man dieses Polynom als Potenzreihe

$$\Lambda(v) = \sum_{j=0}^N \Lambda_j v^j \quad (\text{A.18})$$

so sind insgesamt $N + 1$ unbekannte Koeffizienten Λ_j zu bestimmen, damit der Eigenwert für beliebige v angegeben werden kann. Physikalisch relevant ist der Eigenwert natürlich nur beim Spektralparameter $v = 0$, die letztendlich gesuchte Information steckt also allein im Koeffizienten Λ_0 . Zur Bestimmung der Bethe-Ansatzzahlen wird aber die Kenntnis der vollen Spektralparameterabhängigkeit benötigt.

Der Eigenwert $\Lambda(v)$ muß für mindestens $N + 1$ verschiedene Spektralparameter v bestimmt werden, um die Koeffizienten des Polynoms zu fixieren. Um die Genauigkeit der berechneten Koeffizienten Λ_j zu erhöhen, ist es allerdings besser, den betreffenden Eigenwert an einer größeren Zahl von Spektralparametern, zum Beispiel $2(N + 1)$, auszuwerten. Das Polynom wird anschließend an die bekannten Punkte optimal angepaßt.

Als Test für die numerische Genauigkeit der auf diese Weise berechneten Koeffizienten kann der Koeffizient zur höchsten Potenz Λ_N betrachtet werden, der auch direkt aus (2.67)

bestimmt werden kann zu

$$\Lambda_N = \sum_{j=1}^q e^{\beta\mu_j} \quad (\text{A.19})$$

Bei nichtvorhandenem äußeren Feld vereinfacht sich dies zu dem leicht zu überprüfenden Ausdruck $\Lambda_N = q$.

Da alle Quanten-Transfermatrizen mit beliebigen Spektralparametern untereinander vertauschen (2.55), hängen die Eigenzustände selbst nicht von v ab. Es reicht daher, die Diagonalisierung der Quanten-Transfermatrix nur an einem bestimmten Spektralparameter durchzuführen. Alle weiteren Eigenwerte erhält man, indem man den bereits bekannten Eigenvektor mit der jeweiligen Quanten-Transfermatrix multipliziert und den Eigenwert anschließend abliest.

Dabei reicht es, den Eigenvektor nur mit derjenigen Zeile der Quanten-Transfermatrix zu multiplizieren, deren Position gerade der betragsmäßig größten Komponente des Eigenvektors entspricht. Geteilt durch die besagte Komponente, erhält man daraus den gesuchten Eigenwert bereits mit geringem Rechenaufwand.

Im Ergebnis kennt man schließlich alle Koeffizienten des Polynoms $\Lambda(v)$ und kann den Eigenwert für beliebiges v berechnen. Zudem lassen sich bei Kenntnis der Koeffizienten Λ_j auch alle Ableitungen des Polynoms $\Lambda(v)$ leicht angeben. Diese werden im Folgenden ebenfalls benötigt.

A.3.2 Bethe-Ansatzzahlen für $q = 3$

Ist der Eigenwert $\Lambda(v)$ bekannt, können daraus die Funktionen $q_j(v)$ eindeutig bestimmt werden, deren Nullstellen nach Definition (2.68a) die gesuchten Bethe-Ansatzzahlen sind. Zunächst soll das Verfahren für den Fall $q = 3$ vorgestellt und anschließend auf $q > 3$ erweitert werden. Die Eigenwertgleichung (2.67) hat für $q = 3$ die Form

$$\begin{aligned} \Lambda(v) &= \frac{q_1(v + i\epsilon_1)}{q_1(v)} \phi_+(v) \phi_-(v - i\epsilon_1) e^{\beta\mu_1} \\ &+ \frac{q_1(v - i\epsilon_2)}{q_1(v)} \frac{q_2(v + i\epsilon_2)}{q_2(v)} \phi_+(v) \phi_-(v) e^{\beta\mu_2} \\ &+ \frac{q_2(v - i\epsilon_3)}{q_2(v)} \phi_+(v + i\epsilon_3) \phi_-(v) e^{\beta\mu_3} \end{aligned} \quad (\text{A.20})$$

Durch äquivalente Umformung erreicht man daraus

$$\begin{aligned} &q_1(v)\Lambda(v) - q_1(v + i\epsilon_1)\phi_+(v)\phi_-(v - i\epsilon_1)e^{\beta\mu_1} \\ &= \phi_-(v) \left\{ q_1(v - i\epsilon_2) \frac{q_2(v + i\epsilon_2)}{q_2(v)} \phi_+(v) e^{\beta\mu_2} + q_1(v) \frac{q_2(v - i\epsilon_3)}{q_2(v)} \phi_+(v + i\epsilon_3) e^{\beta\mu_3} \right\} \end{aligned} \quad (\text{A.21})$$

Beide Seiten dieser Gleichung sind Polynome vom Grad $N + M_1$ in v . Dabei tritt auf der linken Seite nur noch $q_1(v)$ als unbekannte Funktion auf. Auf der rechten Seite bedingt der Faktor $\phi_-(v)$ eine Nullstelle der Ordnung $N/2$ an der Stelle $v_0 = iu$. Diese Informationen reichen aus, um $q_1(v)$ zu bestimmen.

Führt man nämlich auf beiden Seiten der Gleichung eine Taylorentwicklung um die Stelle $v_0 = iu$ durch, so ist klar, daß dabei die ersten $N/2$ Entwicklungskoeffizienten wegen der $N/2$ -fachen Nullstelle der rechten Seite verschwinden müssen. Für die linke Seite

$$f_1(v) = q_1(v)\Lambda(v) - q_1(v + i\epsilon_1)\phi_+(v)\phi_-(v - i\epsilon_1)e^{\beta\mu_1} \quad (\text{A.22})$$

bedeutet dies, daß an der Stelle v_0 die folgenden Bedingungsgleichungen erfüllt sein müssen:

$$f_1(v_0) = 0 \quad (\text{A.23a})$$

$$\frac{\partial^k f_1}{\partial v^k}(v_0) = 0 \quad \text{für } k = 1, \dots, N/2 - 1 \quad (\text{A.23b})$$

Man setzt nun das unbekannte Polynom $q_1(v)$ als Potenzreihe an

$$q_1(v) = \sum_{j=0}^{M_1} a_j v^j \quad (\text{A.24})$$

wobei der höchste Koeffizient nach Definition der Funktionen $q_j(v)$ (2.68a) als $a_{M_1} = 1$ zu wählen ist. Die absolute Skalierung dieser Funktionen wäre in der Eigenwertgleichung (A.20) aber ohnehin irrelevant. Die restlichen M_1 unbekanntes Koeffizienten treten nur linear in $f_1(v)$ auf

$$f_1(v) = \sum_{j=0}^{M_1} a_j \left\{ v^j \Lambda(v) - (v + i\epsilon_1)^j \phi_+(v) \phi_-(v - i\epsilon_1) e^{\beta\mu_1} \right\} \quad (\text{A.25})$$

Die hier in den geschweiften Klammern noch auftretenden Funktionen sind bekannte Polynome in v . Dieser Term sei im folgenden mit $p_{a_j}(v)$ bezeichnet, wobei a_j der jeweils zugehörige Koeffizient sei. Die Bedingungsgleichungen (A.23) nehmen dann folgende Form an

$$\sum_{j=0}^{M_1} a_j g_{a_j}(v_0) = 0 \quad (\text{A.26a})$$

$$\sum_{j=0}^{M_1} a_j \frac{\partial^k g_{a_j}}{\partial v^k}(v_0) = 0 \quad \text{für } k = 1, \dots, N/2 - 1 \quad (\text{A.26b})$$

wiederum mit $v_0 = iu$. Man erhält also ein lineares Gleichungssystem mit $N/2$ Gleichungen für die M_1 vielen Koeffizienten a_j , wobei $j = 0, \dots, M_1 - 1$. Da $M_1 \leq N/2$ gilt, gibt es mindestens so viele Gleichungen wie unbekannte Koeffizienten. Auch im überbestimmten Fall, mit $M_1 < N/2$, ist sichergestellt, daß eine Lösung existiert, da die Eigenwertgleichung (A.20) für jeden Eigenwert der Quanten-Transfermatrix gültig ist. Die überzähligen Gleichungen können daher keine neue Information enthalten. Auf die beschriebene Weise lassen sich also die unbekanntes Koeffizienten und damit die Funktion $q_1(v)$ eindeutig bestimmen.

Die Funktion $q_2(v)$ kann analog berechnet werden. Dazu bringt man die Eigenwertgleichung (A.20) äquivalent auf die Form

$$\begin{aligned} & q_2(v) \Lambda(v) - q_2(v - i\epsilon_3) \phi_+(v + i\epsilon_3) \phi_-(v) e^{\beta\mu_3} \\ &= \phi_+(v) \left\{ \frac{q_1(v - i\epsilon_2)}{q_1(v)} q_2(v + i\epsilon_2) \phi_-(v) e^{\beta\mu_2} + q_2(v) \frac{q_1(v + i\epsilon_1)}{q_1(v)} \phi_-(v - i\epsilon_1) e^{\beta\mu_1} \right\} \end{aligned} \quad (\text{A.27})$$

Hier bezeichnet man die linke Seite der Gleichung mit $f_2(v)$. Der Faktor $\phi_+(v)$ auf der rechten Seite bedingt eine Nullstelle der Ordnung $N/2$ bei $v = -iu$. Damit müssen für $f_2(v)$ die ersten $N/2$ Terme der Taylorentwicklung um den Punkt $v_0 = -iu$ verschwinden. Drückt man nun auch $q_2(v)$ durch eine Potenzreihe mit Koeffizienten b_j aus, so erhält man schließlich

$$f_2(v) = \sum_{j=0}^{M_1} b_j \left\{ v^j \Lambda(v) - (v - i\epsilon_3)^j \phi_+(v + i\epsilon_3) \phi_-(v) e^{\beta\mu_3} \right\} \quad (\text{A.28})$$

wobei auch hier der höchste Koeffizient $b_{M_2} = 1$ gesetzt wird. Die bekannten Polynome in den geschweiften Klammern bezeichnet man als $p_{b_j}(v)$ und hat somit zur Bestimmung der Koeffizienten von $q_2(v)$ das lineare Gleichungssystem

$$\sum_{j=0}^{M_1} b_j g_{b_j}(v_0) = 0 \quad (\text{A.29a})$$

$$\sum_{j=0}^{M_1} b_j \frac{\partial^k g_{b_j}}{\partial v^k}(v_0) = 0 \quad \text{für } k = 1, \dots, N/2 - 1 \quad (\text{A.29b})$$

zu lösen. Auch hier ist die eindeutige Lösbarkeit wegen $M_2 \leq N/2$ gewährleistet. Die Lösung des linearen Gleichungssystems wurde bei den numerischen Rechnungen dieser Arbeit mit Hilfe der Routine **ZGESV** des Numerik-Paketes **LAPACK** [4], das eine Sammlung an Routinen für lineare Systeme beinhaltet, vorgenommen.

Nach Durchführung der angegebenen Rechnung sind die Funktionen $q_1(v)$ und $q_2(v)$ bekannt. In einem letzten Schritt müssen nun noch alle Nullstellen der beiden komplexen Polynome bestimmt werden, da die Nullstellen von $q_1(v)$ nach Definition die gesuchten Bethe-Ansatzzahlen des ersten Satzes, und die von $q_2(v)$ respektive die des zweiten Satzes sind.

Das Auffinden der Nullstellen eines komplexen Polynoms ist ein numerisches Standardproblem und kann mit Hilfe von iterativen Methoden in guter Genauigkeit durchgeführt werden. Geeignete Algorithmen finden sich zum Beispiel in [35]. In den vorliegenden Rechnungen wurden dafür die Routinen **zroots** und **laguer** eingesetzt.

A.3.3 Bethe-Ansatzzahlen für $q > 3$

Die Überlegung des letzten Abschnittes läßt sich auf $q > 3$ erweitern. Die Funktionen $q_1(v)$ und $q_{q-1}(v)$ des ersten bzw. letzten Satzes erhält man analog zu den Rechnungen des vorigen Abschnittes, in dem man die Eigenwertgleichung (2.67) passend umformt, so daß

$$q_1(v)\Lambda(v) - q_1(v + i\epsilon_1)\phi_+(v)\phi_-(v - i\epsilon_1)e^{\beta\mu_1} = \phi_+(v) \times \{\text{Polynom in } v\} \quad (\text{A.30a})$$

$$q_{q-1}(v)\Lambda(v) - q_{q-1}(v - i\epsilon_q)\phi_+(v + i\epsilon_q)\phi_-(v)e^{\beta\mu_q} = \phi_-(v) \times \{\text{Polynom in } v\} \quad (\text{A.30b})$$

Entwickelt man die linke Seite dieser Gleichungen um den Punkt $v_0 = iu$ bzw. $v_0 = -iu$ bis in die Ordnung $N/2$, so lassen sich mit den dadurch gewonnenen Gleichungen die Koeffizienten der Polynome $q_1(v)$ bzw. $q_{q-1}(v)$ in bekannter Weise berechnen.

Sind diese bekannt, geht man einen Schritt weiter und betrachtet die Funktionen $q_2(v)$ bzw. $q_{q-2}(v)$. Die Eigenwertgleichung (2.67) läßt sich für diese Funktionen in die folgende günstige Form bringen

$$\begin{aligned} q_2(v)q_1(v + i\epsilon_1)\phi_-(v - i\epsilon_1)e^{\beta\mu_1} + q_2(v + i\epsilon_2)q_1(v - i\epsilon_2)\phi_-(v)e^{\beta\mu_2} \\ = q_1(v) \times \{\text{Polynom in } v\} \end{aligned} \quad (\text{A.31a})$$

$$\begin{aligned} q_{q-2}(v)q_{q-1}(v - i\epsilon_q)\phi_+(v + i\epsilon_q)e^{\beta\mu_q} + q_{q-2}(v - i\epsilon_{q-1})q_{q-1}(v + i\epsilon_{q-1})\phi_+(v)e^{\beta\mu_{q-1}} \\ = q_{q-1}(v) \times \{\text{Polynom in } v\} \end{aligned} \quad (\text{A.31b})$$

Die linke Seite von (A.31a) hat also M_1 viele Nullstellen an den Bethe-Ansatzzahlen des ersten Satzes, während die linke Seite von (A.31b) M_{q-1} viele Nullstellen an den Parametern des

letzten Satzes besitzt. Setzt man die jeweils bekannten Nullstellen auf der linken Seite der Gleichungen ein, so erhält man M_1 bzw. M_{q-2} Bestimmungsgleichungen für die unbekannt Funktionen $q_2(v)$ und $q_{q-2}(v)$. Die Funktionen lassen sich dann unter der Voraussetzung $M_2 \leq M_1$ bzw. $M_{q-2} \leq M_{q-1}$ durch Zerlegung in eine Potenzreihe und das Auflösen der linearen Bedingungsgleichungen für die Koeffizienten bestimmen. Sind die Funktionen bekannt, werden die Bethe-Ansatzzahlen wiederum per Nullstellensuche bestimmt.

Mit den nun bekannten Funktionen kann das Verfahren wiederholt werden, wobei über die Gleichungen

$$\begin{aligned} q_3(v)q_2(v+i\epsilon_2)q_1(v-i\epsilon_2)e^{\beta\mu_2} + q_3(v+i\epsilon_3)q_2(v-i\epsilon_2)q_1(v)e^{\beta\mu_3} \\ = q_2(v) \times \{\text{Polynom in } v\} \end{aligned} \quad (\text{A.32a})$$

$$\begin{aligned} q_{q-3}(v)q_{q-2}(v-i\epsilon_{q-1})q_{q-1}(v+i\epsilon_{q-1})e^{\beta\mu_{q-1}} \\ + q_{q-3}(v-i\epsilon_{q-2})q_{q-2}(v+i\epsilon_{q-2})q_{q-1}(v)e^{\beta\mu_{q-2}} \\ = q_{q-2}(v) \times \{\text{Polynom in } v\} \end{aligned} \quad (\text{A.32b})$$

die Funktionen $q_3(v)$ und $q_{q-3}(v)$ berechnet werden können. Das Verfahren kann auf analoge Weise fortgeführt werden, bis letztlich alle Ansatzzahlen bekannt sind.

Zu bekannten Eigenwerten läßt sich also die zugehörige Verteilung der Bethe-Ansatzzahlen eindeutig berechnen. Anhand dieser Verteilungen kann dann auf geeignete Startwerte zum Auffinden des entsprechenden Eigenwertes bei größeren Trotterzahlen, die der direkten Diagonalisierung aufgrund des Rechenaufwandes nicht mehr zugänglich sind, schließen. Entsprechende Lösungen findet man wiederum über die bereits beschriebene iterative Lösung der Bethe-Ansatzgleichungen.

Zuletzt sei angemerkt, daß bei dem in diesem Abschnitt besprochenen Verfahren bereits die Kenntnis eines der Sätze 1 oder $q-1$, bzw. zweier Sätze i und $i+1$, von Bethe-Ansatzzahlen einer Lösung der Ansatzgleichungen ausreicht, um alle anderen Sätze dieser Lösung eindeutig bestimmen zu können, sofern $M_{i+1} \geq M_{i+2} \geq \dots \geq M_{q-1}$ und $M_i \geq M_{i-1} \geq \dots \geq M_1$ ist. Sind diese Bedingungen dagegen nicht erfüllt, so ist mindestens eines der bei der Berechnung der restlichen Ansatzzahlen auftretenden Gleichungssysteme unterbestimmt.

Anhang B

Äquivalenz verschiedener Graduierungen

B.1 Äquivalenzrelationen bei einer negativen Graduierung

In diesem Anhang wird betrachtet, wie die Bethe-Ansätze von zwei Systemen mit bestimmter Anzahl von positiv und negativ graduierten Spinkomponenten zusammenhängen, wenn sich untereinander lediglich die Position der Graduierungen unterscheidet. Es wird gezeigt, daß eine unterschiedliche Positionierung der Graduierungen generell keinen Einfluß auf den Eigenwert hat und die Zugänge somit stets äquivalent zueinander sind. Die jeweils unterschiedlichen Bethe-Ansatzzahlen zu einer bestimmten Lösung lassen sich stets ineinander umrechnen, d.h. die Bethe-Ansatzgleichungen sind zueinander äquivalent.

Die hier verwendete Methode, dies direkt anhand der Bethe-Ansatzgleichungen zu zeigen geht auf [19] zurück. Im Gegensatz zur Methode von [49], welche mit Hilfe des Residuensatzes ausgeführt wird, kann dabei der Eigenwert mitberücksichtigt werden.

Zunächst sei nur ein negativ graduiertes Spinzustand angenommen, während die übrigen Graduierungen positiv gewählt sind. Das heißt in (2.67) sei ein $\epsilon_l = -1$, während $\epsilon_j = +1$ für alle übrigen $j \neq l$ gelte.

B.1.1 Äquivalenz der Bethe-Ansatzgleichungen

Als ersten Schritt betrachtet man den Einfluß der negativen Graduierung des l -ten Spinzustandes auf die Bethe-Ansatzgleichungen des Uimin-Sutherland-Modells (2.70). Man sieht leicht, daß dort in den Ansatzgleichungen für die Bethe-Ansatzzahlen $v_{k_l}^l$ bzw. $v_{k_{l-1}}^{l-1}$ auf der linken Seite jeweils der mittlere Bruch herausfällt, da $\epsilon_l = -\epsilon_{l+1}$ und $\epsilon_{l-1} = -\epsilon_l$. Im Falle $l = 1$ bzw. $l = q$ hat die Graduierung dagegen nur Auswirkung auf die Ansatzgleichungen für $v_{k_1}^1$ bzw. $v_{k_{q-1}}^{q-1}$. Die von der negativen Graduierung beeinflussten Ansatzgleichungen sind von der Form

$$\frac{g_{l-1}(v_{k_l}^l + i)}{g_{l-1}(v_{k_l}^l)} \frac{g_{l+1}(v_{k_l}^l)}{g_{l+1}(v_{k_l}^l + i)} = -e^{\beta(\mu_{l+1} - \mu_l)} \quad (\text{B.1a})$$

$$\frac{g_{l-2}(v_{k_{l-1}}^{l-1} - i)}{g_{l-2}(v_{k_{l-1}}^{l-1})} \frac{g_l(v_{k_{l-1}}^{l-1})}{g_l(v_{k_{l-1}}^{l-1} - i)} = -e^{\beta(\mu_l - \mu_{l-1})} \quad (\text{B.1b})$$

Dabei ist

$$g_j(v) := \begin{cases} \phi_-(v) & \text{für } j = 0 \\ q_j(v) & \text{für } j = 1, \dots, q-1 \\ \phi_+(v) & \text{für } j = q \end{cases} \quad (\text{B.2})$$

damit die verschiedenen Ansatzgleichungstypen aus (2.70) in einheitlicher Darstellung behandelt werden können.

Man beachte, daß sich für $l = 1$ bzw. $l = q$ nur die Gleichungstypen (B.1a) bzw. (B.1b) für die durch Graduierungen beeinflussten Bethe-Ansatzgleichungen ergeben.

Man definiert nun zu (B.1a) ein Polynom

$$p_l(v) = g_{l-1}(v+i)g_{l+1}(v)e^{\beta\mu_l} + g_{l-1}(v)g_{l+1}(v+i)e^{\beta\mu_{l+1}} \quad (\text{B.3})$$

Gleichung (B.1) sagt dann aus, daß dieses Polynom Nullstellen an jeder der M_l vielen Ansatzzahlen $v_{k_l}^l$ aufweist, wenn man eine feste Lösung der Bethe-Ansatzgleichungen zugrunde legt. Das Polynom ist aber offensichtlich vom Grad $N_{l-1} + N_{l+1} > M_l$ mit

$$N_j = \begin{cases} N/2 & \text{für } j = 0 \text{ oder } j = q \\ M_j & \text{sonst} \end{cases} \quad (\text{B.4})$$

Daher besitzt $p_l(v)$ noch $M'_l = N_{l-1} + N_{l+1} - M_l$ weitere Nullstellen, sogenannte *Lochlösungen*. (Lochlösungen werden im weiteren Verlauf mit einem Strich, also z.B. $v_{k_j}^j$ für die zusätzlichen Lösungen der Ansatzgleichung j , bezeichnet.) (B.3) läßt sich daher auch faktorisiert schreiben als

$$p_l(v) = (e^{\beta\mu_l} + e^{\beta\mu_{l+1}})q_l(v)q'_l(v) \quad (\text{B.5})$$

wobei

$$q'_l(v) := \prod_{k_l=1}^{M'_l} (v - v_{k_l}^l) \quad (\text{B.6})$$

als „Polynom der Lochlösungen“ definiert wird.

Im Folgenden soll zunächst davon ausgegangen werden, daß $l < q - 1$ ist. In diesem Fall ergibt die Auswertung des Polynoms $p_l(v)$ an den Stellen $v_{k_{l+1}}^{l+1}$ und $v_{k_{l+1}}^{l+1} - i$ die folgenden Gleichungen

$$p_l(v_{k_{l+1}}^{l+1}) = g_{l-1}(v_{k_{l+1}}^{l+1})q_{l+1}(v_{k_{l+1}}^{l+1} + i)e^{\beta\mu_{l+1}} = (e^{\beta\mu_l} + e^{\beta\mu_{l+1}})q_l(v_{k_{l+1}}^{l+1})q'_l(v_{k_{l+1}}^{l+1}) \quad (\text{B.7a})$$

$$p_l(v_{k_{l+1}}^{l+1} - i) = g_{l-1}(v_{k_{l+1}}^{l+1})q_{l+1}(v_{k_{l+1}}^{l+1} - i)e^{\beta\mu_l} = (e^{\beta\mu_l} + e^{\beta\mu_{l+1}})q_l(v_{k_{l+1}}^{l+1} - i)q'_l(v_{k_{l+1}}^{l+1} - i) \quad (\text{B.7b})$$

Dividiert man (B.7a) durch (B.7b), erhält man die Identität

$$\frac{q_{l+1}(v_{k_{l+1}}^{l+1} + i)}{q_{l+1}(v_{k_{l+1}}^{l+1} - i)} e^{\beta(\mu_{l+1} - \mu_l)} = \frac{q_l(v_{k_{l+1}}^{l+1})}{q_l(v_{k_{l+1}}^{l+1} - i)} \frac{q'_l(v_{k_{l+1}}^{l+1})}{q'_l(v_{k_{l+1}}^{l+1} - i)} \quad (\text{B.8})$$

die sich umformen läßt zu

$$\frac{q_l(v_{k_{l+1}}^{l+1} - i)}{q_l(v_{k_{l+1}}^{l+1})} \frac{q_{l+1}(v_{k_{l+1}}^{l+1} + i)}{q_{l+1}(v_{k_{l+1}}^{l+1} - i)} = \frac{q'_l(v_{k_{l+1}}^{l+1})}{q'_l(v_{k_{l+1}}^{l+1} - i)} e^{\beta(\mu_l - \mu_{l+1})} \quad (\text{B.9})$$

Diese Identität kann nun in die Ansatzgleichung für die Bethe-Ansatzzahlen des Satzes $l + 1$ eingesetzt werden, welche lautet

$$\frac{q_l(v_{k_{l+1}}^{l+1} - i)}{q_l(v_{k_{l+1}}^{l+1})} \frac{q_{l+1}(v_{k_{l+1}}^{l+1} + i)}{q_{l+1}(v_{k_{l+1}}^{l+1} - i)} \frac{g_{l+2}(v_{k_{l+1}}^{l+1})}{g_{l+2}(v_{k_{l+1}}^{l+1} + i)} = -e^{\beta(\mu_{l+2} - \mu_{l+1})} \quad (\text{B.10})$$

Daraus ergibt sich

$$\frac{q'_l(v_{k_{l+1}}^{l+1})}{q'_l(v_{k_{l+1}}^{l+1} - i)} \frac{g_{l+2}(v_{k_{l+1}}^{l+1})}{g_{l+2}(v_{k_{l+1}}^{l+1} + i)} = -e^{\beta(\mu_{l+2} - \mu_l)} \quad (\text{B.11})$$

Mit den Definitionen

$$\tilde{v}_{k_l}^l := v_{k_l}^l + i \quad \tilde{M}_l := M'_l \quad \tilde{\mu}_{l+1} := \mu_l \quad (\text{B.12a})$$

$$\tilde{v}_{k_{l+1}}^{l+1} := v_{k_{l+1}}^{l+1} \quad \tilde{M}_{l+1} := M_{l+1} \quad \tilde{\mu}_{l+2} := \mu_{l+2} \quad (\text{B.12b})$$

$$\tilde{v}_{k_{l+2}}^{l+2} := v_{k_{l+2}}^{l+2} \quad \tilde{M}_{l+2} := M_{l+2} \quad \tilde{\mu}_{l+3} := \mu_{l+3} \quad (\text{B.12c})$$

erhält man die Gleichung

$$\frac{\tilde{q}_l(\tilde{v}_{k_{l+1}}^{l+1} + i)}{\tilde{q}_l(\tilde{v}_{k_{l+1}}^{l+1})} \frac{\tilde{g}_{l+2}(\tilde{v}_{k_{l+1}}^{l+1})}{\tilde{g}_{l+2}(\tilde{v}_{k_{l+1}}^{l+1} + i)} = -e^{\beta(\tilde{\mu}_{l+2} - \tilde{\mu}_{l+1})} \quad (\text{B.13})$$

wobei

$$\tilde{g}_j(v) := \begin{cases} \phi_-(v) & \text{für } j = 0 \\ \tilde{q}_j(v) & \text{für } j = 1, \dots, q-1 \\ \phi_+(v) & \text{für } j = q \end{cases} \quad (\text{B.14})$$

und

$$\tilde{q}_j(v) := \prod_{k_j=1}^{\tilde{M}_j} (v - \tilde{v}_{k_j}^j) \quad \text{für } j = 1, \dots, q-1 \quad (\text{B.15})$$

Streng genommen ist $\tilde{q}_j(v)$ zunächst nur für $j = l, l+1, l+2$ definiert, da $\tilde{v}_{k_j}^j$ an dieser Stelle noch nicht für alle j definiert wurde. Die Definition der übrigen $\tilde{v}_{k_j}^j$ wird jedoch später in (B.20) und (B.24) nachgeholt.

Gleichung (B.13) entspricht genau der Bethe-Ansatzgleichung für die Ansatzzahlen $\tilde{v}_{k_{l+1}}^{l+1}$ eines Modelles, bei der die $(l+1)$ -te Spinkomponente negativ graduiert ist, während alle anderen Graduierungen positiv gewählt sind.

Zu prüfen bleibt noch, ob auch die anderen Ansatzgleichungen des Modells mit negativ graduiertem Spinkomponente l in ähnlicher Weise in Ansatzgleichungen des zweiten Modells umgerechnet werden können, bei dem die negative Graduierung zur $(l+1)$ -ten Spinkomponente verschoben ist.

Dazu wertet man im Falle $l > 1$ das Polynom $p_l(v)$ nach (B.3) zusätzlich an den Stellen $v_{k_{l-1}}^{l-1}$ und $v_{k_{l-1}}^{l-1} - i$ aus. Man erhält die Gleichungen

$$p_l(v_{k_{l-1}}^{l-1}) = q_{l-1}(v_{k_{l-1}}^{l-1} + i) g_{l+1}(v_{k_{l-1}}^{l-1}) e^{\beta\mu_l} = (e^{\beta\mu_l} + e^{\beta\mu_{l+1}}) q_l(v_{k_{l-1}}^{l-1}) q'_l(v_{k_{l-1}}^{l-1}) \quad (\text{B.16a})$$

$$p_l(v_{k_{l-1}}^{l-1} - i) = q_{l-1}(v_{k_{l-1}}^{l-1} - i) g_{l+1}(v_{k_{l-1}}^{l-1}) e^{\beta\mu_{l+1}} = (e^{\beta\mu_l} + e^{\beta\mu_{l+1}}) q_l(v_{k_{l-1}}^{l-1} - i) q'_l(v_{k_{l-1}}^{l-1} - i) \quad (\text{B.16b})$$

Teilt man die letzten beiden Gleichungen durcheinander, erhält man

$$\frac{q_{l-1}(v_{k_{l-1}}^{l-1} + i)}{q_{l-1}(v_{k_{l-1}}^{l-1} - i)} e^{\beta(\mu_l - \mu_{l+1})} = \frac{q_l(v_{k_{l-1}}^{l-1})}{q_l(v_{k_{l-1}}^{l-1} - i)} \frac{q'_l(v_{k_{l-1}}^{l-1})}{q'_l(v_{k_{l-1}}^{l-1} - i)} \quad (\text{B.17})$$

was sich umformen läßt zu

$$\frac{q_l(v_{k_{l-1}}^{l-1})}{q_l(v_{k_{l-1}}^{l-1} - i)} = \frac{q_{l-1}(v_{k_{l-1}}^{l-1} + i)}{q_{l-1}(v_{k_{l-1}}^{l-1} - i)} \frac{q'_l(v_{k_{l-1}}^{l-1} - i)}{q'_l(v_{k_{l-1}}^{l-1})} e^{\beta(\mu_l - \mu_{l+1})} \quad (\text{B.18})$$

Dies eingesetzt in Gleichung (B.1b) ergibt mit $g_l(v) = q_l(v)$

$$\frac{g_{l-2}(v_{k_{l-1}}^{l-1} - i)}{g_{l-2}(v_{k_{l-1}}^{l-1})} \frac{q_{l-1}(v_{k_{l-1}}^{l-1} + i)}{q_{l-1}(v_{k_{l-1}}^{l-1} - i)} \frac{q'_l(v_{k_{l-1}}^{l-1} - i)}{q'_l(v_{k_{l-1}}^{l-1})} = -e^{\beta(\mu_{l+1} - \mu_{l-1})} \quad (\text{B.19})$$

Die Umparametrisierung (B.12a) liefert zusammen mit

$$\tilde{v}_{k_{l-1}}^{l-1} := v_{k_{l-1}}^{l-1} \quad \tilde{M}_{l-1} := M_{l-1} \quad \tilde{\mu}_l := \mu_{l+1} \quad (\text{B.20a})$$

$$\tilde{v}_{k_{l-2}}^{l-2} := v_{k_{l-2}}^{l-2} \quad \tilde{M}_{l-2} := M_{l-2} \quad \tilde{\mu}_{l-1} := \mu_{l-1} \quad (\text{B.20b})$$

die Gleichung

$$\frac{\tilde{g}_{l-2}(\tilde{v}_{k_{l-1}}^{l-1} - i)}{\tilde{g}_{l-2}(\tilde{v}_{k_{l-1}}^{l-1})} \frac{\tilde{q}_{l-1}(\tilde{v}_{k_{l-1}}^{l-1} + i)}{\tilde{q}_{l-1}(\tilde{v}_{k_{l-1}}^{l-1} - i)} \frac{\tilde{q}_l(v_{k_{l-1}}^{l-1})}{\tilde{q}_l(v_{k_{l-1}}^{l-1} + i)} = -e^{\beta(\tilde{\mu}_l - \tilde{\mu}_{l-1})} \quad (\text{B.21})$$

Dies ist die entsprechende Gleichung für die Ansatzzahlen $\tilde{v}_{k_{l-1}}^{l-1}$ bei negativer Graduierung des Spinzustandes $l + 1$.

Wertet man noch das Polynom $p_l(v)$ an den Lochlösungen $v_{k_l}^l$ aus, erhält man direkt die Identität

$$\frac{g_{l-1}(v_{k_l}^l)}{g_{l-1}(v_{k_l}^l + i)} \frac{g_{l+1}(v_{k_l}^l + i)}{g_{l+1}(v_{k_l}^l)} = -e^{\beta(\mu_l - \mu_{l+1})} \quad (\text{B.22})$$

und daraus durch die Umparametrisierungen (B.12) und (B.20a)

$$\frac{\tilde{g}_{l-1}(\tilde{v}_{k_l}^l - i)}{\tilde{g}_{l-1}(\tilde{v}_{k_l}^l)} \frac{\tilde{g}_{l+1}(\tilde{v}_{k_l}^l)}{\tilde{g}_{l+1}(\tilde{v}_{k_l}^l - i)} = -e^{\beta(\tilde{\mu}_{l+1} - \tilde{\mu}_l)} \quad (\text{B.23})$$

Das ist die Ansatzgleichung für die Ansatzzahlen $\tilde{v}_{k_l}^l$ bei negativer Graduierung des Spinzustandes $l + 1$. Alle übrigen Ansatzgleichungen gehen unverändert in die neue Form über, d.h. alle übrigen geschlängelten Größen definiert man

$$\tilde{v}_{k_j}^j := v_{k_j}^j \quad \tilde{M}_j := M_j \quad \tilde{\mu}_{j+1} := \mu_{j+1} \quad (\text{B.24})$$

und letztlich $\tilde{\mu}_1 := \mu_1$ für $l > 2$.

Für $l = q - 1$ verläuft die Rechnung analog. Weil es jedoch keine Ansatzzahlen $v_{k_{l+1}}^{l+1}$ gibt, fällt der erste Teil der Rechnung hier weg. Wird $l = 1$ gewählt, gibt es dagegen keine Zahlen $v_{k_{l-1}}^{l-1}$, weshalb hier der zweite Teil der Rechnung ausgelassen wird.

Damit ist gezeigt, daß aus den Bethe-Ansatzgleichungen mit einer negativen Graduierung der Spinkomponente l die Bethe-Ansatzgleichungen mit negativer Graduierung bei Spinkomponente $l + 1$ direkt folgen. Die Bethe-Ansatzzahlen können über

$$\tilde{v}_{k_j}^j = \begin{cases} v_{k_l}^l + i & \text{für } j = l \\ v_{k_j}^j & \text{sonst} \end{cases} \quad (\text{B.25})$$

ineinander umgerechnet werden. Die Anteile des externen Feldes ergeben sich zudem aus

$$\tilde{\mu}_j = \begin{cases} \mu_{l+1} & \text{für } j = l \\ \mu_l & \text{für } j = l + 1 \\ \mu_j & \text{sonst} \end{cases} \quad (\text{B.26})$$

Führt man das oben angegebene Verfahren mit Gleichung (B.1b) statt mit (B.1a) aus, d.h. definiert man das Polynom

$$p_{l-1}(v) = g_{l-2}(v-i)g_l(v)e^{\beta\mu_{l-1}} + g_{l-2}(v)g_l(v-i)e^{\beta\mu_l} \quad (\text{B.27})$$

so erhält man durch Auswertung an den entsprechenden Stellen, Einsetzen der sich ergebenden Identitäten in die Ansatzgleichungen und anschließende Umparametrisierung in analoger Weise die Ansatzgleichungen für eine negative Graduierung bei Spinkomponente $l - 1$. Die neuen Bethe-Ansatzzahlen ergeben sich dann aus

$$\bar{v}_{k_j}^j = \begin{cases} v_{k_{l-1}}^{l-1} - i & \text{für } j = l - 1 \\ v_{k_j}^j & \text{sonst} \end{cases} \quad (\text{B.28})$$

und die Anteile des externen Feldes aus

$$\bar{\mu}_j = \begin{cases} \mu_{l-1} & \text{für } j = l \\ \mu_l & \text{für } j = l - 1 \\ \mu_j & \text{sonst} \end{cases} \quad (\text{B.29})$$

Man kann also jeweils über die Bestimmung der Lochlösungen die negative Graduierung einer bestimmten Spinkomponente zu jeder anderen Spinkomponente hin verschieben. Insbesondere sind alle Möglichkeiten, die negative Graduierung an an einer bestimmten Komponente anzubringen, äquivalent.

B.1.2 Äquivalenz der Eigenwerte

Weiterhin soll gezeigt werden, daß alle diese Modelle, bei denen sich lediglich die Position der negativ graduierten Spinkomponente unterscheidet, dieselben Eigenwerte besitzen. Dazu betrachtet man die Eigenwerte des Uimin-Sutherland-Modelles nach Gleichung (2.67) zunächst für eine negative Graduierung bei der Spinkomponente l . Die Gleichung lautet dann

$$\Lambda(v) = \sum_{j=1}^q \lambda_j(v) \quad (\text{B.30a})$$

mit

$$\lambda_j = \frac{g_{j-1}(v-i)}{g_{j-1}(v)} \frac{g_j(v+i)}{g_j(v)} \phi_+(v) \phi_-(v) e^{\beta\mu_j} \quad \text{für } j \neq l \quad (\text{B.30b})$$

$$\lambda_l = \frac{g_{l-1}(v+i)}{g_{l-1}(v)} \frac{g_l(v-i)}{g_l(v)} \phi_+(v) \phi_-(v) e^{\beta\mu_l} \quad (\text{B.30c})$$

Man wertet das Polynom $p_l(v)$ von (B.3) an den Stellen v und $v-i$ aus und dividiert die Ergebnisse. Man erhält somit

$$\frac{p_l(v-i)}{p_l(v)} = \frac{q_l(v-i)}{q_l(v)} \frac{q'_l(v-i)}{q'_l(v)} = \frac{e^{\beta\mu_l} g_{l-1}(v) g_{l+1}(v-i) + e^{\beta\mu_{l+1}} g_{l-1}(v-i) g_{l+1}(v)}{e^{\beta\mu_l} g_{l-1}(v+i) g_{l+1}(v) + e^{\beta\mu_{l+1}} g_{l-1}(v) g_{l+1}(v+i)} \quad (\text{B.31})$$

was sich äquivalent umformen läßt zu

$$\frac{q_l(v-i)}{q_l(v)} \frac{q'_l(v-i)}{q'_l(v)} = \frac{e^{\beta\mu_l} \frac{g_{l+1}(v-i)}{g_{l+1}(v)} + e^{\beta\mu_{l+1}} \frac{g_{l-1}(v-i)}{g_{l-1}(v)}}{e^{\beta\mu_l} \frac{g_{l-1}(v+i)}{g_{l-1}(v)} + e^{\beta\mu_{l+1}} \frac{g_{l+1}(v+i)}{g_{l+1}(v)}}} \quad (\text{B.32})$$

Daraus folgt schließlich die Relation

$$\begin{aligned} & \frac{g_{l-1}(v+i)}{g_{l-1}(v)} \frac{q_l(v-i)}{q_l(v)} e^{\beta\mu_l} + \frac{q_l(v-i)}{q_l(v)} \frac{g_{l+1}(v+i)}{g_{l+1}(v)} e^{\beta\mu_{l+1}} \\ &= \frac{g_{l-1}(v-i)}{g_{l-1}(v)} \frac{q'_l(v)}{q'_l(v-i)} e^{\beta\mu_{l+1}} + \frac{q'_l(v)}{q'_l(v-i)} \frac{g_{l+1}(v-i)}{g_{l+1}(v)} e^{\beta\mu_l} \end{aligned} \quad (\text{B.33})$$

Multipliziert man dies auf beiden Seiten mit $\phi_+(v) \phi_-(v)$, so steht auf der linken Seite genau der Term $\lambda_l(v) + \lambda_{l+1}(v)$ aus Gleichung (B.30), während sich die rechte Seite mit Hilfe von (B.25) und (B.26) umformen läßt. Man erhält

$$\begin{aligned} \lambda_l(v) + \lambda_{l+1}(v) &= \frac{g_{l-1}(v-i)}{g_{l-1}(v)} \frac{q'_l(v)}{q'_l(v-i)} \phi_+(v) \phi_-(v) e^{\beta\mu_{l+1}} \\ &+ \frac{q'_l(v)}{q'_l(v-i)} \frac{g_{l+1}(v-i)}{g_{l+1}(v)} \phi_+(v) \phi_-(v) e^{\beta\mu_l} \\ &= \frac{\tilde{g}_{l-1}(v-i)}{\tilde{g}_{l-1}(v)} \frac{\tilde{q}_l(v+i)}{\tilde{q}_l(v)} \phi_+(v) \phi_-(v) e^{\beta\tilde{\mu}_l} \\ &+ \frac{\tilde{q}_l(v+i)}{\tilde{q}_l(v)} \frac{\tilde{g}_{l+1}(v-i)}{\tilde{g}_{l+1}(v)} \phi_+(v) \phi_-(v) e^{\beta\tilde{\mu}_{l+1}} \\ &= \tilde{\lambda}_l(v) + \tilde{\lambda}_{l+1}(v) \end{aligned} \quad (\text{B.34})$$

Der letzte Ausdruck steht für die entsprechenden Terme bei negativer Graduierung der Spinkomponente $l+1$. Die übrigen $\lambda_j(v)$ gehen in trivialer Weise in $\tilde{\lambda}_j(v)$ über, so daß letztlich

$$\Lambda(v) = \tilde{\Lambda}(v) \quad (\text{B.35})$$

die Eigenwerte für beide Graduierungen übereinstimmen.

Die Verschiebung der negativen Graduierung von der Spinkomponente l zur Spinkomponente $l-1$ ist ebenfalls möglich. Dazu wertet man das Polynom $p_{l-1}(v)$ von (B.27) an den Stellen v und $v+i$ aus und teilt wiederum die Ergebnisse durcheinander. Man erhält dann eine

zu (B.33) analoge Gleichung, mit der sich unter Berücksichtigung der Umparametrisierungen (B.20) die Beziehung

$$\lambda_{l-1}(v) + \lambda_l(v) = \bar{\lambda}_{l-1}(v) + \bar{\lambda}_l(v) \quad (\text{B.36})$$

ergibt, wobei sich die gestrichenen Größen auf den Fall mit negativer Graduierung bei Spinkomponente $l - 1$ beziehen. Die übrigen Anteile gehen wiederum trivial ineinander über. Die Eigenwerte stimmen also auch dann überein, wenn man die negative Graduierung von Komponente l nach $l - 1$ verschiebt, d.h.

$$\Lambda(v) = \bar{\Lambda}(v) \quad (\text{B.37})$$

Insgesamt läßt sich festhalten, daß es stets möglich ist, die Graduierung einer Spinkomponente auf die nächsthöhere bzw. niedrigere Komponente zu verschieben. Es ergeben sich dabei jeweils neue Bethe-Ansatzgleichungen, die in angegebener Weise aus den alten Gleichungen hervorgehen und mit dem bereits bekannten Ergebnis (2.70) übereinstimmen.

Damit ist gezeigt, daß für alle verschiedenen Möglichkeiten, nur eine der Spinkomponenten negativ zu graduieren, die Bethe-Ansatzgleichungen äquivalent ineinander transformierbar sind. Zudem wurde gezeigt, daß sich dabei stets dasselbe Eigenwertspektrum ergibt.

B.2 Beliebige graduierte Spinkomponenten

B.2.1 Zwei negative Graduierungen

Die im vorigen Abschnitt angegebene Herleitung läßt sich auf den Fall zweier negativ graduiertes Spinkomponenten l_1 und l_2 erweitern. Sofern die negativ graduierten Spinkomponenten zu Beginn der Rechnung mehr als eine Position auseinanderliegen, d.h. $|l_1 - l_2| \geq 2$, ist das angegebene Verfahren analog anwendbar. Jede der Graduierungen beeinflusst hier jedoch jeweils zwei der Bethe-Ansatzgleichungen, nämlich diejenigen für Satz l_1 und $l_1 - 1$ bzw. l_2 und $l_2 - 1$, wie in (B.1).

Sowohl die Graduierung bei l_1 , als auch die bei l_2 kann in der gewohnten Weise zur nächsten bzw. letzten Spinkomponente verschoben werden. Die Bethe-Ansatzzahlen und Felder ergeben sich wie vorher aus (B.25) und (B.26) bzw. (B.28) und (B.29). Dabei ist $l = l_1$ oder $l = l_2$, je nachdem, für welche der Spinkomponenten gerechnet wird.

Liegen die negativ graduierten Komponenten dagegen nebeneinander, d.h. $|l_1 - l_2| = 1$, so werden von der Graduierung lediglich drei statt vier der Ansatzgleichungen beeinflusst. Für $l_2 = l_1 + 1$ lauten die drei Gleichungen

$$\frac{g_{l_1}(v_{k_{l_1+1}}^{l_1+1} + i)}{g_{l_1}(v_{k_{l_1+1}}^{l_1+1})} \frac{g_{l_1+2}(v_{k_{l_1+1}}^{l_1+1})}{g_{l_1+2}(v_{k_{l_1+1}}^{l_1+1} + i)} = -e^{\beta(\mu_{l_1+2} - \mu_{l_1+1})} \quad (\text{B.38a})$$

$$\frac{g_{l_1-1}(v_{k_{l_1}}^{l_1} + i)}{g_{l_1-1}(v_{k_{l_1}}^{l_1})} \frac{g_{l_1}(v_{k_{l_1}}^{l_1} - i)}{g_{l_1}(v_{k_{l_1}}^{l_1} + i)} \frac{g_{l_1+1}(v_{k_{l_1}}^{l_1})}{g_{l_1+1}(v_{k_{l_1}}^{l_1} - i)} = -e^{\beta(\mu_{l_1+1} - \mu_{l_1})} \quad (\text{B.38b})$$

$$\frac{g_{l_1-2}(v_{k_{l_1-1}}^{l_1-1} - i)}{g_{l_1-2}(v_{k_{l_1-1}}^{l_1-1})} \frac{g_{l_1}(v_{k_{l_1-1}}^{l_1-1})}{g_{l_1}(v_{k_{l_1-1}}^{l_1-1} - i)} = -e^{\beta(\mu_{l_1} - \mu_{l_1-1})} \quad (\text{B.38c})$$

Offensichtlich können nur zwei dieser drei Gleichungen, (B.38a) und (B.38c), als Ausgangspunkt des Verfahrens aus Abschnitt B.1.1 genutzt werden. Bei Anwendung auf Gleichung

(B.38a) mit $l = l_2 = l_1 + 1$ entspricht dies effektiv einer Verschiebung der negativen Graduierung der Spinkomponente l_2 auf Position $l_2 + 1$. Es ergeben sich dabei wieder die richtigen Bethe-Ansatzgleichung und mit einer zu Abschnitt B.1.2 analogen Rechnung auch die korrekten Gleichungen für die Eigenwerte. Die Eigenwerte selbst gehen identisch ineinander über. Angewendet auf (B.38c) mit $l = l_1$ erhält man erwartungsgemäß effektiv eine Verschiebung der negativen Graduierung von Spinkomponente l_1 auf die Position $l_1 - 1$. Die Rechnung ist dann ebenfalls konsistent.

Insgesamt sind also alle Bethe-Ansatzgleichungen und Gleichungen für die Eigenwerte auch für zwei an beliebigen Positionen sitzende, negativ graduierte Spinkomponenten ineinander transformierbar, indem die Graduierungen jeweils einzeln und schrittweise verschoben werden. Die sich ergebenden Eigenwerte sind für alle Varianten identisch.

B.2.2 Beliebige Wahl der Graduierung

Analog zur Argumentation des letzten Abschnittes können beliebig viele weitere, negativ graduierte Spinkomponenten hinzugefügt werden. Alle möglichen Bethe-Ansatzgleichungen und Gleichungen für die Eigenwerte für eine feste Gesamtzahl positiver wie negativer Graduierungen können nach dem betrachteten Verfahren schrittweise ineinander transformiert werden. Dabei ergibt sich stets, daß die Eigenwerte unabhängig von den konkreten Positionen der graduierten Spinkomponenten sind.

Es kann im Rahmen des Bethe-Ansatzes immer die für konkrete Rechnungen günstigste Darstellung gewählt werden.

Anhang C

Tabellen der Bethe-Ansatzzahlverteilungen

In diesem Anhang sind auf den folgenden Seiten die Tabellen aus Abschnitt 3.2 zusammengefaßt, die zu den dort abgebildeten Verteilungen der Bethe-Ansatzzahlen die zugehörigen Werte beinhalten. In Klammern hinter den Eigenwerten ist jeweils angegeben, wie viele entartete Eigenzustände zu jeder Ansatzzahlverteilung vorhanden sind.

Die Eigenwerte und Ansatzzahlen zu den größten Eigenwerten des $SU(3)$ -Modells finden sich in den Tabellen C.1–C.4, diejenigen des $SU(4)$ -Modells in den Tabellen C.5–C.9. Schließlich sind die entsprechenden Zahlen des supersymmetrischen t-J-Modells in den Tabellen C.10–C.14 und die des EKS-Modells in den Tabellen C.15–C.19 zusammengefaßt.

Eigenwert Λ	Abb.	Satz	Bethe-Ansatzzahlen
2.899548494+0.000000000i (1)	3.17a	Satz 1 ($M_1 = 6$)	-0.035493257-0.008225855i -0.009931158-0.001153751i -0.002669571-0.000620394i 0.002669571-0.000620394i 0.009931158-0.001153751i 0.035493257-0.008225855i
		Satz 2 ($M_2 = 6$)	-0.035493257+0.008225855i -0.009931158+0.001153751i -0.002669571+0.000620394i 0.002669571+0.000620394i 0.009931158+0.001153751i 0.035493257+0.008225855i
-0.112736496+0.000000000i (8)	3.17b	Satz 1 ($M_1 = 5$)	-0.017129622+0.000219289i -0.005751961+0.000075290i 0.000000000+0.000056680i 0.005751961+0.000075290i 0.017129622+0.000219289i
		Satz 2 ($M_2 = 5$)	-0.017129622-0.000219289i -0.005751961-0.000075290i 0.000000000-0.000056680i 0.005751961-0.000075290i 0.017129622-0.000219289i
0.016032988+0.000000000i (8)	3.17c	Satz 1 ($M_1 = 5$)	-0.006273361-0.000006503i -0.000382300-0.000007008i 0.005256130-0.000011851i 0.015740754-0.000047454i 0.137753891-0.010453931i
		Satz 2 ($M_2 = 5$)	-0.006273361+0.000006503i -0.000382300+0.000007008i 0.005256130+0.000011851i 0.015740754+0.000047454i 0.137753891+0.010453931i
0.016032988+0.000000000i (8)	3.17d	Satz 1 ($M_1 = 5$)	-0.137753891-0.010453931i -0.015740754-0.000047454i -0.005256130-0.000011851i 0.000382300-0.000007008i 0.006273361-0.000006503i
		Satz 2 ($M_2 = 5$)	-0.137753891+0.010453931i -0.015740754+0.000047454i -0.005256130+0.000011851i 0.000382300+0.000007008i 0.006273361+0.000006503i

Tabelle C.1: Bethe-Ansatzzahlen der größten Eigenwerte des SU(3)-symmetrischen Modells bei Trotterzahl $N = 12$ und $u = -0.01$. (Teil 1)

Eigenwert Λ	Abb.	Satz	Bethe-Ansatzzahlen
$-0.012871361+0.000000000i$ (8)	3.17e	Satz 1 ($M_1 = 5$)	$-0.145579283-0.009307995i$ $-0.005336946+0.000005093i$ $0.000318763+0.000005978i$ $0.006184931+0.000011009i$ $0.018454910+0.000051844i$
		Satz 2 ($M_2 = 5$)	$-0.145579283+0.009307995i$ $-0.005336946-0.000005093i$ $0.000318763-0.000005978i$ $0.006184931-0.000011009i$ $0.018454910-0.000051844i$
$-0.012871361+0.000000000i$ (8)	3.18f	Satz 1 ($M_1 = 5$)	$-0.018454910+0.000051844i$ $-0.006184931+0.000011009i$ $-0.000318763+0.000005978i$ $0.005336946+0.000005093i$ $0.145579283-0.009307995i$
		Satz 2 ($M_2 = 5$)	$-0.018454910-0.000051844i$ $-0.006184931-0.000011009i$ $-0.000318763-0.000005978i$ $0.005336946-0.000005093i$ $0.145579283+0.009307995i$
$-0.008420021+0.000000000i$ (1)	3.18g	Satz 1 ($M_1 = 6$)	$-0.010017470+0.000006673i$ $-0.002681998+0.000003819i$ $0.000000000-0.500914659i$ $0.000000000+0.480893676i$ $0.002681998+0.000003819i$ $0.010017470+0.000006673i$
		Satz 2 ($M_2 = 6$)	$-0.010017470-0.000006673i$ $-0.002681998-0.000003819i$ $0.000000000-0.480893676i$ $0.000000000+0.500914659i$ $0.002681998-0.000003819i$ $0.010017470-0.000006673i$
$0.005228863+0.000000000i$ (8)	3.18h	Satz 1 ($M_1 = 5$)	$-0.018636195+0.000019504i$ $-0.000359415-0.000002215i$ $0.005285168-0.000005634i$ $0.015818911-0.000030224i$ $0.140510958-0.010062041i$
		Satz 2 ($M_2 = 5$)	$-0.018636195-0.000019504i$ $-0.000359415+0.000002215i$ $0.005285168+0.000005634i$ $0.015818911+0.000030224i$ $0.140510958+0.010062041i$

Tabelle C.2: Bethe-Ansatzzahlen der größten Eigenwerte des SU(3)-symmetrischen Modells bei Trotterzahl $N = 12$ und $u = -0.01$. (Teil 2)

Eigenwert Λ	Abb.	Satz	Bethe-Ansatzzahlen
$0.005228863+0.000000000i$ (8)	3.18i	Satz 1 ($M_1 = 5$)	$-0.140510958-0.010062041i$ $-0.015818911-0.000030224i$ $-0.005285168-0.000005634i$ $0.000359415-0.000002215i$ $0.018636195+0.000019504i$
		Satz 2 ($M_2 = 5$)	$-0.140510958+0.010062041i$ $-0.015818911+0.000030224i$ $-0.005285168+0.000005634i$ $0.000359415+0.000002215i$ $0.018636195-0.000019504i$
$-0.004478022+0.000000000i$ (8)	3.19j	Satz 1 ($M_1 = 5$)	$-0.010067853+0.000018476i$ $-0.002689179+0.000010456i$ $0.000000000+0.363187611i$ $0.002689179+0.000010456i$ $0.010067853+0.000018476i$
		Satz 2 ($M_2 = 5$)	$-0.010067853-0.000018476i$ $-0.002689179-0.000010456i$ $0.000000000-0.363187611i$ $0.002689179-0.000010456i$ $0.010067853-0.000018476i$
$-0.004363562+0.000000000i$ (8)	3.19k	Satz 1 ($M_1 = 5$)	$-0.143121274-0.009679093i$ $-0.015891692-0.000014431i$ $0.000338256+0.000002101i$ $0.006211986+0.000005816i$ $0.018541475+0.000036698i$
		Satz 2 ($M_2 = 5$)	$-0.143121274+0.009679093i$ $-0.015891692+0.000014431i$ $0.000338256-0.000002101i$ $0.006211986-0.000005816i$ $0.018541475-0.000036698i$
$-0.004363562+0.000000000i$ (8)	3.19l	Satz 1 ($M_1 = 5$)	$-0.018541475+0.000036698i$ $-0.006211986+0.000005816i$ $-0.000338256+0.000002101i$ $0.015891692-0.000014431i$ $0.143121274-0.009679093i$
		Satz 2 ($M_2 = 5$)	$-0.018541475-0.000036698i$ $-0.006211986-0.000005816i$ $-0.000338256-0.000002101i$ $0.015891692+0.000014431i$ $0.143121274+0.009679093i$

Tabelle C.3: Bethe-Ansatzzahlen der größten Eigenwerte des $SU(3)$ -symmetrischen Modells bei Trotterzahl $N = 12$ und $u = -0.01$. (Teil 3)

Eigenwert Λ	Abb.	Satz	Bethe-Ansatzzahlen
$0.002679683+0.000000000i$ (27)	3.19m	Satz 1 ($M_1 = 4$)	$-0.009933093-0.000002288i$ $-0.002669825-0.000001335i$ $0.002669825-0.000001335i$ $0.009933093-0.000002288i$
		Satz 2 ($M_2 = 4$)	$-0.009933093+0.000002288i$ $-0.002669825+0.000001335i$ $0.002669825+0.000001335i$ $0.009933093+0.000002288i$

Tabelle C.4: Bethe-Ansatzzahlen der größten Eigenwerte des SU(3)-symmetrischen Modells bei Trotterzahl $N = 12$ und $u = -0.01$. (Teil 4)

Eigenwert Λ	Abb.	Satz	Bethe-Ansatzzahlen
$3.917857781+0.000000000i$ (1)	3.20a	Satz 1 ($M_1 = 5$)	$-0.027281946-0.010287017i$ $-0.007131705-0.001664669i$ $0.000000000-0.001096628i$ $0.007131705-0.001664669i$ $0.027281946-0.010287017i$
		Satz 2 ($M_2 = 5$)	$-0.030743959+0.000000000i$ $-0.007264290+0.000000000i$ $0.000000000+0.000000000i$ $0.007264290+0.000000000i$ $0.030743959+0.000000000i$
		Satz 3 ($M_3 = 5$)	$-0.027281946+0.010287017i$ $-0.007131705+0.001664669i$ $0.000000000+0.001096628i$ $0.007131705+0.001664669i$ $0.027281946+0.010287017i$
$-0.093064499+0.000000000i$ (15)	3.20b	Satz 1 ($M_1 = 4$)	$-0.013580091+0.000321555i$ $-0.003232322+0.000126925i$ $0.003232322+0.000126925i$ $0.013580091+0.000321555i$
		Satz 2 ($M_2 = 4$)	$-0.013590262+0.000000000i$ $-0.003233297+0.000000000i$ $0.003233297+0.000000000i$ $0.013590262+0.000000000i$
		Satz 3 ($M_3 = 4$)	$-0.013580091-0.000321555i$ $-0.003232322-0.000126925i$ $0.003232322-0.000126925i$ $0.013580091-0.000321555i$

Tabelle C.5: Bethe-Ansatzzahlen der größten Eigenwerte des SU(4)-symmetrischen Modells bei Trotterzahl $N = 10$ und $u = -0.01$. (Teil 1)

Eigenwert Λ	Abb.	Satz	Bethe-Ansatzzahlen
$0.013644635 + 0.000000000i$ (15)	3.20c	Satz 1 ($M_1 = 4$)	$-0.003782473 - 0.000012045i$ $0.002704457 - 0.000018189i$ $0.012312501 - 0.000067276i$ $0.109436210 - 0.013055536i$
		Satz 2 ($M_2 = 4$)	$-0.003783929 + 0.000000000i$ $0.002702163 + 0.000000000i$ $0.012303726 + 0.000000000i$ $0.109448734 + 0.000000000i$
		Satz 3 ($M_3 = 4$)	$-0.003782473 + 0.000012045i$ $0.002704457 + 0.000018189i$ $0.012312501 + 0.000067276i$ $0.109436210 + 0.013055536i$
$0.013644635 + 0.000000000i$ (15)	3.20d	Satz 1 ($M_1 = 4$)	$-0.109436210 - 0.013055536i$ $-0.012312501 - 0.000067276i$ $-0.002704457 - 0.000018189i$ $0.003782473 - 0.000012045i$
		Satz 2 ($M_2 = 4$)	$-0.109448734 + 0.000000000i$ $-0.012303726 + 0.000000000i$ $-0.002702163 + 0.000000000i$ $0.003783929 + 0.000000000i$
		Satz 3 ($M_3 = 4$)	$-0.109436210 + 0.013055536i$ $-0.012312501 + 0.000067276i$ $-0.002704457 + 0.000018189i$ $0.003782473 + 0.000012045i$
$-0.010634199 + 0.000000000i$ (15)	3.20e	Satz 1 ($M_1 = 4$)	$-0.115531310 - 0.011628309i$ $-0.002788112 + 0.000009686i$ $0.003692810 + 0.000016609i$ $0.014826774 + 0.000074746i$
		Satz 2 ($M_2 = 4$)	$-0.115522173 + 0.000000000i$ $-0.002789165 + 0.000000000i$ $0.003691126 + 0.000000000i$ $0.014820374 + 0.000000000i$
		Satz 3 ($M_3 = 4$)	$-0.115531310 + 0.011628309i$ $-0.002788112 - 0.000009686i$ $0.003692810 - 0.000016609i$ $0.014826774 - 0.000074746i$

Tabelle C.6: Bethe-Ansatzzahlen der größten Eigenwerte des SU(4)-symmetrischen Modells bei Trotterzahl $N = 10$ und $u = -0.01$. (Teil 2)

Eigenwert Λ	Abb.	Satz	Bethe-Ansatzzahlen
$-0.010634199+0.000000000i$ (15)	3.21f	Satz 1 ($M_1 = 4$)	$-0.014826774+0.000074746i$ $-0.003692810+0.000016609i$ $0.002788112+0.000009686i$ $0.115531310-0.011628309i$
		Satz 2 ($M_2 = 4$)	$-0.014820374+0.000000000i$ $-0.003691126+0.000000000i$ $0.002789165+0.000000000i$ $0.115522173+0.000000000i$
		Satz 3 ($M_3 = 4$)	$-0.014826774-0.000074746i$ $-0.003692810-0.000016609i$ $0.002788112-0.000009686i$ $0.115531310+0.011628309i$
$-0.007610196+0.000000000i$ (1)	3.21g	Satz 1 ($M_1 = 5$)	$-0.007273839+0.000007674i$ $0.000000000+0.000005310i$ $0.000000000-0.454621316i$ $0.000000000+0.429600658i$ $0.007273839+0.000007674i$
		Satz 2 ($M_2 = 5$)	$-0.007273831+0.000000000i$ $0.000000000+0.000000000i$ $0.000000000+0.510611275i$ $0.000000000-0.510611273i$ $0.007273831+0.000000000i$
		Satz 3 ($M_3 = 5$)	$-0.007273839-0.000007674i$ $0.000000000-0.429600656i$ $0.000000000-0.000005310i$ $0.000000000+0.454621315i$ $0.007273839-0.000007674i$
$-0.004117298+0.000000000i$ (15)	3.21h	Satz 1 ($M_1 = 4$)	$-0.007318874+0.000019116i$ $0.000000000+0.298911643i$ $0.000000000+0.000013092i$ $0.007318874+0.000019116i$
		Satz 2 ($M_2 = 4$)	$-0.008055918+0.000000000i$ $-0.001738391+0.000000000i$ $0.001738391+0.000000000i$ $0.008055918+0.000000000i$
		Satz 3 ($M_3 = 4$)	$-0.007318874-0.000019116i$ $0.000000000-0.000013092i$ $0.000000000-0.298911643i$ $0.007318874-0.000019116i$

Tabelle C.7: Bethe-Ansatzzahlen der größten Eigenwerte des $SU(4)$ -symmetrischen Modells bei Trotterzahl $N = 10$ und $u = -0.01$. (Teil 3)

Eigenwert Λ	Abb.	Satz	Bethe-Ansatzzahlen
$0.003303877+0.000000000i$ (15)	3.21i	Satz 1 ($M_1 = 4$)	$-0.014978247+0.000031858i$ $0.002738635-0.000006563i$ $0.012391135-0.000039522i$ $0.111891929-0.012496942i$
		Satz 2 ($M_2 = 4$)	$-0.014975101+0.000000000i$ $0.002737854+0.000000000i$ $0.012386202+0.000000000i$ $0.111894498+0.000000000i$
		Satz 3 ($M_3 = 4$)	$-0.014978247-0.000031858i$ $0.002738635+0.000006563i$ $0.012391135+0.000039522i$ $0.111891929+0.012496942i$
$0.003303877+0.000000000i$ (15)	3.22j	Satz 1 ($M_1 = 4$)	$-0.111891929-0.012496942i$ $-0.012391135-0.000039522i$ $-0.002738635-0.000006563i$ $0.014978247+0.000031858i$
		Satz 2 ($M_2 = 4$)	$-0.111894498+0.000000000i$ $-0.012386202+0.000000000i$ $-0.002737854+0.000000000i$ $0.014975101+0.000000000i$
		Satz 3 ($M_3 = 4$)	$-0.111891929+0.012496942i$ $-0.012391135+0.000039522i$ $-0.002738635+0.000006563i$ $0.014978247-0.000031858i$
$-0.002397770+0.000000000i$ (15)	3.22k	Satz 1 ($M_1 = 4$)	$-0.113331542-0.012159148i$ $-0.012436733-0.000023666i$ $0.003724585+0.000006741i$ $0.014917516+0.000049413i$
		Satz 2 ($M_2 = 4$)	$-0.113329067+0.000000000i$ $-0.012433857+0.000000000i$ $0.003723854+0.000000000i$ $0.014912896+0.000000000i$
		Satz 3 ($M_3 = 4$)	$-0.113331542+0.012159148i$ $-0.012436733+0.000023666i$ $0.003724585-0.000006741i$ $0.014917516-0.000049413i$

Tabelle C.8: Bethe-Ansatzzahlen der größten Eigenwerte des SU(4)-symmetrischen Modells bei Trotterzahl $N = 10$ und $u = -0.01$. (Teil 4)

Eigenwert Λ	Abb.	Satz	Bethe-Ansatzzahlen
$-0.002397770+0.000000000i$ (15)	3.22l	Satz 1 ($M_1 = 4$)	$-0.014917516+0.000049413i$ $-0.003724585+0.000006741i$ $0.012436733-0.000023666i$ $0.113331542-0.012159148i$
		Satz 2 ($M_2 = 4$)	$-0.014912896+0.000000000i$ $-0.003723854+0.000000000i$ $0.012433857+0.000000000i$ $0.113329067+0.000000000i$
		Satz 3 ($M_3 = 4$)	$-0.014917516-0.000049413i$ $-0.003724585-0.000006741i$ $0.012436733+0.000023666i$ $0.113331542+0.012159148i$

Tabelle C.9: Bethe-Ansatzzahlen der größten Eigenwerte des $SU(4)$ -symmetrischen Modells bei Trotterzahl $N = 10$ und $u = -0.01$. (Teil 5)

Eigenwert Λ	Abb.	Satz	Bethe-Ansatzzahlen
$2.984071138+0.000000000i$ (1)	3.23a	Satz 1 ($M_1 = 6$)	$-0.035288865-0.008666989i$ $-0.009923066-0.001221673i$ $-0.002668401-0.000657166i$ $0.002668401-0.000657166i$ $0.009923066-0.001221673i$ $0.035288865-0.008666989i$
		Satz 2 ($M_2 = 6$)	$-0.035288865+0.008666989i$ $-0.009923066+0.001221673i$ $-0.002668401+0.000657166i$ $0.002668401+0.000657166i$ $0.009923066+0.001221673i$ $0.035288865+0.008666989i$
$-0.117894016+0.000000000i$ (4)	3.23b	Satz 1 ($M_1 = 5$)	$-0.017257837-0.000205730i$ $-0.005766502-0.000069230i$ $0.000000000-0.000051984i$ $0.005766502-0.000069230i$ $0.017257837-0.000205730i$
		Satz 2 ($M_2 = 5$)	$-0.017257837+0.000205730i$ $-0.005766502+0.000069230i$ $0.000000000+0.000051984i$ $0.005766502+0.000069230i$ $0.017257837+0.000205730i$

Tabelle C.10: Bethe-Ansatzzahlen der größten Eigenwerte des supersymmetrischen t-J-Modells bei Trotterzahl $N = 12$ und $u = -0.01$. (Teil 1)

Eigenwert Λ	Abb.	Satz	Bethe-Ansatzzahlen
$-0.112743352+0.000000000i$ (3)	3.23c	Satz 1 ($M_1 = 5$)	$-0.017129819+0.000218705i$ $-0.005751983+0.000075087i$ $0.000000000+0.000056527i$ $0.005751983+0.000075087i$ $0.017129819+0.000218705i$
		Satz 2 ($M_2 = 5$)	$-0.017129819-0.000218705i$ $-0.005751983-0.000075087i$ $0.000000000-0.000056527i$ $0.005751983-0.000075087i$ $0.017129819-0.000218705i$
$0.042595926+0.000000000i$ (1)	3.23d	Satz 1 ($M_1 = 6$)	$-0.017802325-0.000085645i$ $-0.005825154-0.000026489i$ $0.000000000-0.000019688i$ $0.000000000+0.712670506i$ $0.005825154-0.000026489i$ $0.017802325-0.000085645i$
		Satz 2 ($M_2 = 6$)	$-0.017802325+0.000085645i$ $-0.005825154+0.000026489i$ $0.000000000+0.000019688i$ $0.000000000-0.712670506i$ $0.005825154+0.000026489i$ $0.017802325+0.000085645i$
$0.016161815+0.000000000i$ (3)	3.23e	Satz 1 ($M_1 = 5$)	$-0.006277515-0.000006830i$ $-0.000385479-0.000007358i$ $0.005251853-0.000012437i$ $0.015728044-0.000049743i$ $0.136793841-0.010753194i$
		Satz 2 ($M_2 = 5$)	$-0.006277515+0.000006830i$ $-0.000385479+0.000007358i$ $0.005251853+0.000012437i$ $0.015728044+0.000049743i$ $0.136793841+0.010753194i$
$0.016161815+0.000000000i$ (3)	3.24f	Satz 1 ($M_1 = 5$)	$-0.136793841-0.010753194i$ $-0.015728044-0.000049743i$ $-0.005251853-0.000012437i$ $0.000385479-0.000007358i$ $0.006277515-0.000006830i$
		Satz 2 ($M_2 = 5$)	$-0.136793841+0.010753194i$ $-0.015728044+0.000049743i$ $-0.005251853+0.000012437i$ $0.000385479+0.000007358i$ $0.006277515+0.000006830i$

Tabelle C.11: Bethe-Ansatzzahlen der größten Eigenwerte des supersymmetrischen t-J-Modells bei Trotterzahl $N = 12$ und $u = -0.01$. (Teil 2)

Eigenwert Λ	Abb.	Satz	Bethe-Ansatzzahlen
$-0.012941304+0.000000000i$ (3)	3.24g	Satz 1 ($M_1 = 5$)	$-0.144724951-0.009535148i$ $-0.005334078+0.000005310i$ $0.000320826+0.000006235i$ $0.006187526+0.000011484i$ $0.018461404+0.000054087i$
		Satz 2 ($M_2 = 5$)	$-0.144724951+0.009535148i$ $-0.005334078-0.000005310i$ $0.000320826-0.000006235i$ $0.006187526-0.000011484i$ $0.018461404-0.000054087i$
$-0.012941304+0.000000000i$ (3)	3.24h	Satz 1 ($M_1 = 5$)	$-0.018461404+0.000054087i$ $-0.006187526+0.000011484i$ $-0.000320826+0.000006235i$ $0.005334078+0.000005310i$ $0.144724951-0.009535148i$
		Satz 2 ($M_2 = 5$)	$-0.018461404-0.000054087i$ $-0.006187526-0.000011484i$ $-0.000320826-0.000006235i$ $0.005334078-0.000005310i$ $0.144724951+0.009535148i$
$0.008673733+0.000000000i$ (4)	3.24i	Satz 1 ($M_1 = 5$)	$-0.017257837-0.000205730i$ $-0.005766502-0.000069230i$ $0.000000000-0.000051984i$ $0.005766502-0.000069230i$ $0.017257837-0.000205730i$
		Satz 2 ($M_2 = 5$)	$-0.017257837+0.000205730i$ $-0.005766502+0.000069230i$ $0.000000000+0.000051984i$ $0.005766502+0.000069230i$ $0.017257837+0.000205730i$
$0.008673733+0.000000000i$ (4)	3.25j	Satz 1 ($M_1 = 5$)	$-0.017257837-0.000205730i$ $-0.005766502-0.000069230i$ $0.000000000-0.000051984i$ $0.005766502-0.000069230i$ $0.017257837-0.000205730i$
		Satz 2 ($M_2 = 5$)	$-0.017257837+0.000205730i$ $-0.005766502+0.000069230i$ $0.000000000+0.000051984i$ $0.005766502+0.000069230i$ $0.017257837+0.000205730i$

Tabelle C.12: Bethe-Ansatzzahlen der größten Eigenwerte des supersymmetrischen t-J-Modells bei Trotterzahl $N = 12$ und $u = -0.01$. (Teil 3)

Eigenwert Λ	Abb.	Satz	Bethe-Ansatzzahlen
$0.001631219+0.008410142i$ (1)	3.25k	Satz 1 ($M_1 = 6$)	$-0.012264337+0.637307299i$ $-0.005666770+0.000787021i$ $-0.005314635+0.078207064i$ $0.000104146+0.000592303i$ $0.005945935+0.000802086i$ $0.018049319+0.002581342i$
		Satz 2 ($M_2 = 6$)	$-0.014018519-0.805377688i$ $-0.005673788+0.000788664i$ $-0.005164250+0.080337971i$ $0.000096130+0.000593607i$ $0.005931243+0.000803449i$ $0.017975525+0.002576883i$
$0.001631219+0.008410142i$ (1)	3.25l	Satz 1 ($M_1 = 6$)	$-0.017975525-0.002576883i$ $-0.005931243-0.000803449i$ $-0.000096130-0.000593607i$ $0.005164250-0.080337971i$ $0.005673788-0.000788664i$ $0.014018519+0.805377688i$
		Satz 2 ($M_2 = 6$)	$-0.018049319-0.002581342i$ $-0.005945935-0.000802086i$ $-0.000104146-0.000592303i$ $0.005314635-0.078207064i$ $0.005666770-0.000787021i$ $0.012264337-0.637307299i$
$0.001631219-0.008410142i$ (1)	3.25m	Satz 1 ($M_1 = 6$)	$-0.018049319+0.002581342i$ $-0.005945935+0.000802086i$ $-0.000104146+0.000592303i$ $0.005314635+0.078207064i$ $0.005666770+0.000787021i$ $0.012264337+0.637307299i$
		Satz 2 ($M_2 = 6$)	$-0.017975525+0.002576883i$ $-0.005931243+0.000803449i$ $-0.000096130+0.000593607i$ $0.005164250+0.080337971i$ $0.005673788+0.000788664i$ $0.014018519-0.805377688i$

Tabelle C.13: Bethe-Ansatzzahlen der größten Eigenwerte des supersymmetrischen t-J-Modells bei Trotterzahl $N = 12$ und $u = -0.01$. (Teil 4)

Eigenwert Λ	Abb.	Satz	Bethe-Ansatzzahlen
0.001631219 - 0.008410142i (1)	3.25n	Satz 1 ($M_1 = 6$)	-0.014018519 + 0.805377688i -0.005673788 - 0.000788664i -0.005164250 - 0.080337971i 0.000096130 - 0.000593607i 0.005931243 - 0.000803449i 0.017975525 - 0.002576883i
		Satz 2 ($M_2 = 6$)	-0.012264337 - 0.637307299i -0.005666770 - 0.000787021i -0.005314635 - 0.078207064i 0.000104146 - 0.000592303i 0.005945935 - 0.000802086i 0.018049319 - 0.002581342i
-0.007452746 + 0.000000000i (1)	3.25o	Satz 1 ($M_1 = 6$)	-0.010004411 + 0.000006537i -0.002680125 + 0.000003752i 0.000000000 - 0.405563988i 0.000000000 + 0.548628207i 0.002680125 + 0.000003752i 0.010004411 + 0.000006537i
		Satz 2 ($M_2 = 6$)	-0.010004411 - 0.000006537i -0.002680125 - 0.000003752i 0.000000000 - 0.548628207i 0.000000000 + 0.405563988i 0.002680125 - 0.000003752i 0.010004411 - 0.000006537i

Tabelle C.14: Bethe-Ansatzzahlen der größten Eigenwerte des supersymmetrischen t-J-Modells bei Trotterzahl $N = 12$ und $u = -0.01$. (Teil 5)

Eigenwert Λ	Abb.	Satz	Bethe-Ansatzzahlen
$4.020476045+0.000000000i$ (1)	3.26a	Satz 1 ($M_1 = 5$)	$-0.027092490-0.010532554i$ $-0.007123629-0.001714356i$ $0.000000000-0.001129797i$ $0.007123629-0.001714356i$ $0.027092490-0.010532554i$
		Satz 2 ($M_2 = 5$)	$-0.030744796+0.000000000i$ $-0.007264319+0.000000000i$ $0.000000000+0.000000000i$ $0.007264319+0.000000000i$ $0.030744796+0.000000000i$
		Satz 3 ($M_3 = 5$)	$-0.027092490+0.010532554i$ $-0.007123629+0.001714356i$ $0.000000000+0.001129797i$ $0.007123629+0.001714356i$ $0.027092490+0.010532554i$
$0.106720310+0.000000000i$ (3)	3.26b	Satz 1 ($M_1 = 5$)	$-0.013919716+0.000322271i$ $-0.003263070+0.000119766i$ $0.000000000+0.449839842i$ $0.003263070+0.000119766i$ $0.013919716+0.000322271i$
		Satz 2 ($M_2 = 4$)	$-0.013911203+0.000000000i$ $-0.003262315+0.000000000i$ $0.003262315+0.000000000i$ $0.013911203+0.000000000i$
		Satz 3 ($M_3 = 5$)	$-0.013919716-0.000322271i$ $-0.003263070-0.000119766i$ $0.000000000-0.449839842i$ $0.003263070-0.000119766i$ $0.013919716-0.000322271i$
$-0.100199982+0.000000000i$ (8)	3.26c	Satz 1 ($M_1 = 4$)	$-0.013755864-0.000289140i$ $-0.003248479-0.000110540i$ $0.003248479-0.000110540i$ $0.013755864-0.000289140i$
		Satz 2 ($M_2 = 4$)	$-0.013763819+0.000000000i$ $-0.003249197+0.000000000i$ $0.003249197+0.000000000i$ $0.013763819+0.000000000i$
		Satz 3 ($M_3 = 4$)	$-0.013755864+0.000289140i$ $-0.003248479+0.000110540i$ $0.003248479+0.000110540i$ $0.013755864+0.000289140i$

Tabelle C.15: Bethe-Ansatzzahlen der größten Eigenwerte des erweiterten supersymmetrischen Hubbard-Modells bei Trotterzahl $N = 10$ und $u = -0.01$. (Teil 1)

Eigenwert Λ	Abb.	Satz	Bethe-Ansatzzahlen
$-0.093071226+0.000000000i$ (3)	3.26d	Satz 1 ($M_1 = 4$)	$-0.013580300+0.000320947i$ $-0.003232342+0.000126680i$ $0.003232342+0.000126680i$ $0.013580300+0.000320947i$
		Satz 2 ($M_2 = 4$)	$-0.013590432+0.000000000i$ $-0.003233313+0.000000000i$ $0.003233313+0.000000000i$ $0.013590432+0.000000000i$
		Satz 3 ($M_3 = 4$)	$-0.013580300-0.000320947i$ $-0.003232342-0.000126680i$ $0.003232342-0.000126680i$ $0.013580300-0.000320947i$
$0.013745879+0.000000000i$ (3)	3.26e	Satz 1 ($M_1 = 4$)	$-0.003786473-0.000012446i$ $0.002700395-0.000018783i$ $0.012302008-0.000069388i$ $0.108726906-0.013229057i$
		Satz 2 ($M_2 = 4$)	$-0.003788009+0.000000000i$ $0.002697976+0.000000000i$ $0.012292770+0.000000000i$ $0.108740099+0.000000000i$
		Satz 3 ($M_3 = 4$)	$-0.003786473+0.000012446i$ $0.002700395+0.000018783i$ $0.012302008+0.000069388i$ $0.108726906+0.013229057i$
$0.013745879+0.000000000i$ (3)	3.27f	Satz 1 ($M_1 = 4$)	$-0.108726906-0.013229057i$ $-0.012302008-0.000069388i$ $-0.002700395-0.000018783i$ $0.003786473-0.000012446i$
		Satz 2 ($M_2 = 4$)	$-0.108740099+0.000000000i$ $-0.012292770+0.000000000i$ $-0.002697976+0.000000000i$ $0.003788009+0.000000000i$
		Satz 3 ($M_3 = 4$)	$-0.108726906+0.013229057i$ $-0.012302008+0.000069388i$ $-0.002700395+0.000018783i$ $0.003786473+0.000012446i$

Tabelle C.16: Bethe-Ansatzzahlen der größten Eigenwerte des erweiterten supersymmetrischen Hubbard-Modells bei Trotterzahl $N = 10$ und $u = -0.01$. (Teil 2)

Eigenwert Λ	Abb.	Satz	Bethe-Ansatzzahlen
$0.001552519+0.012410114i$ (3)	3.27g	Satz 1 ($M_1 = 5$)	$-0.016984927+0.295825585i$ $-0.003225289+0.000491650i$ $0.003276994+0.000494346i$ $0.003791306+0.164349132i$ $0.013850376+0.001322807i$
		Satz 2 ($M_2 = 4$)	$-0.003797546+0.111799536i$ $-0.003210485+0.000489567i$ $0.003301177+0.000491961i$ $0.013956659+0.001319895i$
		Satz 3 ($M_3 = 5$)	$-0.010839570-0.570734616i$ $-0.003990488+0.105944927i$ $-0.003202899+0.000488800i$ $0.003313585+0.000491675i$ $0.014010911+0.001325694i$
$0.001552519+0.012410114i$ (3)	3.27h	Satz 1 ($M_1 = 5$)	$-0.014010911-0.001325694i$ $-0.003313585-0.000491675i$ $0.003202899-0.000488800i$ $0.003990488-0.105944927i$ $0.010839570+0.570734616i$
		Satz 2 ($M_2 = 4$)	$-0.013956659-0.001319895i$ $-0.003301177-0.000491961i$ $0.003210485-0.000489567i$ $0.003797546-0.111799536i$
		Satz 3 ($M_3 = 5$)	$-0.013850376-0.001322807i$ $-0.003791306-0.164349132i$ $-0.003276994-0.000494346i$ $0.003225289-0.000491650i$ $0.016984927-0.295825585i$
$0.001552519-0.012410114i$ (3)	3.27i	Satz 1 ($M_1 = 5$)	$-0.013850376+0.001322807i$ $-0.003791306+0.164349132i$ $-0.003276994+0.000494346i$ $0.003225289+0.000491650i$ $0.016984927+0.295825585i$
		Satz 2 ($M_2 = 4$)	$-0.013956659+0.001319895i$ $-0.003301177+0.000491961i$ $0.003210485+0.000489567i$ $0.003797546+0.111799536i$
		Satz 3 ($M_3 = 5$)	$-0.014010911+0.001325694i$ $-0.003313585+0.000491675i$ $0.003202899+0.000488800i$ $0.003990488+0.105944927i$ $0.010839570-0.570734616i$

Tabelle C.17: Bethe-Ansatzzahlen der größten Eigenwerte des erweiterten supersymmetrischen Hubbard-Modells bei Trotterzahl $N = 10$ und $u = -0.01$. (Teil 3)

Eigenwert Λ	Abb.	Satz	Bethe-Ansatzzahlen
$0.001552519 - 0.012410114i$ (3)	3.27j	Satz 1 ($M_1 = 5$)	$-0.010839570 + 0.570734616i$ $-0.003990488 - 0.105944927i$ $-0.003202899 - 0.000488800i$ $0.003313585 - 0.000491675i$ $0.014010911 - 0.001325694i$
		Satz 2 ($M_2 = 4$)	$-0.003797546 - 0.111799536i$ $-0.003210485 - 0.000489567i$ $0.003301177 - 0.000491961i$ $0.013956659 - 0.001319895i$
		Satz 3 ($M_3 = 5$)	$-0.016984927 - 0.295825584i$ $-0.003225289 - 0.000491650i$ $0.003276994 - 0.000494346i$ $0.003791306 - 0.164349132i$ $0.013850376 - 0.001322807i$
$-0.010686044 + 0.000000000i$ (3)	3.27k	Satz 1 ($M_1 = 4$)	$-0.114899798 - 0.011756793i$ $-0.002785359 + 0.000009958i$ $0.003695387 + 0.000017084i$ $0.014832322 + 0.000076904i$
		Satz 2 ($M_2 = 4$)	$-0.114890241 + 0.000000000i$ $-0.002786461 + 0.000000000i$ $0.003693624 + 0.000000000i$ $0.014825630 + 0.000000000i$
		Satz 3 ($M_3 = 4$)	$-0.114899798 + 0.011756793i$ $-0.002785359 - 0.000009958i$ $0.003695387 - 0.000017084i$ $0.014832322 - 0.000076904i$
$-0.010686044 + 0.000000000i$ (3)	3.28l	Satz 1 ($M_1 = 4$)	$-0.014832322 + 0.000076904i$ $-0.003695387 + 0.000017084i$ $0.002785359 + 0.000009958i$ $0.114899798 - 0.011756793i$
		Satz 2 ($M_2 = 4$)	$-0.014825630 + 0.000000000i$ $-0.003693624 + 0.000000000i$ $0.002786461 + 0.000000000i$ $0.114890241 + 0.000000000i$
		Satz 3 ($M_3 = 4$)	$-0.014832322 - 0.000076904i$ $-0.003695387 - 0.000017084i$ $0.002785359 - 0.000009958i$ $0.114899798 + 0.011756793i$

Tabelle C.18: Bethe-Ansatzzahlen der größten Eigenwerte des erweiterten supersymmetrischen Hubbard-Modells bei Trotterzahl $N = 10$ und $u = -0.01$. (Teil 4)

Eigenwert Λ	Abb.	Satz	Bethe-Ansatzzahlen
$-0.007034090+0.000000000i$ (1)	3.28m	Satz 1 ($M_1 = 5$)	$-0.007262205+0.000008608i$ $0.000000000+0.000005973i$ $0.000000000+0.483946979i$ $0.000000000-0.374810762i$ $0.007262205+0.000008608i$
		Satz 2 ($M_2 = 5$)	$-0.007262255+0.000000000i$ $0.000000000-0.500831533i$ $0.000000000+0.500831533i$ $0.000000000+0.000000000i$ $0.007262255+0.000000000i$
		Satz 3 ($M_3 = 5$)	$-0.007262205-0.000008608i$ $0.000000000+0.374810762i$ $0.000000000-0.483946979i$ $0.000000000-0.000005973i$ $0.007262205-0.000008608i$
$0.003327468+0.000000000i$ (1)	3.28n	Satz 1 ($M_1 = 4$)	$-0.014986103+0.000032876i$ $0.002735135-0.000006766i$ $0.012381892-0.000040697i$ $0.111213844-0.012651938i$
		Satz 2 ($M_2 = 4$)	$-0.014982797+0.000000000i$ $0.002734313+0.000000000i$ $0.012376712+0.000000000i$ $0.111216539+0.000000000i$
		Satz 3 ($M_3 = 4$)	$-0.014986103-0.000032876i$ $0.002735135+0.000006766i$ $0.012381892+0.000040697i$ $0.111213844+0.012651938i$
$0.003327468+0.000000000i$ (1)	3.28o	Satz 1 ($M_1 = 4$)	$-0.111213844-0.012651938i$ $-0.012381892-0.000040697i$ $-0.002735135-0.000006766i$ $0.014986103+0.000032876i$
		Satz 2 ($M_2 = 4$)	$-0.111216539+0.000000000i$ $-0.012376712+0.000000000i$ $-0.002734313+0.000000000i$ $0.014982797+0.000000000i$
		Satz 3 ($M_3 = 4$)	$-0.111213844+0.012651938i$ $-0.012381892+0.000040697i$ $-0.002735135+0.000006766i$ $0.014986103-0.000032876i$

Tabelle C.19: Bethe-Ansatzzahlen der größten Eigenwerte des erweiterten supersymmetrischen Hubbard-Modells bei Trotterzahl $N = 10$ und $u = -0.01$. (Teil 5)

Literaturverzeichnis

- [1] I. Affleck, *Exact critical exponents for quantum spin chains, non-linear σ -models at $\theta = \pi$ and the quantum hall effect*, Nucl. Phys. B **265** (1986), 409–447.
- [2] ———, *Realization of a Witten critical theory in $(\text{CH}_3)_4\text{NMnCl}_3$* , Phys. Rev. Lett **56** (1986), no. 25, 2763–2766.
- [3] C. Ahn, M. Horibe, and K. Shigemoto, *Relation between Yang-Baxter and pair propagation equations in 16-vertex models*, Mod. Phys. Lett. B **8** (1994), 1729.
- [4] E. Anderson, Z. Bai, C. Bischof, S. Blackford, J. Demmel, J. Dongarra, J. Du Croz, A. Greenbaum, S. Hammarling, A. McKenney, and D. Sorensen, *LAPACK users' guide*, third ed., SIAM, Philadelphia, PA, 1999, <http://www.netlib.org/lapack/>.
- [5] V. I. Arnold, *Mathematical methods of classical mechanics*, second ed., Springer-Verlag, Berlin, 1989.
- [6] P.-A. Bares, G. Blatter, and M. Ogata, *Exact solution of the t - J model in one dimension at $2t = \pm J$: Ground state and excitation spectrum*, Phys. Rev. B **44** (1991), no. 1, 130–154.
- [7] R. J. Baxter, *Exactly solved models in statistical mechanics*, Academic Press, 1982.
- [8] H. Bethe, *Zur Theorie der Metalle. I. Eigenwerte und Eigenfunktionen der linearen Atomkette*, Z. Phys. **71** (1931), 205–226.
- [9] J. F. Cornwell, *Group theory in physics*, vol. I & II, Techniques of Physics, no. 7, Academic Press, London, 1984.
- [10] ———, *Group theory in physics: Supersymmetries and infinite-dimensional algebras*, vol. III, Techniques of Physics, no. 10, Academic Press, London, 1989.
- [11] H. J. de Vega, *Finite-size corrections for nested Bethe ansatz models and conformal invariance*, J. Phys. A: Math. Gen. **20** (1987), 6023–6036.
- [12] S. Eggert, I. Affleck, and M. Takahashi, *Susceptibility of the spin 1/2 Heisenberg anti-ferromagnetic chain*, Phys. Rev. Lett. **73** (1994), no. 2, 332–335.
- [13] F. H. L. Essler, V. E. Korepin, and K. Schoutens, *New exactly solvable model of strongly correlated electrons motivated by high- T_c superconductivity*, Phys. Rev. Lett. **68** (1992), no. 19, 2960–2963.
- [14] ———, *Electronic model for superconductivity*, Phys. Rev. Lett. **70** (1993), no. 1, 73–76.

- [15] B. Frischmuth, F. Mila, and M. Troyer, *Thermodynamics of the one-dimensional $SU(4)$ symmetric spin-orbital model*, Phys. Rev. Lett. **82** (1999), no. 4, 835–838.
- [16] A. Fujii and A. Klümper, *Anti-symmetrically fused model and non-linear integral equations in the three-state Uimin-Sutherland model*, Nucl. Phys. B **546** (1999), 751–764.
- [17] H. Georgi, *Lie algebras in particle physics: From isospin to unified theories*, Frontiers in Physics, no. 54, The Benjamin/Cummings Publishing Company, 1982.
- [18] F. Göhmann and V. E. Korepin, *Solution of the quantum inverse problem*, J. Phys. A: Math. Gen. **33** (2000), 1199–1220.
- [19] F. Göhmann and A. Seel, *A note on the Bethe ansatz solution of the supersymmetric t - J model*, arXiv:cond-mat/0309138, September 2003.
- [20] F. M. Gomes, *ARPACK++*, <http://www.ime.unicamp.br/~chico/arpac++/>.
- [21] M. Idzumi, T. Tokihiro, and M. Arai, *Solvable nineteen-vertex models and quantum spin chains of spin one*, J. Phys. I France **4** (1994), 1151–1159.
- [22] G. Jüttner and A. Klümper, *Exact calculation of thermodynamical quantities of the integrable t - J model*, Europhys. Lett. **37** (1997), no. 5, 335–340.
- [23] G. Jüttner, A. Klümper, and J. Suzuki, *Exact thermodynamics and Luttinger liquid properties of the integrable t - J model*, Nucl. Phys. B **487** (1997), 650–674.
- [24] C. T. Kelley, *Solving nonlinear equations with Newton's method*, SIAM, 2003.
- [25] A. Klümper, *Thermodynamics of the anisotropic spin-1/2 Heisenberg chain and related quantum spin chains*, Z. Phys. B **91** (1993), 507–519.
- [26] ———, *The spin-1/2 heisenberg chain: thermodynamics, quantum criticality and spin-Peierls exponents*, Euro. Phys. J. B **5** (1998), no. 3, 677–685.
- [27] A. Klümper, T. Wehner, and J. Zittartz, *Thermodynamics of the quantum Perk-Schultz model*, J. Phys. A: Mathematical and General **30** (1997), 1897–1912.
- [28] K. I. Kugel and D. I. Khomskii, *The Jahn-Teller effect and magnetism: transition metal compounds*, Sov. Phys. Usp. **25** (1982), no. 4, 231–256.
- [29] P. P. Kulish and E. K. Sklyanin, *Solutions of the Yang-Baxter equation*, Zap. Nauchn. Sem. LOMI **95** (1980), 129–160.
- [30] ———, *Solutions of the Yang-Baxter equation*, J. Sov. Math. **19** (1982), 1596–1620.
- [31] R. B. Lehoucq, D. C. Sorensen, and C. Yang, *ARPACK users' guide: Solution of large-scale eigenvalue problems with implicitly restarted Arnoldi methods*, SIAM, 1998, <http://www.caam.rice.edu/software/ARPACK/>.
- [32] Y. Q. Li, M. Ma, D. N. Shi, and F. C. Zhang, *$SU(4)$ theory for spin systems with orbital degeneracy*, Phys. Rev. Lett. **81** (1998), no. 16, 3527–3530.
- [33] Numerical Algorithms Group, *NAG C Library*, <http://www.nag.co.uk/>.

- [34] J. H. H. Perk and C. L. Schultz, *New families of commuting transfer matrices in q -state vertex models*, Phys. Lett. A **84** (1981), no. 8, 407–410.
- [35] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, and B. P. Flannery, *Numerical recipes in C: The art of scientific computing*, second ed., Cambridge University Press, 1992.
- [36] S. Sarkar, *Bethe-ansatz solution of the t - J model*, J. Phys. A: Math. Gen. **23** (1990), L409–L414.
- [37] ———, *The supersymmetric t - J model in one dimension*, J. Phys. A: Math. Gen. **24** (1991), 1137–1151.
- [38] P. Schlottmann, *Integrable narrow-band model with possible relevance to heavy-fermion systems*, Phys. Rev. B **36** (1987), no. 10, 5177–5185.
- [39] C. L. Schultz, *Eigenvectors of the multi-component generalization of the six-vertex model*, Physica A **122** (1983), 71–88.
- [40] J. Sirker, *Thermodynamics of a one-dimensional $S = 1/2$ spin-orbital model*, arXiv:cond-mat/0312365, December 2003.
- [41] J. Sirker and A. Klümper, *Thermodynamics and crossover phenomena in the correlation lengths of the one-dimensional t - J model*, Phys. Rev. B **66** (2002), no. 24, 245102.
- [42] B. Sutherland, *Model for a multicomponent quantum system*, Phys. Rev. B **12** (1975), no. 9, 3795–3805.
- [43] J. Suzuki, Y. Akutsu, and M. Wadati, *A new approach to quantum spin chains at finite temperature*, J. Phys. Soc. Japan **59** (1990), no. 8, 2667–2680.
- [44] M. Suzuki, *Generalized Trotter’s formula and systematic approximants of exponential operators and inner derivations with applications to many-body problems*, Commun. math. Phys. **51** (1976), 183–190.
- [45] ———, *Relationship between d -dimensional quantal spin systems and $(d+1)$ -dimensional Ising systems*, Prog. Theor. Phys. **56** (1976), no. 5, 1454–1469.
- [46] ———, *Transfer-matrix method and Monte Carlo simulation in quantum spin systems*, Phys. Rev. B **31** (1984), no. 5, 2957–2965.
- [47] M. Suzuki and M. Inoue, *The ST -transformation approach to analytic solutions of quantum systems. I*, Prog. Theor. Phys. **78** (1987), no. 4, 787–799.
- [48] G. V. Uimin, *One-dimensional problem for $S = 1$ with modified antiferromagnetic hamiltonian*, JETP Lett. **12** (1970), 225–228.
- [49] F. Woynarovich, *Low-energy excited states in a Hubbard chain with on-site attraction*, J. Phys. C: Solid State Phys. **16** (1983), 6593–6604.
- [50] Y. Yamashita, N. Shibata, and K. Ueda, *$SU(4)$ spin-orbit critical state in one dimension*, Phys. Rev. B **58** (1998), no. 14, 9114–9118.
- [51] C. N. Yang, *Some exact results for the many-body problem in one dimension with repulsive delta-function interaction*, Phys. Rev. Lett. **19** (1967), no. 23, 1312–1315.

Danksagung

An dieser Stelle sei allen gedankt, die zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen haben:

Prof. Dr. Andreas Klümper danke ich für die interessante und vielseitige Aufgabenstellung. Seine Ideen und Anregungen haben den Fortgang der Arbeit stets positiv beeinflusst.

Prof. Dr. Joachim Stolze, der freundlicherweise das Zweitgutachten übernommen hat, möchte ich ebenfalls danken.

Mein besonderer Dank gilt Alexander Seel und Dr. Michael Bortz, die das Korrekturlesen übernommen haben und für Fragen und Diskussionen stets zur Verfügung standen.

Dr. Jesko Sirker danke ich für die Betreuung meiner ersten Schritte bei der numerischen Lösung der Bethe-Ansatzgleichungen und zahlreiche Anregungen im weiteren Verlauf der Arbeit.

Außerdem danke ich allen Mitarbeitern der Arbeitsgruppen für Statistische Mechanik/Vielteilchensysteme und Statistische Physik der Universität Wuppertal, sowie den Mitarbeitern des Lehrstuhls für Theoretische Physik I der Universität Dortmund, die stets für eine hervorragende Arbeitsatmosphäre und ein angenehmes Umfeld gesorgt haben.

Meiner Mutter möchte ich meinen besonderen Dank aussprechen. Sie hat mir das Studium der Physik ermöglicht und mich stets unterstützt.

Schließlich danke ich Julia, die ebenfalls eine große Stütze ist und mich oftmals wiederaufgebaut hat.