Nichthermitesche Quantenketten mit Randtermen
Ungewöhnliche Anwendungen konformer Invarianz
und oberflächeninduzierte Phasenübergänge

von

Ulrich Bilstein

Diplomarbeit in Physik
angefertigt im
Physikalischen Institut

vorgelegt der
Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät
der
Rheinischen Friedrich-Wilhelms-Universität
Bonn

Mai 1996

Ich versichere, daß ich diese Arbeit selbständig verfaßt und keine anderen als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel benutzt sowie die Zitate kenntlich gemacht habe.

Referent:	Prof. Dr. V. Rittenberg
Korreferent:	Prof. Dr. G. von Gehlen

Inhalt

1. Einleitung

Das Studium von Quantenspinketten ist für die statistische Physik von besonderer Bedeutung. Sie treten nicht nur als Zeitentwicklungsoperatoren eindimensionaler Quantensysteme, sondern ebenfalls bei der Beschreibung eindimensionaler, klassischer, stochastischer Nichtgleichgewichtsprozesse und als logarithmische Ableitung der Transfermatrix zweidimensionaler, klassischer Gleichgewichtsmodelle auf.
Die größte Beachtung wurde bisher hermiteschen Ketten geschenkt. Im Zusammenhang mit stochastischen Prozessen erscheinen jedoch auf vollkommen natürliche Art nicht hermitesche Hamiltonoperatoren. Über ihre spektralen Eigenschaften, insbesondere den Einfluß von nichthermiteschen Randtermen auf das Spektrum, ist wenig bekannt.
In dieser Arbeit wird der Hamiltonoperator des asymmetrischen Diffusionsmodells mit offenen Rändern auf einem eindimensionalen Gitter betrachtet. Die Zeitentwicklung des Systems wird durch eine Mastergleichung beschrieben, welche sich auf eine euklidische Schrödingergleichung abbilden läßt[1]:

$$\frac{\partial}{\partial t} \mid P(t)\rangle = -H \mid P(t)\rangle \quad . \tag{1.1}$$

Der Vektor $\mid P(t)\rangle$ enthält die Wahrscheinlichkeiten dafür, das System in einer bestimmten Konfiguration zu finden. Der Hamiltonoperator des hier untersuchten Modells hat die Form

$$H = -\sum_{j=1}^{N-1}\left[q\sigma_j^-\sigma_{j+1}^+ + p\sigma_j^+\sigma_{j+1}^- + \frac{p+q}{4}(\sigma_j^z\sigma_{j+1}^z - 1) + \frac{q-p}{4}(\sigma_{j+1}^z - \sigma_j^z)\right] + B_1 + B_N \tag{1.2}$$

mit

$$\begin{aligned} B_1 &= \frac{\alpha}{2}(\sigma_1^z - 2\sigma_1^- + 1) \quad , \\ B_N &= -\frac{\beta}{2}(\sigma_N^z + 2\sigma_N^+ - 1) \quad . \end{aligned} \tag{1.3}$$

Die Parameter p und q entsprechen den Diffusionsraten von Teilchen nach rechts und links, während α die Rate für Teilcheninjektion am linken Rand und β die Rate für Teilchenextraktion am rechten Rand des Gitters bezeichnet. Dieser Hamiltonoperator ist nicht hermitesch.
Das total asymmetrische Diffusionsmodell ($q = 0$) wurde von Derrida, Domany und Mukamel [2] eingeführt und das Phasendiagramm für den Teilchenstrom des stationären Zustands in Abhängigkeit von α und β in der Molekularfeldnäherung gefunden. Der Grundzustand läßt sich durch einen Matrixproduktansatz auch exakt bestimmen [3][4]. Dabei ergeben sich zwei "massive" und eine "masselose" Phase. Die "massiven" Phasen werden durch eine "masselose" Linie getrennt. Hier bedeutet masselos, daß die räumliche Korrelationslänge divergiert, was einen algebraischen Abfall des räumlichen Konzentrationsprofils zur Folge hat, während massiv eine endliche räumliche Korrelationslänge impliziert, verbunden mit einem exponentiellen Abfall der räumlichen Konzentration.

Das Phasendiagramm für das teilweise asymmetrische System ($p \neq 0 \neq q$) wurde zuerst in [5] veröffentlicht. Die Berechnung von Korrelationsfunktionen für dieses System, ebenfalls mit Hilfe des Matrixproduktansatzes, wurde von Eßler und Rittenberg durchgeführt [6]. Diese bisher bekannten Ergebnisse beschränken sich jedoch auf den stationären Zustand. Das periodische System (mit $\alpha = \beta = 0$) wurde bereits von Gwa und Spohn [7] untersucht, weiterführende Ergebnisse finden sich in [8][9].
Im ersten Teil dieser Arbeit wurde das Spektrum von H für $q = 0$ analysiert, wobei ausschließlich numerische Methoden Verwendung fanden, da der Hamiltonoperator zwar integrabel ist [10][11], wegen des fehlenden Referenzzustandes jedoch kein Bethe-Ansatz konstruiert werden konnte. Die kleinste Energielücke E_G ist durch $E_G \sim \tau^{-1}$ mit der zeitlichen Korrelationslänge τ verknüpft [12]. Die Extrapolation von E_G für Kettenlängen $2 \leq L \leq 18$ ergibt, daß τ in den "massiven" Phasen endlich bleibt und in den "masselosen" Bereichen algebraisch divergiert. Das oberflächeninduzierte Phasendiagramm des stationären Zustandes reflektiert sich also im Spektrum des Hamiltonoperators und damit in der Dynamik des Systems.

Obiger Hamiltonoperator ist aber noch anderweitig von Interesse. Es handelt sich dabei um eine asymmetrische XXZ-Kette mit zusätzlichen Randtermen. Die asymmetrische XXZ-Kette wird durch den Hamiltonoperator

$$H(\Delta, h) = -\sum_{j=1}^{N} e^{2h}\sigma_j^+\sigma_{j+1}^- + e^{-2h}\sigma_j^-\sigma_{j+1}^+ + \Delta\sigma_j^z\sigma_{j+1}^z \tag{1.4}$$

definiert, der auch als logarithmische Ableitung der Transfermatrix des zweidimensionalen asymmetrischen 6-Vertex Modells zur Beschreibung ferroelektrischer Systeme betrachtet werden kann [13]-[16]. Die asymmetrische Kette $H(\Delta, h)$ läßt sich immer durch eine Ähnlichkeitstransformation auf eine symmetrische Kette $H(\Delta, 0)$ abbilden. Sowohl periodische Randbedingungen als auch die Randbedingungen aus (1.3) werden dabei auf explizit längenabhängige Randbedingungen bei der symmetrischen Kette abgebildet, während die offene asymmetrische Kette (ohne weitere Randterme) unmittelbar auf die offene symmetrische Kette abgebildet wird.
Bei der Beschreibung makroskopischer Systeme im thermodynamischen Gleichgewicht ist das Verhalten der Systeme an kritischen Punkten und das Verständniss von Phasenübergängen von besonderem Interesse. Den wohl größten Fortschritt in dieser Richtung stellt das Konzept der konformen Invarianz kritischer, isotroper Systeme mit kurzreichweitiger Wechselwirkung dar, das heißt Invarianz unter allen Transformationen, die die Winkel zwischen je zwei beliebigen Vektoren unverändert lassen.
Dies hat vor allem für die Theorie zweidimensionaler Systeme weitreichende Bedeutung. In diesem Fall ist die mit der Gruppe der konformen Transformationen verknüpfte Algebra der Erzeugenden unendlichdimensional. Darstellungstheoretische Methoden erlauben hier eine Klassifizierung kritischer Punkte. Das Verhalten der n-Punktfunktionen ist bei konformer Invarianz festgelegt, und die kritischen Exponenten des Systems können aus dem Spektrum der Transfermatrix bzw. des Hamiltonoperators bestimmt werden. Hier sei besonders auf die grundlegende Arbeit von Belavin, Polyakov und Zamolodchikov [17] und die Arbeiten von Cardy [18]-[21] verwiesen.
In der Regel läßt sich die konforme Invarianz eines Modells nicht direkt nachweisen.

Es können deshalb nur die Konsequenzen einer angenommenen konformen Invarianz verifiziert werden. Dazu können analytische, wie auch numerische Methoden verwendet werden. Man ist insbesondere an der Zustandssumme $\mathcal{Z}$ des Systems interessiert. Sie wird für periodische Randbedingungen durch

$$\mathcal{Z} = \lim_{N\to\infty} \operatorname{tr} z^{\frac{N}{2\pi\xi}(H - e_\infty N)} \tag{1.5}$$

definiert und für offene Randbedingungen durch

$$\mathcal{Z} = \lim_{N\to\infty} \operatorname{tr} z^{\frac{N}{\pi\xi}(H - f_\infty - e_\infty N)} \quad . \tag{1.6}$$

Dabei kann ξ als Normierungskonstante betrachtet werden.
Das Spektrum der symmetrischen XXZ-Kette wurde in diesem Zusammenhang für verschiedene (nicht längenabhängige) Randbedingungen untersucht [23]-[29], wobei sowohl numerische als auch analytische Methoden (Bethe-Ansatz) Anwendung fanden. Für $-1 \leq \Delta < 1$ ist das Spektrum masselos und wird durch eine Darstellung der Virasoro Algebra mit zentraler Ladung $c = 1$ bestimmt. Das Spektrum reproduziert für periodische Randbedingungen genau die Skalendimensionen eines Coulombgases (siehe z.B. [30]) mit magnetischen Ladungen m und elektrischen Ladungen n oder einer Gaußschen Feldtheorie mit Kompaktifizierungsradius R (siehe z.B. [31]). Die elektrischen Ladungen n entsprechen den möglichen Eigenwerten des Gesamtspins der Kette. Die Zustandssumme hat hier bei geeigneter Normierung $\xi(\Delta)$ die Form

$$\mathcal{Z} = z^{-\frac{1}{12}} \sum_{m\in Z, n\in\frac{Z}{2}} z^{\frac{1}{2}\left(\frac{n^2}{R^2} + R^2 m^2\right)} \Pi_V^2(z) \tag{1.7}$$

mit

$$\Pi_V(z) = \prod_{i=1}^{\infty} (1 - z^i)^{-1} \quad . \tag{1.8}$$

Hier ist m ganzzahlig für gerade und ungerade Kettenlängen. Wählt man jedoch die Randbedingung $\sigma_{N+1}^{\pm} = (-1)^N \sigma_1^{\pm}$ erhält man ganzzahlige m für gerade Kettenlängen und halbzahlige m bei einer ungeraden Anzahl von Gitterplätzen. Diese Randbedingung erhält man, wenn man $-H(\Delta)$ mit periodischen Randbedingungen durch eine Ähnlichkeitstransformation auf $H(-\Delta)$ abbildet.
Das Spektrum der offenen Kette ohne weitere Randterme ergibt die Skalendimensionen eines Coulombgases nur mit elektrischen Ladungen und die Zustandssumme

$$\mathcal{Z} = z^{-\frac{1}{24}} \sum_{n\in\frac{Z}{2}} z^{\frac{n^2}{R^2}} \Pi_V(z) \quad . \tag{1.9}$$

Hier spielt es keine Rolle, ob man die symmetrische oder asymmetrische Kette betrachtet, da beide Ketten ähnlich zueinander sind.
Das Spektrum der periodischen asymmetrischen XXZ-Kette wurde ebenfalls im Hinblick auf konforme Invarianz studiert . Es weist auch für $\Delta < -1$ eine masselose Phase auf [32]. Die Zustandssumme in dieser Phase wurde von Noh und Kim mit Bethe Ansatz berechnet [8]:

$$\mathcal{Z} = z^{-\frac{1}{12}} \sum_{m\in Z, n\in\frac{Z}{2}} z^{\frac{1}{2}\left(\frac{n^2}{R^2} + R^2 (m + iNy)^2\right)} \Pi_V^2(z) \quad . \tag{1.10}$$

Dies ist die modifizierte Zustandssumme eines Coulombgases. Die N-Abhängigkeit des Ausdrucks läßt sich jedoch nicht mit konformer Invarianz erklären, obwohl die anderen Eigenschaften des Spektrums konsistent mit der Erwartung für eine Theorie mit $c = 1$ sind.

Über den Einfluß der in dieser Arbeit betrachteten Randbedingungen war bisher noch nichts bekannt. Die neu gewonnenen Ergebnisse basieren auf der numerischen Bestimmung der unteren Energieeigenwerte des Hamiltonoperators $-H$ für Ketten mit bis zu 21 Gitterplätzen, wobei $-H$ einer antiferromagnetischen XXZ-Kette mit $\Delta < -1$ entspricht.

Da der Hamiltonoperator auch im günstigsten Fall nur eine CP-Symmetrie aufweist und zudem nichthermitesch ist, erforderte dies einen hohen Aufwand an Rechenkapazität und die Verwendung komplexer Algorithmen, die in der benutzten Form im Rahmen dieser Arbeit erstmals zur Berechnung der Spektren von Quantenspinketten verwendet wurden. Dabei handelt es sich um Modifikationen des Arnoldiverfahrens [33]-[35], welches schon von [36] zur Analyse des Spektrums des chiralen $Z(N)$-symmetrischen Potts Modells verwendet wurde.
Die Analyse der Spektren führt für $p > q$ und $\alpha, \beta > 0$ auf die folgende Zustandssumme:

$$\mathcal{Z} = z^{-\frac{1}{24}} \sum_{m \in \frac{\mathbb{Z}}{2}} z^{R^2(m+i(x+Ny))^2} \Pi_V(z) \tag{1.11}$$

Dabei ist $x = x(\frac{q}{p}, \frac{\alpha}{p}, \frac{\beta}{p})$ und $y = y(\frac{q}{p})$. Der Vergleich mit der Zustandsumme der periodischen asymmetrischen XXZ-Kette zeigt, daß die Randbedingungen zu einem Coulombgas nur mit magnetischen Ladungen führen. Hier ist m halbzahlig für gerade Kettenlängen und ganzzahlig für eine ungerade Anzahl von Gitterplätzen. Der von y unabhängige Teil im Skalenverhalten der Energien wird durch nichtunitäre Darstellungen der $U(1)$ Kac-Moody Algebra beschrieben. Für $q = 0$ stimmt y mit dem normierten Wert aus [7] für das periodische System überein. Gleiches gilt für den Kompaktifizierungsradius R, während der Parameter x durch die Randbedingungen erzeugt wird. Diese Ergebnisse können mit einem fermionisierbaren Spielzeugmodell analytisch reproduziert werden. Für $\alpha\beta = 0$ ist das Spektrum massiv.
Nichtunitäre Realisierungen konformer Invarianz findet man schon bei der Lee-Yang Singularität [37]-[39], der $U_Q SU(2)$-invarianten XXZ-Kette [40] oder im Blume-Capel Modell mit imaginärem Feld [41].
Diese Diplomarbeit ist wie folgt gegliedert. Der erste Teil befaßt sich mit dem Modell zur asymmetrischen Diffusion mit offenen Rändern. Dazu wird zunächst die Mastergleichung für allgemeine Reaktions-Diffusionsmodelle eingeführt und die Abbildung auf eine Quantenkette erläutert. Danach wird das Modell definiert und Eigenschaften des resultierenden Hamiltonoperators werden diskutiert. Im Anschluß wird das Phasendiagramm für den stationären Zustand des total asymmetrischen Systems und das Verhalten der Konzentrationsprofile angegeben. Am Ende des ersten Teils werden die aus den Spektren neu gewonnenen Ergebnisse diskutiert und mit den stationären Eigenschaften verglichen. Da keine Standardverfahren zur Diagonalisierung verwendet werden konnten, widmet sich der zweite Teil der Arbeit einer Erläuterung der benutzten numerischen Methoden. Im dritten Teil wird der in Teil eins eingeführte Hamiltonoperator im antiferromagnetischen Bereich betrachtet, dabei geht der Zusammenhang zu einem stochastischen Prozess verloren. Zu Beginn werden hier zusammenfassend die Vorhersagen für das *finite-size-scaling*-Verhalten der Eigenwerte eines Hamiltonoperators dargelegt, die sich aus der Annahme konformer Invarianz ergeben. Im Anschluß finden sich Resultate zur Darstellungstheorie der Virasoro Algebra für $c = 1$. Am Ende dieses Teils wird die Analyse der numerischen Daten für $p > q$ und $\alpha, \beta > 0$ beschrieben, die zu (1.11) führt. Im vierten Teil der Arbeit wird ein vereinfachtes "Spielzeugmodell" eingeführt. Dieses Modell kann fermionisiert werden und reproduziert genau die charakteristischen Eigenschaften des

Hamiltonoperators im antiferromagnetischen Bereich. Hier werden sowohl periodische, als auch nichthermitesche Randbedingungen betrachtet. Am Schluß findet sich eine Zusammenfassung der gewonnenen Ergebnisse und eine Zusammenstellung offener und neuer Fragen. Darauf folgen Tabellen mit numerischen Daten zum ersten und dritten Teil. Die Ergebnisse dieser Arbeit werden in [42] veröffentlicht.

2. Reaktions-Diffusionsmodell mit oberflächeninduzierten Phasenübergängen

In diesem Kapitel werden zunächst die grundlegenden Begriffe zur Beschreibung eindimensionaler, stochastischer Modelle auf dem Gitter eingeführt. Im folgenden Abschnitt wird das in dieser Arbeit untersuchte Modell definiert und einige bekannte Eigenschaften werden dargestellt.
Das Verhalten der untersten Energielücke im Spektrum des zugehörigen nichthermiteschen Hamiltonoperators wurde numerisch untersucht. Die gewonnenen Ergebnisse werden dann am Ende dieses Kapitels diskutiert.

2.1. Reaktions-Diffusionsmodelle

2.1.1. Mastergleichung

Zur Definiton des Modells betrachtet man ein Kette mit N Gitterplätzen. Auf jedem Gitterplatz k definiert man nun eine Variable β_k, die n verschiedene Werte $\beta_k = 0, 1, ..., n-1$ annehmen kann. Dabei spricht man von einem $n-$Zustands-Modell. Der Wert $\beta_k = 0$ wird hier mit dem Vakuum identifiziert, während $\beta_k = j$ einem Teilchen der Sorte j auf dem k-ten Gitterplatz entspricht. Ein Satz von Variablen $\{\beta\} = (\beta_1, \beta_2, ..., \beta_N)$ wird als Konfiguration des Systems betrachtet. Als Zustand des Systems zur Zeit t wird die Wahrscheinlichkeitsverteilung $P(\{\beta\}, t)$ bezeichnet.
Die Zeitentwicklung des Systems wird festgelegt durch die Zeitentwicklung der Wahrscheinlichkeitsverteilung. Diese wird beschrieben durch die Mastergleichung

$$\frac{\partial P(\{\beta\},t)}{\partial t} = \sum_{k=1}^{N-1} \Bigg[-V(\beta_k, \beta_{k+1}) P(\beta_1, ..., \beta_N, t) \quad + \\ \sum_{\gamma_k,\gamma_{k+1}=0}^{n-1}{}' \; \Gamma^{\gamma_k \gamma_{k+1}}_{\beta_k \beta_{k+1}} P(\beta_1, ..., \beta_{k-1}, \gamma_k, \gamma_{k+1}, \beta_{k+2}, ..., \beta_N, t) \Bigg] . \quad (2.1)$$

Der Strich an der zweiten Summe zeigt an, daß nicht über Paare $\gamma_k = \beta_k$, $\gamma_{k+1} = \beta_{k+1}$ summiert werden soll. Diese Form der Zeitentwicklung enthält nur Wechselwirkungen zwischen nächsten Nachbarn. $\Gamma^{\gamma_k \gamma_{k+1}}_{\beta_k \beta_{k+1}}$ entspricht dabei der Wahrscheinlichkeit pro Zeiteinheit von der Konfiguration (γ_k, γ_{k+1}) auf benachbarten Gitterplätzen in die Konfiguration (β_k, β_{k+1}) überzugehen. $V(\beta_k, \beta_{k+1})$ repräsentiert die Wahrscheinlichkeit pro Zeiteinheit dafür, daß das System von der Konfiguration (β_k, β_{k+1}) in irgendeine andere Konfiguration auf diesen beiden Gitterplätzen übergeht. Der erste Term in (2.1) beschreibt also all diejenigen Prozesse, die die Wahrscheinlichkeit $P(\{\beta\}, t)$ verringern, das System in der Konfiguration $\{\beta\}$ zu finden, während der zweite Term diejenigen Prozesse beschreibt, die $P(\{\beta\}, t)$ erhöhen.
Die Wahrscheinlichkeitserhaltung

$$\frac{\partial}{\partial t} \sum_{\{\beta\}} P(\{\beta\}, t) = 0 \qquad (2.2)$$

impliziert

$$V(\gamma_k, \gamma_{k+1}) = \sum_{\beta_k, \beta_{k+1}=0}^{n-1}{}' \; \Gamma^{\gamma_k \gamma_{k+1}}_{\beta_k \beta_{k+1}} \quad . \tag{2.3}$$

In obiger Form beschreibt die Mastergleichung ein offenes System ohne spezielle Randbedingungen. Diese können durch eine explizite Abhängigkeit der Raten $\Gamma^{\gamma_k \gamma_{k+1}}_{\beta_k \beta_{k+1}}$ von dem Gitterplatzpaar $(k, k+1)$ eingeführt werden. Dazu muß in allen Gleichungen nur die Ersetzung

$$\Gamma^{\gamma_k \gamma_{k+1}}_{\beta_k \beta_{k+1}} \rightarrow \Gamma^{\gamma_k \gamma_{k+1}}_{\beta_k \beta_{k+1}}(k) \quad , \quad V(\gamma_k, \gamma_{k+1}) \rightarrow V(\gamma_k, \gamma_{k+1})(k) \tag{2.4}$$

durchgeführt werden.

2.1.2. Abbildung auf Quantenketten

Die Linearität der Mastergleichung ermöglicht die Beschreibung der durch sie definierten Modelle auf einem Vektorraum[1]. Dazu ordnet man jeder Konfiguration $\{\beta\}$ einen Basisvektor $\mid \{\beta\}\rangle$ zu und fordert die Orthogonalitätsrelation

$$\langle\{\beta\} \mid \{\beta'\}\rangle = \delta_{\{\beta\},\{\beta'\}} \quad . \tag{2.5}$$

Der Zustand des Systems wird nun dargestellt durch den Vektor

$$\mid P(t)\rangle = \sum_{\{\beta\}} P(\{\beta\}, t) \mid \{\beta\}\rangle \quad . \tag{2.6}$$

Die Zeitentwicklung des Systems wird hier durch eine euklidische Schrödingergleichung beschrieben:

$$\frac{\partial}{\partial t} \mid P(t)\rangle = -H \mid P(t)\rangle \quad . \tag{2.7}$$

Diese Gleichung hat die formale Lösung

$$\mid P(t)\rangle = e^{-Ht} \mid P(0)\rangle \quad . \tag{2.8}$$

Die Form des im allgemeinen nichthermiteschen Hamiltonoperators ergibt sich aus der Mastergleichung:

$$H = \sum_{k=1}^{N-1} H_k \quad , \quad H_k = - \sum_{\alpha,\beta,\gamma,\delta=0}^{n-1} T^{\alpha\beta}_{\gamma\delta} E^{\gamma\alpha}_k E^{\delta\beta}_{k+1} \quad , \tag{2.9}$$

wobei

$$T^{\alpha\beta}_{\gamma\delta} = \Gamma^{\alpha\beta}_{\gamma\delta} \quad \forall \alpha \neq \gamma, \beta \neq \delta \quad , \tag{2.10}$$

$$T^{\alpha\beta}_{\alpha\beta} = -V(\alpha, \beta) \quad . \tag{2.11}$$

Die $E^{\alpha\beta}_k$ werden durch die $n \times n$-Matrizen $E^{\alpha\beta}$ mit $(E^{\alpha\beta})_{\gamma\delta} = \delta_{\alpha\gamma}\delta_{\beta\delta}$ definiert :

$$E^{\alpha\beta}_k = I_1 \otimes \cdots \otimes I_{k-1} \otimes E^{\alpha\beta} \otimes I_{k+1} \otimes \cdots \otimes I_N \quad . \tag{2.12}$$

Aus der Wahrscheinlichkeitserhaltung (2.2) und aus (2.8) folgt

$$\sum_{\{\beta\}} \langle \{\beta\} \mid HP(t) \rangle = 0 \quad . \tag{2.13}$$

Daraus ergibt sich die Existenz eines Linkseigenvektors $\langle 0 \mid$ mit Eigenwert *null*.

$$\langle 0 \mid = \sum_{\{\beta\}} \langle \{\beta\} \mid \quad . \tag{2.14}$$

Demnach gibt es auch immer einen Rechtseigenvektor mit Eigenwert *null*, der wegen (2.8) einen stationären Zustand beschreibt. Für Zweizustandssysteme führt diese Abbildung nun in natürlicher Weise auf Hamiltonoperatoren von Spin-$\frac{1}{2}$ Quantenketten, wobei sich die $E^{\alpha\beta}$ $(\alpha, \beta = 0, 1)$ immer als Linearkombinationen der Paulimatrizen $\sigma^x, \sigma^y, \sigma^z$ und der Einheitsmatrix schreiben lassen.

2.2. Asymmetrische Diffusion mit offenen Rändern

2.2.1. Definition des Modells

Bei diesem Modell handelt es sich um ein Zweizustandsmodell ($n = 1$). Dabei wird $\beta_i = 1$ mit einem Teilchen der Sorte A auf dem $i-$ten Gitterplatz identifiziert, während $\beta_i = 0$ bedeutet, daß der $i-$te Gitterplatz unbesetzt ist. Auf je zwei benachbarten Gitterplätzen werden nun folgende Prozesse zugelassen ($k = 1, ..., N-1$):

$$\begin{array}{lll} \text{Diffusion nach rechts:} & A + 0 \to 0 + A & \text{mit Rate } \Gamma_{01}^{10}(k) = p \\ \text{Diffusion nach links:} & 0 + A \to A + 0 & \text{mit Rate } \Gamma_{10}^{01}(k) = q \end{array} \tag{2.15}$$

Am Rand des Systems werden folgende zusätzliche Prozesse erlaubt:

$$\begin{array}{ll} \text{Injektion am linken Rand:} & \left.\begin{array}{l} 0 + 0 \to A + 0 \\ 0 + A \to A + A \end{array}\right\} \Gamma_{10}^{00}(1) = \Gamma_{11}^{01}(1) = \alpha \\ & \\ \text{Extraktion am rechten Rand:} & \left.\begin{array}{l} A + A \to A + 0 \\ 0 + A \to 0 + 0 \end{array}\right\} \Gamma_{10}^{11}(N-1) = \Gamma_{00}^{01}(N-1) = \beta \end{array} \tag{2.16}$$

Die H_k aus (2.9) erhalten damit folgende explizite Form :

$$H_k = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & q & -p & 0 \\ 0 & -q & p & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \qquad \text{für } k = 2, 3, ..., N-2 \quad . \tag{2.17}$$

Für $k = 1, N-1$ ergeben sich die Matrizen

$$H_1 = \begin{pmatrix} \alpha & 0 & 0 & 0 \\ 0 & q+\alpha & -p & 0 \\ -\alpha & -q & p & 0 \\ 0 & -\alpha & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad , \quad H_{N-1} = \begin{pmatrix} 0 & -\beta & 0 & 0 \\ 0 & q+\beta & -p & 0 \\ 0 & -q & p & -\beta \\ 0 & 0 & 0 & \beta \end{pmatrix} . \tag{2.18}$$

Mit Hilfe der Paulimatrizen läßt sich der Hamiltonoperator für das Modell in folgender Form schreiben:

$$H = -\sum_{j=1}^{N-1}\left[q\sigma_j^- \sigma_{j+1}^+ + p\sigma_j^+\sigma_{j+1}^- + \frac{p+q}{4}(\sigma_j^z\sigma_{j+1}^z - 1) + \frac{q-p}{4}(\sigma_{j+1}^z - \sigma_j^z)\right] + B_1 + B_N \qquad (2.19)$$

Wobei die Randterme gegeben sind durch

$$\begin{aligned} B_1 &= \frac{\alpha}{2}(\sigma_1^z - 2\sigma_1^- + 1) \quad , \\ B_N &= -\frac{\beta}{2}(\sigma_N^z + 2\beta\sigma_N^+ - 1) \quad . \end{aligned} \qquad (2.20)$$

Das Eigenwertspektrum von H ist invariant unter dem Austausch von α und β . Dies entspricht der Ähnlichkeitstransformation $\sigma^\pm \to \sigma^\mp$, $\sigma^z \to -\sigma^z$ bei gleichzeitiger Spiegelung des Systems. Diese Eigenschaft kann dadurch verstanden werden, daß das Modell nicht nur die Diffusion von Teilchen, sondern genauso auch die Diffusion von Löchern in die jeweils andere Richtung beschreibt. Für $\alpha = \beta$ ist der Hamiltonoperator unter dieser Transformation invariant (CP-Symmetrie).
Durch eine Ähnlichkeitstransformation U läßt sich H auf den Hamiltonoperator einer symmetrischen XXZ-Kette mit Randtermen abbilden.

$$U = \prod_{j=1}^{N} U_j \quad , \quad U_j = I_1 \otimes \cdots I_{j-1} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & \Lambda\mathcal{Q}^{j-1}\end{pmatrix} \otimes I_{j+1} \otimes \cdots \otimes I_N \qquad (2.21)$$

Dabei ist $\mathcal{Q} = \sqrt{\frac{q}{p}}$ und Λ ist ein willkürlicher Parameter. Mit $H' = UHU^{-1}$ folgt für den transformierten Operator

$$\begin{aligned} H' = -\frac{\sqrt{pq}}{2}\sum_{j=1}^{N-1}\Bigg[&\sigma_j^x\sigma_{j+1}^x + \sigma_j^y\sigma_{j+1}^y + \frac{\mathcal{Q}+\mathcal{Q}^{-1}}{2}(\sigma_j^z\sigma_{j+1}^z - 1) \\ &+ \frac{\mathcal{Q}-\mathcal{Q}^{-1}}{2}(\sigma_{j+1}^z - \sigma_j^z)\Bigg] + B_1' + B_N' \quad . \end{aligned} \qquad (2.22)$$

Dies ist der $U_\mathcal{Q}SU(2)$-invariante XXZ-Hamiltonoperator [40] mit zusätzlichen Randtermen

$$\begin{aligned} B_1' &= \frac{\alpha}{2}(\sigma_1^z - 2\mathcal{Q}^{\frac{1-N}{2}}\sigma_1^- + 1) \quad , \\ B_N' &= -\frac{\beta}{2}(\sigma_N^z + 2\mathcal{Q}^{\frac{1-N}{2}}\sigma_N^+ - 1) \quad . \end{aligned} \qquad (2.23)$$

Dabei wurde $\Lambda = \mathcal{Q}^{\frac{1-N}{2}}$ gewählt, um die Ausdrücke symmetrisch in Abhänigkeit von $\mathcal{Q}$ zu schreiben.
Obwohl dieser Hamiltonoperator integrabel ist[10, 11], konnte wegen des fehlenden Referenzzustandes noch kein Bethe-Ansatz konstruiert werden.

Abgesehen von den nichthermiteschen Randtermen vertauscht der Hamiltonoperator mit dem Gesmatspin $S^z \equiv \sum_{j=1}^{N} \sigma_j^z$. Ohne die Randterme läßt sich H also auf Blockdiagonalform bringen, wobei die einzelnen Blöcke auf Unterräumen mit festem Gesmatspin S^z operieren. Da die nichthermiteschen Randterme den Gesamtspin um ± 1 ändern, entsprechen ihnen Nebendiagonalblöcke, so daß der Hamiltonoperator in der entsprechenden Basis folgende Form annimmt :

$$H = \begin{pmatrix} * & \alpha & & & & \\ \beta & * & \alpha & & & \\ & \beta & * & \alpha & & \\ & & \cdot & \cdot & \cdot & \\ & & & \cdot & \cdot & \cdot \end{pmatrix} \quad . \tag{2.24}$$

Die Sterne kennzeichnen Blöcke zu fester Spinquantenzahl. Die nichthermiteschen Anteile der Randterme werden nur einen Beitrag zum Spektrum von H liefern, wenn Blöcke oberhalb und unterhalb der Blockdiagonalen erzeugt werden. Dies ist nur der Fall, wenn $\alpha \neq 0$ und $\beta \neq 0$, andernfalls ist das Spektrum gleich dem der $U_Q SU(2)$-invarianten XXZ-Kette und damit massiv.

2.2.2. Phasendiagramm für den Strom

Für asymmetrische Diffusion ($p \neq q$) sind bisher nur Eigenschaften des Systems für den stationären Zustand im Limes $N \to \infty$ bekannt. Hier soll nur ein Teil der Ergebnisse für das total asymmetrische Modell ($q = 0$, o.B.d.A $p = 1$) dargelegt werden. Dabei handelt es sich um das Phasendiagramm für den Strom und das räumliche Profil der Konzentration in Abhängigkeit von den Raten α, β [3][4].
Der Teilchenstrom auf der Verbindung zwischen zwei benachbarten Gitterpunkten im Zustand $\mid P(t)\rangle$ wird definiert durch

$$j_k = \sum_{\{\beta\}} \beta_k (1 - \beta_{k+1}) P(\{\beta\}, t) \quad . \tag{2.25}$$

Führt man Teilchenzahloperatoren n_k gemäß

$$n_k = I_1 \otimes ... \otimes I_{k-1} \otimes \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \otimes I_{k+1} \otimes ... \otimes I_N \tag{2.26}$$

ein, so läßt sich (2.25) schreiben als

$$j_k = \langle 0 \mid n_k (1 - n_{k+1}) \mid P(t) \rangle \quad . \tag{2.27}$$

Im stationären Zustand ist diese Größe unabhängig vom Gitterplatz. Abbildung (1) zeigt das Phasendiagramm für den Strom. Die Ströme für die drei Phasen A, B, C werden für $N \to \infty$ gegeben durch :

$$\begin{aligned} A \quad &: \quad j = \beta(1-\beta) \\ C \quad &: \quad j = \frac{1}{4} \qquad \text{(Phase mit maximalem Strom)} \end{aligned} \tag{2.28}$$

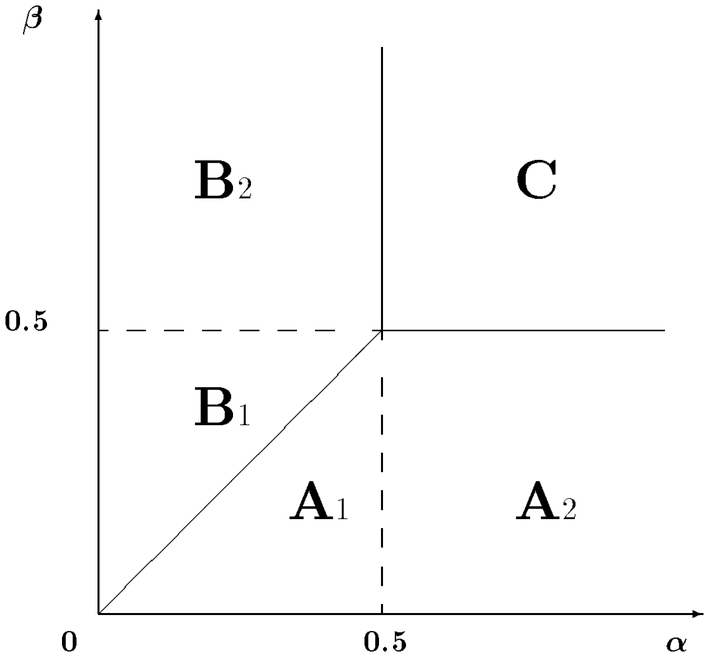

Abbildung 1. Phasendiagramm des total asymmetrischen Diffusionsmodells

$$B \quad : \quad j = \alpha(1-\alpha) \quad .$$

Die Form des Dichteprofils der Konzentration im stationären Zustand für $N \gg i \gg 1$ ist ebenfalls abhängig von der jeweiligen Phase:

$$\begin{aligned}
&A_1 : \langle n_i \rangle = (1-\beta) - (1-2\alpha)\left(\frac{\beta(1-\beta)}{\alpha(1-\alpha)}\right)^i \\
&A_2 : \langle n_i \rangle = (1-\beta) - \frac{4^{i-1}(\beta(1-\beta))^i}{\sqrt{\pi}(i-1)^{\frac{3}{2}}}\left(\frac{1}{(1-2\alpha)^2} - \frac{1}{(1-2\beta)^2}\right) \\
&B_1 : \langle n_{N-i} \rangle = \alpha + (1-2\beta)\left(\frac{\alpha(1-\alpha)}{\beta(1-\beta)}\right)^{i+1} \qquad (2.29) \\
&B_2 : \langle n_{N-i} \rangle = \alpha + \frac{4^i(\alpha(1-\alpha))^{i+1}}{\sqrt{\pi}i^{\frac{3}{2}}}\left(\frac{1}{(1-2\beta)^2} - \frac{1}{(1-2\alpha)^2}\right) \\
&C : \langle n_{N-i} \rangle = \frac{1}{2} - (1-\delta_{\beta,\frac{1}{2}})\frac{1}{2\sqrt{\pi}i^{\frac{1}{2}}}
\end{aligned}$$

Auf der sogenannten Koexistenzlinie ($\alpha = \beta < \frac{1}{2}$) gilt:

$$\langle n_i \rangle = \alpha + \frac{i}{N}(1-2\alpha) \quad , j = \alpha(1-\alpha) \quad . \tag{2.30}$$

Die Eigenschaften dieser Konzentrationsprofile werden im nächsten Abschnitt zusammen mit den Resultaten für das Spektrum diskutiert. Hier sei noch bemerkt, daß für das allgemeine, nicht vollständig asymmetrische Modell ein ähnliches Phasendiagramm existiert[5].

2.3. Numerische Ergebnisse für das total asymmetrische Diffusionsmodell

Um Informationen über das zeitabhängige Verhalten des Systems zu erhalten, wurde die Abhängigkeit der untersten Energielücke E_G von der Kettenlänge für verschiedene α, β untersucht. E_G ist verknüpft mit der zeitlichen Korrelationslänge τ durch

$$\tau^{-1} \sim E_G \quad . \tag{2.31}$$

Es wurden die untersten Eigenwerte für Gitter mit $2 \leq N \leq 18$ numerisch bestimmt und mit dem BST-Algorithmus extrapoliert. Dabei wurden α und β mit Schrittweite 0.1 zwischen 0.1 und 1 variiert. Eine Beschreibung der verwendeten numerischen Methoden befindet sich im folgenden Kapitel dieser Arbeit.
Die Auswertung der Spektren für $N \to \infty$ ergibt folgenden Zusammenhang mit dem Phasendiagramm für den stationären Zustand :

$$\begin{array}{lll} A_1 & : & E_G = m(\alpha,\beta) \\ A_2 & : & E_G = m(\beta) \\ B_1 & : & E_G = m(\alpha,\beta) \\ B_2 & : & E_G = m(\alpha) \\ C & : & E_G \sim N^{-\frac{3}{2}} \\ \alpha = \beta < \dfrac{1}{2} & : & E_G \sim N^{-2} \end{array} \tag{2.32}$$

In den Phasen A_1 und B_1 ist E_G eine Funktion von α und β, während E_G in den Phasen A_2 und B_2 nur von β bzw. α abhängt. In Phase C und auf der Koexistenzlinie ist das System masselos. Dies ist ein Beispiel für oberflächeninduzierte Phasenübergänge. Tabellen mit Extrapolanten für die Energielücken und die Exponenten finden sich im Anhang.
In Phase C und auf der Koexistenzlinie divergiert τ algebraisch, während τ in den Phasen A und B endlich bleibt. Der Vergleich mit (2.29) bzw. (2.30) zeigt, daß dies dem Verhalten der räumlichen Korrelationslänge ξ entspricht. Der Exponent $\frac{3}{2}$ wurde auch in [7] für das total asymmetrische Diffusionsmodell mit periodischen Randbedingungen (keine Injektion und Extraktion) gefunden.
In den Phasen A_2 und B_2 hängt τ nur von β bzw. α ab. Auch diese Eigenschaft findet sich im Verhalten von ξ. Die Zahlenwerte der Korrelationslängen weisen jedoch keine Übereinstimmungen auf. Abweichungen von diesem Verhalten in der Nähe der Trennungslinien zwischen den Phasen A_1 und A_2 bzw. B_1 und B_2 sind ein Indiz für

Crossover-Effekte, deren Auswirkungen sich bei Extrapolation von endlichen Gittern nicht vermeiden lassen.
Warum sich das Verhalten der zeitlichen Entwicklung in dem Phasendiagramm für den stationären Zustand ($\lim t \to \infty$) wiederspiegelt, ist noch unverstanden. Ein Beispiel mit unterschiedlichem Verhalten der zeitlichen und räumlichen Korrelationslänge findet sich in [43].

3. Numerische Methoden

Zur Bestimmung der Eigenwertspektren des Hamiltonoperators für endliche Kettenlängen N wurden in dieser Arbeit ausschließlich numerische Methoden verwendet. Für Kettenlängen $2 \leq N \leq 11$ konnte der Hamiltonoperator vollständig mit dem QR-Verfahren diagonalisiert werden. Für größere Gitter mit $12 \leq N \leq 21$ wurden Projektionsmethoden, ähnlich dem Lanczos-Verfahren für symmetrische Matrizen, benutzt. Die Spektren und *finite-size*-Korrekturen für den Limes $N \to \infty$ wurden daraus durch Extrapolation ermittelt. Dieses Kapitel enthält eine Beschreibung der benutzten Algorithmen.
Alle Rechnungen wurden auf Workstations mit bis zu 120 MB Hauptspeicher durchgeführt. Programmiert wurden die Algorithmen in C mit doppelter Genauigkeit der real-Variablen (16 signifikante Stellen).

3.1. Allgemeine Projektionsmethoden

Bei der Verwendung von Projektionsmethoden [35] wird versucht das ursprüngliche Eigenwertproblem für die Matrix H der Dimension $n \times n$ auf dem Vektorraum $\mathcal{V}$ durch ein Eigenwertproblem auf einem Vektorraum kleinerer Dimension zu approximieren. Diese Verfahren sind deshalb besonders interresant zur Bestimmung von Eigenwerten großer Matrizen .
Zunächst einmal betrachtet man zwei Unterräume $\mathcal{U}, \mathcal{W} \subseteq \mathcal{V}$. Als approximative Lösung des Eigenwertproblems betrachtet werden $u \in \mathcal{U}$ und $\lambda \in \mathbb{C}$, welche die Petrov-Galerkin Bedingung erfüllen :

$$\langle (H - \lambda)u \mid w \rangle = 0 \qquad \forall w \in \mathcal{W}. \tag{3.1}$$

Ferner seinen zwei biorthogonale Basen von $\mathcal{U}$ und $\mathcal{W}$ gegeben, deren Basisvektoren in der Basis von $\mathcal{V}$ die Matrizen U und W bilden, d.h.

$$W^\dagger U = \mathbb{1} \quad . \tag{3.2}$$

Sei nun $u = Ux$, dann ergibt obige Bedingung

$$\langle (H - \lambda)Ux \mid w \rangle = 0 \qquad \forall w \in \mathcal{W}.$$

$$\Rightarrow \qquad (W^\dagger H U)x = \lambda x \quad . \tag{3.3}$$

Damit wurde das ursprüngliche Problem durch ein Problem mit kleinerer Dimension im Sinne obiger Bedingung approximiert.
Die in den folgenden Unterabschnitten beschriebenen Verfahren stellen Spezialfälle dieser allgemeinen Projektionsverfahren dar, die sich in der Praxis zur Bestimmung extremaler Eigenwerte großer, dünn besetzter Matrizen bewährt haben.

3.1.1. Arnoldi-Verfahren

Das Arnoldiverfahren [35, 33, 34] ist ein Spezialfall des allgemeinen Projektionsverfahrens auf einen Krylov-Unterraum $\mathcal{U} = \mathcal{W} = \mathrm{span}\{v, Hv, H^2v, ..., H^{m-1}v\}$ mit $v \in \mathcal{V}$

beliebig. Das Arnoldiverfahren besteht darin, ausgehend von $v_1 \equiv \frac{v}{\|v\|}$ rekursiv eine Orthonormalbasis von $\mathcal{U}$ zu konstruieren, bestehend aus Vektoren $v_1, v_2, ..., v_m$:

$$a_{j+1,j} v_{j+1} = w = H v_j - \sum_{i=1}^{j} a_{ij} v_i \ , \tag{3.4}$$

$$\text{mit } a_{ij} = \langle H v_j \mid v_i \rangle \quad \forall i \leq j, \ a_{j+1,j} = \|w\| \ .$$

Der Algorithmus bricht ab, wenn ein $a_{i+1,i} = 0$. Aus (3.4) ergibt sich unmittelbar

$$H V_m = V_m A_m + a_{m+1,m} v_{m+1} e_m^\dagger \quad . \tag{3.5}$$

Die aus den Spaltenvektoren $v_1, v_2, ..., v_m$ bestehende Matrix V_m transformiert H auf obere Hessenbergform,

$$A_m = V_m^\dagger H V_m$$

$$(A_m)_{ij} = \langle v_i \mid H v_j \rangle = \langle v_i \mid \sum_{k=1}^{j+1} a_{kj} v_k \rangle = \begin{cases} 0 & , i > j+1 \\ a_{j+1,j} & , i = j+1 \\ a_{ij} & , i < j+1 \end{cases} \ .$$

Bei diesem Verfahren handelt es sich im wesentlichen um das Gram-Schmidt-Orthogonalisierungsverfahren. Dieses Verfahren ist jedoch numerisch instabil, falls die zu orthogonalisierenden Vektoren fast linear abhänig sind. Aus diesem Grunde führt man in der Praxis eine "Nachorthogonalisierung" durch [54].
Für $H = H^\dagger$ reduziert sich die Prozedur auf das schon lange bekannte Lanczos-Verfahren zur Tridiagonalisierung hermitescher Matrizen [56].
Die Eigenwerte und -vektoren von A_m können nun durch Standardverfahren (QR-Verfahren und inverse Iteration) mit hoher Genauigkeit bestimmt werden. Sei x ein Eigenvektor zum Eigenwert λ von A_m, dann erhält man aus $y = V_m x$ einen approximativen Eigenvektor zu H, der die Bedingung (3.1) erfüllt. Mit (3.5) folgt für die Restnorm

$$\|(H - \lambda I) y\| = a_{m+1,m} \mid e_m^\dagger x \mid \quad . \tag{3.6}$$

Für $a_{m+1,m} = 0$ sind alle Eigenwerte und -vektoren exakt . Die Genauigkeit der Eigenwerte hängt im allgemeinen von den Dimensionen m und n ab.
Um auch für kleine m noch eine zufriedenstellende Genauigkeit zu erhalten, läßt sich das Verfahren iterativ durchführen. Dazu wiederholt man die Prozedur mit einem neuen Startvektor, der als Linearkombination der approximativen Eigenvektoren gewählt wird.

Eine andere, weitaus effizientere Möglichkeit zur Bestimmung vieler Eigenwerte und -vektoren von H besteht darin diese sukzessive zu berechnen. Diese Methode führt eine Projektion auf den Unterraum $\mathcal{U} = \mathcal{W} = \text{span}\{v_1, v_2, ..., v_k, H v_k, H^2 v_v, ..., H^{m-k} v_k\}$ durch.
Die Vektoren $v_1, ..., v_{k-1}$ seien bereits bestimmte Schurvektoren der Matrix H, d.h. V_{k-1} transformiert H auf eine $(k-1) \times (k-1)$ Matrix mit oberer Dreiecksform (man erhält Schurvektoren einer Matrix durch Anwendung des Gram-Schmidt-Orthogonalisierungsverfahrens auf die Eigenvektoren).

Zur Bestimmung des nächsten Schurvektors wird das Arnoldiverfahren iterativ durchgeführt. Dabei wählt man zunächst einen Startvektor v_k , so daß die Menge $\{v_1, ..., v_k\}$ einen Satz orthonormaler Vektoren bildet. Dann wird gemäß (3.4) verfahren und man erhält eine Matrix A_m der Form

$$A_m = \begin{pmatrix} * & * & * & * & * & * \\ & * & * & * & * & * \\ & & * & * & * & * \\ & & * & * & * & * \\ & & & * & * & * \\ & & & & * & * \end{pmatrix} \qquad \text{für } k = 3, m = 6.$$

Das Verfahren wird mit einem neuen Startvektor $v_k = V_m x$ wiederholt, solange bis die Restnorm eine festgesetzte Schwelle unterschreitet. Dabei bezeichnet x den Eigenvektor zum größten Eigenwert des Hessenbergblocks von A_m .
Für reelle H läßt sich das Verfahren mit kleineren Modifikationen weitestgehend unter Vermeidung komplexer Arithmetik durchführen. Auf der Diagonalen der oberen Dreiecksmatrix treten dann, korrespondierend zu den komplexen Eigenwerten, 2×2 Blöcke auf. Es ergibt sich folgender Algorithmus:

(i) Wähle einen reellen normierten Startvektor v_1 , setze $k = 1, m = 0$.

(ii) $m = m + 10$.

(iii) Für $j = k, k + 1, ..., m$ (Arnoldi) :

- (a) Berechne $w = H^\mu v_j$.
- (b) Berechne Koeffizienten a_{ij} , so daß $w = w - \sum_{i=1}^{j} a_{ij} v_i$ orthogonal zu allen vorhergehenden v_i , $i < j$ ist.
- (c) $a_{j+1,j} = \|w\|, v_{j+1} = w/a_{j+1,j}$.

(iv) Bestimme approximativen Eigenwert λ^μ mit dazugehörigem Eigenvektor x.

(v) Bestimme $y = V_m x$ und $\lambda = \langle y \mid Hy \rangle$ und daraus die Restnorm ρ, $z = \mathrm{Re}(y)$.

(vi) Falls ρ zu groß , bestimme $z = H^\nu z$ (Vektoriteration).

(vii) Orthonormiere z auf alle v_i mit $i < k$ und nenne das Ergebnis v_k.

(viii) Falls ρ zu groß , zurück zu (ii).

(ix) Sonst

- (a) $a_{ik} = \langle v_i \mid H^\mu v_k \rangle$, $\forall i < k$.
- (b) Falls $\lambda \in \mathbb{C}$
  1. Orthonormiere $\mathrm{Im}(y)$ auf alle v_i mit $i \leq k$ und nenne das Ergebnis v_{k+1}.
  2. $a_{i,k+1} = \langle v_i \mid H^\mu v_{k+1} \rangle$, $\forall i \leq k$.
  3. $a_{k+1,k} = \langle v_k \mid v_{k+1} \rangle$.
- (c) Falls $k = 1$ setze $H = H - \frac{\mathrm{Re}(\lambda)}{4} \mathbb{1}$.

(d) Falls $\lambda \in \mathbb{C}$ setze $k = k + 2$, sonst setze $k = k + 1$.
(e) Wähle v_k orthonormal auf v_i , $\forall i < k$.
(f) $m = k$ und zurück zu (ii).

In dieser Form enthält der Algorithmus noch drei weitere Modifikationen, die sich in der Praxis als äußert wichtig für die Bestimmung möglichst vieler Eigenwerte herausgestellt haben. Der Einfluß dieser Modifikationen soll hier kurz diskutiert werden.
Zunächst wird das Verfahren mit H^μ durchgeführt, wobei in der Praxis $3 \leq \mu \leq 20$ gewählt wurde. Das hat eine bessere betragsmäßige Trennung der Eigenwerte zur Folge und führt zu besserer und schnellerer Konvergenz. Dies wird ebenfalls durch *shiften* (ix.c) der Matrix H erreicht. Unter Verbesserung der Konvergenz ist hier eine Verminderung des minimal erreichbaren Wertes der Restnorm ρ für festes λ zu verstehen.
Als weiteres werden die Realteile der approximativen Eigenvektoren einer Vektoriteration (vi) unterzogen, bevor der nächste Arnoldischritt durchgeführt wird. Die Wahl des Wertes ν erfolgte in Abhänigkeit von $\mid \lambda/\lambda_{max} \mid$ und lag im Bereich $\nu \leq 100$. Dies resultierte ebenfalls in einer Beschleunigung und Verbesserung der Konvergenz.
Für große m ist die Zahl der wesentlichen Operationen des Arnoldischritts (iii) proportional zu $n(m^2 - k^2)$, wobei n =dim $\mathcal{V}$. Aus diesem Grunde wird m zu Beginn nicht auf den maximal möglichen Wert gesetzt, sondern erst bei nicht ausreichender Genauigkeit schrittweise erhöht (ii). Die Anzahl benötigter Iterationen zur Ermittelung einer bestimmten Menge von Eigenwerten steigt dadurch zwar, aber die benötigte CPU-Zeit zur Berechnung vor allem der ersten Werte wird deutlich verringert.
Zur Restnorm ρ sei noch gesagt, daß ihre Bestimmung gemäß der linken Seite von (3.6) um mehrere Größenordnungen nach oben von der anhand der rechten Seite von (3.6) abweichen kann. Für kleine Gitter ($N < 13$) stimmen die Werte in der Größenordnung überein, solange $\rho_{LHS} > 10^{-14}$. Für diese Kettenlängen stellt ρ_{RHS} also bis zu einer Grenze von ca. 10^{-14} ein zuverlässiges Maß für die Güte der Eigenwerte dar. (Während ρ_{LHS} bedingt durch die Rechengenauigkeit bei der Ermittelung von Eigenwert und -vektor keine Werte kleiner als 10^{-16} annehmen kann , wird ρ_{RHS} unter Umständen beliebig klein ($< 10^{-100}$).) Für größere Ketten zeigte sich, daß dies nicht mehr der Fall ist, sobald höhere Anregungen bestimmt werden sollen. In der Praxis wurde deshalb ρ_{LHS} zur Festellung von Konvergenz herangezogen.

Mit dieser Version des Algorithmus wurden die untersten angeregten Energieniveaus für Kettenlängen $12 \leq N \leq 20$ berechnet. Dabei konnten für 20 Gitterplätze mit *CP*-Symmetrie noch 18 Eigenwerte mit $\rho/\lambda < 10^{-13}$ bestimmt werden. Limitiert wurde die Anzahl der ermittelbaren Eigenwerte bei diesen Gitterlängen allein durch die Größe des zur Verfügung stehenden Hauptspeichers und der zur Verfügung stehenden CPU-Zeit auf den benutzten Rechnern .
Die Berechnung vieler Eigenwerte war nötig zur Bestimmung möglichst vieler höherliegender Anregungen im Spektrum. Die Rechnungen z.B. für $N = 20$ mit *CP*-Symmetrie bei einer Dimension des Vektorraumes von ca. 500 000 benötigten dabei ca. 7 Tage CPU-Zeit. Basen für die $CP-$Eigenräume ergeben sich folgendermaßen aus der kanonischen Basis des $(\mathbb{C}^2)^{\otimes N}$:

$$CP \pm 1 : \quad e = e_{i_1} \otimes \cdots \otimes e_{i_N} \pm e_{i'_N} \otimes \cdots \otimes e_{i'_1} \tag{3.7}$$

$$i_j = 0,1 \qquad i'_j = \begin{cases} 0 \text{ für } i_j = 1 \\ 1 \text{ für } i_j = 0 \end{cases}$$

Auf diese Weise erhält man Unterräume der Dimension $dim_{\pm 1} = \frac{2^N}{2}$ für N ungerade und $dim_{\pm 1} = \frac{2^N \pm 2^{N/2}}{2}$ für N gerade.

3.1.2. Lanczos-Verfahren für nichthermitesche Matrizen

Beim Lanczos-Verfahren für nichthermitesche Matrizen [35] handelt es sich um eine allgemeine Projektionsmethode mit $\mathcal{U}$ =span$\{u, Hu, ..., H^{m-1}u\}$ und $\mathcal{W}$ =span$\{w, H^\dagger w, ..., (H^\dagger)^{m-1}w\}$. Das Verfahren führt, wie auch das Lanczos-Verfahren für symmetrische Matrizen, eine Transformation von H auf Tridiagonalgestalt T_m durch. Es hat gegenüber dem Arnoldiverfahren den Vorteil, daß die Zahl der im Speicher gehaltenen Vektoren unabhängig von m ist, und daß die Zahl der wesentlichen Operationen für große n nur linear mit m wächst. Es laßt sich ebenfalls iterativ durchführen.
Um das Verfahren suksessive durchzuführen, müßten jedoch auch hier zusätzliche Vektoren gespeichert werden und zwar doppelt so viele wie beim Arnoldi-Verfahren.
Von weiterem Nachteil ist, daß bei wachsendem m die Biorthogonalität der konstruierten Basisvektoren zu $\mathcal{U}$ und $\mathcal{W}$ verloren geht, was eine schlechtere Konvergenz zur Folge hat. Zudem wurde, wie auch schon in [35] bemerkt, festgestellt, daß T_m Entartungen im Spektrum aufweist, die im Spektrum von H gar nicht vorhanden sind.
Der Algorithmus wurde aus diesen Gründen letztendlich nur zur Bestimmung der vier untersten Energieniveaus für $N = 21$ benutzt (in iterativer Form). Eine Beschreibung findet sich zum Beispiel in [35].

3.2. Extrapolation von endlichen Gittern

Zur Bestimmung des Energiespektrums im thermodynamischen Limes $N \to \infty$ und der *finite-size*-Korrekturen wurden die mit den oben beschriebenen Methoden bestimmten Eigenwerte extrapoliert.
Anwendung fand dabei ausschließlich der von Burlisch und Stoer eingeführte *BST*-Algorithmus [57] , da dieser anderen Algorithmen zur Extrapolation überlegen ist [58, 59]. Dies betrifft sowohl die Genauigkeit der Ergebnisse, als auch die Zahl der benötigten Anfangswerte. Das ist hier zur Analyse höherliegender Anregungen im Spektrum von besonderer Bedeutung. Der Algorithmus soll im folgenden kurz beschrieben werden.
Gegeben seien k Werte einer Folge $T(h_N)$ mit $\lim_{N\to 0} h_N = 0$, z.B. $h_N = 1/N$. Der Algorithmus bestimmt den Wert $\lim_{N\to\infty} T(h_N)$ ausgehend von einer Entwicklung

$$T(h) = T + a_1 h^\omega + a_2 h^{2\omega} + \ ... \qquad . \tag{3.8}$$

$T(h)$ wird also durch eine Folge ganzrationaler Funktionen in der Variable h^ω approximiert. Zur Ermittelung von T wird rekursiv folgende Tafel von Extrapolanten erstellt:

$$
\begin{array}{ccc}
T_0^0 & & \\
 & T_1^0 & \\
T_0^1 & & T_2^0 \\
 & T_1^1 & \\
T_0^2 & &
\end{array}
$$

Jede Spalte wird dabei aus den beiden vohergehenden durch

$$T_m^N = T_{m-1}^{N+1} + (T_{m-1}^{N+1} - T_{m-1}^N) \left[\left(\frac{h_N}{h_{N+m}} \right)^{\omega} \left(1 - \frac{T_{m-1}^{N+1} - T_{m-1}^N}{T_{m-1}^{N+1} - T_{m-2}^{N+1}} \right) - 1 \right]^{-1} \tag{3.9}$$

ermittelt , wobei

$$T_{-1}^N = 0 \tag{3.10}$$

$$T_0^N = T(h_N) \qquad . \tag{3.11}$$

Von jeder weiteren so ermittelten Spalte erwartet man nun eine bessere Konvergenz gegen den Grenzwert T, als von der Vorhergehenden. Man erhält dann T_k^0 als Schätzwert für T. Da der Exponent des führenden Korrekturterms nicht immer a priori bekannt ist, wird nun der freie Parameter ω derart optimiert, daß die Differenz zwischen den Einträgen der vorletzten Spalte $\tau = \mid T_{k-1}^1 - T_{k-1}^0 \mid$ minimal wird.
Bei Kenntniss des führenden Korrekturterms ist es ratsam ω vorzugeben. Dies kann vor allem für kleine Wertemengen zu anderen Ergebnissen führen. Zur Bewertung der Genauigkeit der erhaltenen Werte läßt sich auch die Konstanz der Extrapolanten bei Variation von ω heranziehen.
Zur Bestimmung der Exponenten der führenden Korrekturen zu den Eigenwerten für das Reaktions-Diffusionsmodell wurde die Folge

$$T(N) = \frac{\ln\left(\frac{E(N)-E_0(N)}{E(N+1)-E_0(N+1)}\right)}{\ln\left(\frac{N}{N+1}\right)} \tag{3.12}$$

extrapoliert.

4. Das Spektrum im antiferromagnetischen Bereich und konforme Invarianz

Wie im ersten Teil der Arbeit gezeigt, ist der Hamiltonoperator (2.19) verknüpft mit der symmetrischen XXZ-Kette mit Anisotropie

$$\Delta \equiv \frac{\mathcal{Q} + \mathcal{Q}^{-1}}{2} \geq 1 \quad . \tag{4.1}$$

Die ferromagnetische Kette ist verknüpft mit dem antiferromagnetischen Modell durch

$$H'_{bulk}(-\Delta) = -T H'_{bulk}(\Delta) T^{-1} \quad . \tag{4.2}$$

Hierbei kennzeichnet H'_{bulk} den Hamiltonoperator ohne die von α und β abhängigen Randterme. T ist eine unitäre Transformation, die einer 180°-Drehung im Raum der $\sigma-$Matrizen um die z-Achse auf jedem zweiten Gitterplatz entspricht.

$$T = \prod_{j=1}^{N} T_j \quad , \quad T_j = I_1 \otimes \cdots I_{j-1} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1^j \end{pmatrix} \otimes I_{j+1} \otimes \cdots \otimes I_N \quad . \tag{4.3}$$

Offensichtlich gilt

$$\left.\begin{array}{l} T\sigma_j^x T^{-1} = -\sigma_j^x \\ T\sigma_j^y T^{-1} = -\sigma_j^y \\ T\sigma_j^z T^{-1} = \sigma_j^z \end{array}\right\} \text{ für j ungerade , } \left.\begin{array}{l} T\sigma_j^x T^{-1} = \sigma_j^x \\ T\sigma_j^y T^{-1} = \sigma_j^y \\ T\sigma_j^z T^{-1} = \sigma_j^z \end{array}\right\} \text{ für j gerade.} \tag{4.4}$$

Damit ist $-H'$ aus (2.22) ähnlich zu der antiferromagnetischen Kette

$$\begin{aligned} H'' = -\frac{\sqrt{pq}}{2} \sum_{j=1}^{N-1} \Bigg[& \sigma_j^x \sigma_{j+1}^x + \sigma_j^y \sigma_{j+1}^y - \frac{\mathcal{Q} + \mathcal{Q}^{-1}}{2} (\sigma_j^z \sigma_{j+1}^z - 1) \\ & - \frac{\mathcal{Q} - \mathcal{Q}^{-1}}{2} (\sigma_{j+1}^z - \sigma_j^z) \Bigg] + B'_1 + B'_N \end{aligned} \tag{4.5}$$

mit Randtermen

$$\begin{aligned} B'_1 &= -\frac{\alpha}{2} (\sigma_1^z + 2\mathcal{Q}^{\frac{1-N}{2}} \sigma_1^- + 1) \quad , \\ B'_N &= \frac{\beta}{2} (\sigma_N^z + (-1)^N 2\mathcal{Q}^{\frac{1-N}{2}} \sigma_N^+ - 1) \quad . \end{aligned} \tag{4.6}$$

Die niedrigliegenden Anregungen der antiferromagnetischen Kette entsprechen also den höchsten Anregungen der ferromagnetischen Kette und umgekehrt.

4.1. Konforme Invarianz und finite-size-scaling

In diesem Kapitel soll kurz auf die wichtigsten Folgerungen aus der Annahme konformer Invarianz zweidimensionaler, isotroper, klassischer, statistischer Systeme mit lokalen Wechselwirkungen am kritischen Punkt eingegangen werden.
Dazu werde zunächst eine konform invariante klassische Feldtheorie betrachtet, welche auf einem Zylinder unendlicher Länge mit Umfang l definiert ist. Dieser Zylinder

kann als Streifen gedacht werden, parametrisiert durch zwei kartesische Koordinaten $-\infty < u < \infty$ und $0 \leq v \leq l$, wobei die beiden Ränder $v = 0$ und $v = l$ miteinander identifiziert werden. Die komplexe Ebene wird auf diesen Streifen durch die konforme Transformation

$$w = u + iv = \frac{l}{2\pi} \ln z \tag{4.7}$$

abgebildet. Translationen auf dem Streifen entlang u entsprechen somit Dilatationen, und Translationen entlang v Rotationen in der Ebene.
Bei radialer Quantisierung [17] werden die auftretenden klassischen Felder $\varphi(z, \bar{z})$ zu Operatoren $\hat{\varphi}(z, \bar{z})$ auf einem Hilbertraum $\mathcal{H}$ mit Vakuum $\mid 0\rangle$.
Die konformen Abbildungen werden generiert durch die Elemente zweier kommutierender Virasoro-Algebren [46],

$$\begin{aligned}
[L_n, L_m] &= (n-m)L_{n+m} + \frac{c}{12}(n^3 - n)\delta_{n+m,0} \quad , \\
[\bar{L}_n, \bar{L}_m] &= (n-m)\bar{L}_{n+m} + \frac{c}{12}(n^3 - n)\delta_{n+m,0} \quad , \\
[L_n, \bar{L}_m] &= 0 \quad , \quad n, m \in Z \quad .
\end{aligned} \tag{4.8}$$

Die Virasoro-Algebra ist die zentrale Erweiterung der konformen Algebra. Dabei kommutiert das Element c mit allen anderen Generatoren, kann deshalb in den irreduziblen Darstellungen der Algebra wie eine Zahl behandelt werden und wird als zentrale Ladung bezeichnet.
Der Generator $\hat{H}$ der Translationen in Richtung von u auf dem Streifen ist folgendermaßen mit dem Generator der Dilatationen in der Ebene $L_0 + \bar{L}_0$ verknüpft [22]:

$$\hat{H} = \frac{2\pi}{l}(L_0 + \bar{L}_0 - \frac{c}{12}) \quad . \tag{4.9}$$

Für den Generator $\hat{k}$ der Translationen in Richtung von v gilt:

$$\hat{k} = \frac{2\pi}{l}(L_0 - \bar{L}_0) \quad . \tag{4.10}$$

Dabei generiert $L_0 - \bar{L}_0$ die Drehungen in der Ebene . Die kleinsten Eigenwerte Δ und $\bar{\Delta}$ zu L_0 bzw. $\bar{L}_0$ werden als Höchstgewichte einer irreduziblen Darstellung bezeichnet. Alle anderen Eigenwerte von L_0 bzw. $\bar{L}_0$ unterscheiden sich von diesen nur um ganze positive Zahlen. Die Menge der möglichen Höchstgewichte wird häufig mit dem Operatorinhalt identifiziert, wobei als Operatorinhalt die Menge der Feldoperatoren bezeichnet wird, die angewandt auf das Vakuum gerade die Eigenzustände zu diesen Gewichten ergeben (primäre Felder). Entsprechend ihrer Bedeutung in der Ebene heißen $x = \Delta + \bar{\Delta}$ bzw. $s = \Delta - \bar{\Delta}$ Skalendimension bzw. Spin des entsprechenden Operators.
Gegeben sei nun ein diskretes, klassisches, statistisches Modell auf einem Streifen der Breite l in zwei Dimensionen mit Transfermatrix $T = e^{-\tau H}$ und periodischen Randbedingungen. Der Parameter τ kennzeichnet den Gitterabstand des diskreten

Modells, und im Grenzfall $\tau \rightarrow 0$ entspricht H dem Hamiltonoperator eines Quantensystems in $1+1$ Dimensionen. Bei Kritizität des Systems erwartet man nun, daß das System masselos ist, d.h. daß alle Energielücken für das unendliche System verschwinden. Für die skalierten Energielücken

$$\mathcal{E}_n = \lim_{l\to\infty} \frac{l}{2\pi\xi}(E_n(l) - E_0(l)) \tag{4.11}$$

folgt nun aus der Annahme konformer Invarianz, daß sie gegeben sind durch die möglichen Skalendimensionen einer Produktdarstellung obiger Virasoro-Algebren. Dabei bezeichnet $E_0(l)$ die Grunzustandsenergie und $E_n(l)$ die Energie eines beliebigen angeregten Zustandes bei Gitterlänge l. Die Konstante ξ kann hier einfach als Normierungskonstante betrachtet werden.
Analog sind im Limes die mit $\frac{l}{2\pi\xi}$ multiplizierten Impulse $\mathcal{P}_n$ durch die möglichen Spins gegeben, also insgesamt[21, 20]

$$\mathcal{E}_n = \Delta + r + \bar{\Delta} + \bar{r} \quad , \tag{4.12}$$

$$\mathcal{P}_n = \Delta + r - (\bar{\Delta} + \bar{r}) \quad . \tag{4.13}$$

Dabei sind r und $\bar{r}$ natürliche Zahlen. Welche Δ und $\bar{\Delta}$ möglich sind hängt von der zentralen Ladung c ab. Gleiches gilt für die auftretenden Entartungen in r und $\bar{r}$.
Die *finite-size*-Korrekturen zur Energie des Grundzustandes hängen ebenfalls von der zentralen Ladung c ab [44, 45]:

$$\frac{E_0(l)}{l} = e_\infty - \frac{\pi\xi c}{6l^2} - o(l^{-2}) \quad . \tag{4.14}$$

Dabei bezeichnet e_∞ die freie *bulk*-Energie pro Gitterplatz.
Man gelangt zu analogen Ergebnissen im Falle offener Randbedingungen. Dazu betrachtet man die Abbildung der oberen komplexen Halbebene auf einen Streifen dessen Ränder nun nicht miteinander identifiziert werden.

$$w = u + iv = \frac{l}{\pi}\ln z \quad . \tag{4.15}$$

Als Konsequenz der konformen Invarianz werden nun die Größen $\mathcal{E}_n$ durch die irreduziblen Darstellungen nur einer Virasoro-Algebra gegeben [19]. Bei gleicher Normierung von H wie im periodischen Fall erwartet man hier:

$$\mathcal{E}_n = \lim_{l\to\infty} \frac{l}{\pi\xi}(E_n(l) - E_0(l)) = \Delta + r \quad . \tag{4.16}$$

Die Skalendimensionen Δ entsprechen hier den kritischen Oberflächenexponenten des Modells [18, 21]. Da das System nicht periodisch ist, ist der Impuls keine gute Quantenzahl mehr, so daß hier kein zu (4.13) analoger Ausdruck existiert. Für die Grundzustandsenergie erhält man den Ausdruck [45]

$$\frac{E_0(l)}{l} = e_\infty + \frac{f_\infty}{l} - \frac{\pi\xi c}{24l^2} - o(l^{-2}) \quad . \tag{4.17}$$

Die Konstante f_∞ wird Oberflächenenergie genannt und hängt von den gewählten Randbedingungen ab, während e_∞ nur von der Wechselwirkung im *bulk* abhängt und daher mit dem Wert für periodische Randbedingungen übereinstimmt.
Hier sei darauf hingewiesen, daß Korrekturen zweiter Ordnung zu (4.14) und (4.16) in natürlicher Weise erscheinen, wenn das kleinste Höchstgewicht der vorliegenden Darstellung der Virasoro-Algebra nicht null ist. Dies kann allerdings nur bei nichtunitären Darstellungen der Virasoro-Algebra der Fall sein. Alle obigen Formeln behalten jedoch ihre Gültigkeit, wenn E_0 entsprechend umdefiniert wird.
Aufgrund obiger Vorhersagen läßt sich nun durch Bestimmung der Eigenwerte des Hamiltonoperators im endlichen System die konforme Invarianz des unendlichen Systems am kritischen Punkt überprüfen. Dazu können sowohl analytische, als auch numerische Methoden verwendet werden. Sofern ein Bethe-Ansatz existiert, können die Bethe-Ansatz-Gleichungen numerisch gelöst werden. Dies erlaubt die Berechnung von Eigenwerten für sehr große Gitterlängen. Andernfalls muß der Hamiltonoperator, wie in dieser Arbeit geschehen, numerisch diagonalisiert werden.
Die im allgemeinen nicht bekannte Normierungskonstante ξ kann dabei unter anderem aus der Bedingung der Existenz ganzzahliger Abstände in den Korrekturen bestimmt werden. Mit Hilfe von ξ läßt sich die zentrale Ladung aus der Grundzustandsenergie bestimmen. Die Entartungen in den $\mathcal{E}_n$ und die auftretenden Höchstgewichte geben weiteren Aufschluß über die enhaltenen Darstellungen der Virasoro-Algebra. Im allgemeinen geht man dabei so vor, daß man eine intuitive Erwartung an den Operatorinhalt verifiziert, indem man die untersten angeregten Energieniveaus mit den vorhergesagten konformen Dimensionen und entsprechenden Entartungen identifiziert. Einschränkungen an bestimmte Kombinationen von zentraler Ladung, Operatorinhalt und Entartung der Niveaus werden durch die Darstellungstheorie der Virasoro-Algebra gegeben.

4.2. Darstellungstheorie der Virasoro und U(1) Kac-Moody Algebra

An dieser Stelle sollen die für diese Arbeit wesentlichen Ergebnisse der Darstellungstheorie der Virasoro-Algebra dargelegt werden. Dabei soll auch auf den Fall einer höheren Symmetrie eingegangen werden, welche durch eine $U(1)$ Kac-Moody Algebra beschrieben wird. Der Fall $c = 1$ ist für diese Arbeit von besonderer Bedeutung.

$$[L_n, L_m] = (n-m)L_{n+m} + \frac{1}{12}(n^3 - n)\delta_{n+m,0} \quad . \tag{4.18}$$

Aus der Kommutatorrelation folgt unmittelbar, daß die Generatoren L_{-n} und L_n mit $n > 0$ als Auf- und Absteiger bezüglich der Eigenwerte von L_0 wirken. Höchstgewichtsdarstellungen $[\Delta]$ werden nun durch den Höchstgewichtszustand $|\Delta\rangle$ definiert.

$$\begin{aligned} L_0|\Delta\rangle &= \Delta|\Delta\rangle \quad , \\ L_n|\Delta\rangle &= 0 \quad (n > 0) \quad . \end{aligned} \tag{4.19}$$

Der Darstellungsraum (Verma-Modul) wird nun aufgespannt durch wiederholtes Anwenden der $L_{-n}(n>0)$ auf den Höchstgewichtszustand.

$$|\Delta + r\rangle = L_{-n_1}L_{-n_2}...L_{-n_{N-1}}L_{-n_N}|\Delta\rangle \quad , \quad \sum_{i=1}^{N} n_i = r \quad (n_i > 0) \quad . \tag{4.20}$$

$$L_0|\Delta + r\rangle = (\Delta + r)|\Delta + r\rangle \quad . \tag{4.21}$$

Die Charakterfunktion einer Höchstgewichtsdarstellung ist definiert durch

$$\chi_\Delta(z) = \mathrm{tr}(z^{L_0}) = z^\Delta \sum_{r=0}^{\infty} D(r) z^r \quad . \tag{4.22}$$

Dabei gibt $D(r)$ die Vielfachheit der Entartung des Eigenwertes $\Delta + r$ an. Für $c = 1$ lauten die Charakterfunktionen [49]:

$$\chi_\Delta(z) = z^\Delta \Pi_V(z) \qquad (\Delta \neq \frac{t^2}{4}) \quad , \tag{4.23}$$

$$\chi_\Delta(z) = z^{\frac{t^2}{4}}(1 - z^{t+1})\Pi_V(z) \qquad (\Delta = \frac{t^2}{4}) \quad . \tag{4.24}$$

Hier ist t eine natürliche Zahl und $\Pi_V(z)$ ist definiert durch

$$\Pi_V(z) = \prod_{m=1}^{\infty} \frac{1}{1 - z^m} \quad . \tag{4.25}$$

Im ersten Fall entspricht $D(r)$ also gerade der Anzahl möglicher Zerlegungen von r in positive ganze Zahlen.
Die $U(1)$ Kac-Moody Algebra [48] wird nun definiert durch die Vertauschungsrelationen

$$[T_m, T_n] = m\delta_{m+n,0} \quad , \quad m, n \in Z \quad . \tag{4.26}$$

Aus dieser Kac-Moody Algebra erhält man nun automatisch eine Virasoro-Algebra mit $c = 1$ durch die Sugawara Konstruktion [47]

$$L_m = \frac{1}{2} \sum_{r \in Z} : T_{m-r} T_r : \quad , \tag{4.27}$$

wobei

$$: T_r T_s := \Theta(r - s) T_s T_r + \Theta(s - r) T_r T_s \quad , \tag{4.28}$$

mit

$$\Theta(x) = \begin{cases} 0 & x < 0 \\ \frac{1}{2} & x = 0 \\ 1 & x > 0 \quad . \end{cases}$$

Für L_0 folgt daraus unmittelbar:

$$L_0 = \frac{1}{2} T_0^2 + \sum_{r=1}^{\infty} T_{-r} T_r \quad . \tag{4.29}$$

Ferner ergibt sich die Kommutatorrelation

$$[T_m, L_n] = mT_{m+n} \quad . \tag{4.30}$$

Unitäre Darstellungen erhält man durch

$$T_m^\dagger = T_{-m} \qquad \Rightarrow \qquad L_m^\dagger = L_{-m} \quad . \tag{4.31}$$

Ein Wechsel der Bezeichnungen ist hier instruktiv :

$$a_r = \frac{1}{\sqrt{r}} T_r \qquad\qquad (r \neq 0) \quad , \tag{4.32}$$

$$[a_r, a_s^\dagger] = \delta_{r,s} \quad , \quad [a_r, a_s] = 0 \quad , \quad [T_0, a_r] = 0 \quad . \tag{4.33}$$

Die a_r erfüllen also bosonische Vertauschungsrelationen und der Darstellungsraum läßt sich kanonisch aus dem Vakuumzustand, der dem Höchstgewichtszustand $|\Delta, q\rangle$ der Darstellung $[\Delta, q]$ entspricht, erzeugen. Dabei kennzeichnet q den Eigenwert zu T_0. Er kann beliebige reelle Werte annehmen. Aus (4.29) folgt zudem

$$\Delta = \frac{q^2}{2} \quad . \tag{4.34}$$

Als Charakterfunktion erhält man

$$\chi_{\Delta,q}(z, y) = \mathrm{tr}(z^{L_0} y^{T_0}) = z^{\frac{q^2}{2}} \Pi_V(z) y^q \quad . \tag{4.35}$$

Ein *Shift* der Algebra abhängig von einem Parameter φ

$$\tilde{T}_m = T_m + \varphi \delta_{m,0} \tag{4.36}$$

ändert die Vertauschungsrelationen (4.26) nicht, führt aber zu einer Darstellung mit höchsten Gewichten

$$\tilde{q} = q + \varphi \quad , \quad \tilde{\Delta} = \frac{1}{2}\tilde{q}^2 \quad . \tag{4.37}$$

Man erhält also jede irreduzible unitäre Darstellung $[\Delta, q]$ der $U(1)$ Kac-Moody Algebra durch einen reellen *Shift* $\varphi = q$ aus der Darstellung $[0, 0]$.
Wählt man nun φ komplexwertig, so erhält man in natürlicher Weise Darstellungen der Virasoro Algebra mit negativen konformen Dimensionen. In diesem Fall gilt jedoch $\tilde{T}_0^\dagger \neq \tilde{T}_0$ und die somit erhaltene Darstellung ist nicht unitär. Sie kann aber ebenfalls aus einem bosonischen Vakuum konstruiert werden, da weiterhin $\tilde{T}_m^\dagger = \tilde{T}_{-m} (m \neq 0)$ gilt.
Mit der Sugawara Konstruktion lassen sich auch aus den Darstellungen der Kac-Moody Algebren anderer einfacher Lie-Gruppen Darstellungen der Virasoro Algebra konstruieren [47, 48]. Darauf soll in dieser Arbeit jedoch nicht weiter eingegangen werden, da dies für die gewonnen Ergebnisse nicht relevant ist.

Es wurde hauptsächlich der Hamiltonoperator für $q = 0$ und $p = 1$ mit $\alpha, \beta > 0$ systematisch untersucht. Hier weisen die extrapolierten Werte die beste Konvergenz auf und lassen sich mit den analytisch bestimmten Konstanten für das periodische System vergleichen. Von Gwa und Spohn [7] wurden der kleinste und zweitkleinste Eigenwert im Sektor mit Gesamtspin 0 durch Bethe-Ansatz berechnet:

$$e_\infty = 0.690140115. \tag{4.38}$$

$$(E_1 - E_0)_{per} = 6.5776787 N^{-1} + i1.885456427. \tag{4.39}$$

Diese Werte für das periodische System wurden zum Vergleich mit den numerischen Werten für das System mit Randbedingungen herangezogen.
Die Wahl $\beta = \alpha$ führt zu einem CP-invarianten Hamiltonoperator , was durch Ausnutzen der resultierenden Blockstruktur von H die Berechnung von mehr Eigenwerten bei gleicher Gitterlänge ermöglicht. Gleichzeitig wird dadurch die Zuordnung der Eigenwerte verschiedener Gitterlängen zueinander vereinfacht, da eine weitere Quantenzahl als Entscheidungskriterium zur Verfügung steht.
Das *finite-size-scaling*-Verhalten der Spektren muß seperat für gerade und ungerade Anzahl von Gitterplätzen betrachtet werden. Dabei wurde das Skalenverhalten der Eigenwerte bei geraden Kettenlängen relativ zur Grundzustandsenergie bei ungeraden Kettenlängen ermittelt. Dazu wurden die Werte $E_0(N)$ für gerade Anzahl von Gitterplätzen durch Interpolation mit *Mathematica* [60] aus denen für ungerade Kettenlängen bestimmt. Während die Grundzustandsenergie für alle Gitterlängen N reell ist, weisen die meisten Anregungen E_n einen bei wachsender Gitterlänge nicht verschwindenden Imaginärteil auf. Durch Extrapolation wurden nun der Imaginärteil

$$\mathcal{I} \quad = \lim_{N\to\infty} \frac{1}{\pi\xi} \mathrm{Im} E(N) \quad , \tag{4.40}$$

die Korrektur zum Realteil

$$\mathrm{Re}\mathcal{E} = \lim_{N\to\infty} \frac{N}{\pi\xi} \mathrm{Re}(E(N) - E_0(N))) \tag{4.41}$$

und die Korrektur zum Imaginärteil

$$\mathrm{Im}\mathcal{E} = \lim_{N\to\infty} \frac{N}{\pi\xi} \mathrm{Im}(E(N) - \mathcal{I}) \tag{4.42}$$

der Energielücken bestimmt. Die so ermittelten Daten ergeben folgendes Skalenverhalten der normierten Eigenwerte:

$$\frac{N}{\pi\xi}(E_r^m - E_0') = R^2(m + i(x + yN))^2 + r \quad , \quad r \in N \quad , \tag{4.43}$$

wobei

$$E_0' = E_0 + \pi\xi(\frac{R^2 x^2}{N} + R^2 y^2 N + 2R^2 xy) \quad . \tag{4.44}$$

Dabei ist m quantisiert und nimmt bei ungeraden Kettenlängen die Werte $m = 0, \pm 1, \pm 2, ...$ und bei gerader Anzahl von Gitterplätzen die Werte $m = \pm\frac{1}{2}, \pm\frac{3}{2}, \pm\frac{5}{2}, ...$ an. Es besteht folgender Zusammenhang zwischen R, x, y und den Extrapolanten:

$$\begin{aligned} \mathcal{I}_r^m &= 2R^2 m y, \\ \mathrm{Re}\mathcal{E}_r^m &= R^2 m^2 + r, \\ \mathrm{Im}\mathcal{E}_r^m &= 2R^2 m x. \end{aligned} \tag{4.45}$$

Für $\alpha = \beta$ haben die Zustände zu $r = 0$ und $r = n$ für festes N relativen CP-Eigenwert $(-1)^n$. Hier sei erwähnt, daß für ungerade N die jeweils n'ten angeregten Zustände bei Kettenlänge N und $N + 2$ relativen CP-Eigenwert (-1) haben. Dies ist unerwartet, da diesen Zuständen im unendlichen System somit kein CP-Eigenwert zugeordnet werden kann, obwohl CP eine Symmetrie des endlichen Systems ist.
Die gefundenen Entartungen in den Korrekturen für r =const. werden durch die Charakterfunktion einer $U(1)$ Kac-Moody Algebra (4.35) beschrieben. Der von N unabhängige Anteil im Skalenverhalten der Energien wird also durch eine nichtunitäre Darstellung der *shifted* $U(1)$ Kac-Moody Algebra gegeben. Der Parameter x hängt von der Wahl der Randterme ab. Unklar ist in diesem Zusammenhang jedoch das Auftreten eines Terms proportional zu N. Dies entspricht nicht dem Verhalten eines konform invarianten Systems.
Es zeigte sich, daß $\pi\xi\mathcal{I}_r^m$ im Rahmen der Rechengenauigkeit, unabhängig von α und β, bei ungerader Anzahl von Gitterplätzen nur ganzzahlige Vielfache des Imaginärteils aus (4.39) annimmt. Mit der Annahme, daß das Spektrum der periodischen Kette ebenfalls durch R und y charakterisiert ist, analog zur symmetrischen XXZ-Kette, so erhält man aus (4.39) Werte für R und y :

$$\frac{N}{2\pi\xi}(E - E_0)_{per} = \frac{1}{2}R^2 + iR^2 yN \tag{4.46}$$

Die sich daraus ergebende Erwartung läßt sich mit den numerischen Daten vergleichen. In Tabelle 1 finden sich die damit bestimmten Werte und die entsprechenden Extrapolanten für $r = 0$ und verschiedene m. Die Normierungskonstante ξ wurde aus numerischen Rechnungen zur Lösung der Bethe-Ansatz Gleichungen für das periodische System mit bis zu 80 Gitterplätzen übernommen [51]:

$$\xi = 1.64784392694623 \quad . \tag{4.47}$$

Da H reell ist, ist zum komplexen Eigenwert E immer auch E^* Eigenwert von H. Aus diesem Grund sind in allen Tabellen nur die Daten für $m \geq 0$ aufgeführt. Tabellen mit den Werten für $r \geq 0$ befinden sich im Anhang.
Aus E_0' konnte nun gemäß (4.17) die konforme Ladung c' bestimmt werden. Mit (4.38) ist e_∞ bereits bekannt. Die Oberfächenenergie f_∞ läßt sich dann durch Extrapolation ermitteln,

$$f_\infty = \lim_{N\to\infty}(E_0(N) - Ne_\infty) \quad . \tag{4.48}$$

Tabelle 1. Erwartete und extrapolierte Werte der normierten Energielücken, berechnet aus den *finite-size*-Spektren von $-H$ für $\alpha = \beta = 0.5$, $q = 0$, $p = 1$ und $r = 0$.

m	R^2m^2		$2R^2my$		$2R^2mx$
	erwartet	extrapoliert	erwartet	extrapoliert	extrapoliert
$\frac{1}{2}$	0.317 648	0.317 63(2)	0.182 104	0.182 104	−0.120 70(3)
1	1.270 594	1.270 (6)	0.364 209	0.364 2(1)	−0.241 4(1)
$\frac{3}{2}$	2.858 836	2.858 (9)	0.546 313	0.546 313	−0.362 10(7)
2	5.082 375	5.082 (3)	0.728 418	0.728 (4)	−0.482 8(2)
$\frac{5}{2}$	7.941 211	7.9(4)	0.910 522	0.9(1)	−0.60(4)
3	11.435 343	11.4(8)	1.092 627	1.0(8)	−0.72(3)

Mit f_∞ ergibt sich c aus

$$c = \lim_{N\to\infty} \frac{24N}{\pi\xi}(E_0(N) - Ne_\infty - f_\infty) \quad . \tag{4.49}$$

Daraus wurde c' berechnet durch

$$c' = c - 24R^2x^2 \quad . \tag{4.50}$$

Die so bestimmten Werte sind konsistent mit $c' = 1$.
Im Gegensatz zu R und y zeigt der *Shift* x eine Abhängigkeit von den Randtermen. Tabelle 2 zeigt Extrapolanten für $\alpha = \beta$. Zur Abschätzung der Fehler von c und c' durch die zweifache Extrapolation wurde f_∞ im Rahmen des Fehlers variiert. Im Anhang finden sich weitere Daten für $\alpha \neq \beta$.

Tabelle 2. Extrapolierte zentrale Ladungen. Der Wert von R^2x wurde aus E_0^1 bestimmt.

$\alpha=\beta$	f_∞	R^2x	c	c'
0.1	−1.12(3)	0.793(8)	12.9(8)	1.0(8)
0.2	−0.6(2)	0.506(0)	5.8(3)	1.0(0)
0.3	−0.297(8)	0.3339(8)	3.1(1)	1.0(1)
0.4	−0.0336(9)	0.2126(4)	1.84(8)	0.99(4)
0.5	0.19737	0.1207(0)	1.2752(8)	1.0000(8)
0.6	0.40965	0.0486(5)	1.044(4)	0.999(7)
0.7	0.610(7)	−0.008(7)	1.00(0)	0.99(9)
0.8	0.8049(7)	−0.054(6)	1.04(8)	0.99(2)
0.9	1.1829(2)	−0.0913(7)	1.2(7)	1.1(2)
1.0	1.369(5)	−0.1(2)	1.3(8)	1.1(1)

Die Ergebnisse lassen sich zusammenfassen in der Zustandssumme

$$\mathcal{Z} = z^{-\frac{1}{24}} \sum_{m\in\frac{\mathbb{Z}}{2}} z^{R^2(m+i(x+Ny))^2} \Pi_V(z) \tag{4.51}$$

mit $\Pi_V(z)$ aus (4.25). Hier soll darauf hingewiesen werden, daß stichprobenartige Berechnungen für $q \neq 0 \neq p$ mit $p > q$ keine qualitativ anderen Resultate ergeben, jedoch zeigen, daß x und y Funktionen von q/p sind.
Der Fall $q > p$ wurde nicht systematisch untersucht. Hier sind die Spektren jedoch vollständig reell, im Gegensatz zum Fall $p > q$. Die Konvergenz der Extrapolanten ist hier zu schlecht um weitere Aussagen zu machen. Dies gilt genauso für den Fall $p = q$
Außer den bisher aufgeführten Resultaten stellte sich die Frage, ob das Spektrum massive Eigenwerte enthält. Dies ergab sich aus den folgenden Beobachtungen:

- Der kleinste rein reelle Eigenwert E_g bei geraden Kettenlängen bleibt endlich.
- Es finden sich weitere Eigenwerte im Spektrum, die relativ zu diesem Wert das gleiche Skalenverhalten wie der masselose Teil des Spektrums aufweisen (inklusive der Entartungen).

Aus E_g konnte jedoch nicht analog zum Grundzustand die zentrale Ladung 1 ermittelt werden. Im letzten Teil dieser Arbeit wird deutlich werden, daß sich die hier gefundene Masse aus falscher Zuordnung der Eigenwerte bei verschiedener Kettenlänge zueinander ergibt und somit nur ein numerisches Artefakt ist.

5. Fermionisierbares Spielzeugmodell

In diesem Kapitel wird mit dem Hamiltonoperator

$$H = \sum_{j=1}^{N-1} \sigma_j^+ \sigma_{j+1}^- + \alpha \sigma_1^- + \beta \sigma_N^+ \tag{5.1}$$

eine vereinfachte Version des ursprünglichen Modells eingeführt. Für $\alpha = 0$ oder $\beta = 0$ hat H nur den N-fach entarteten Eigenwert *null*. Die gesamte Struktur des Spektrums hat also ihre Ursache in der Existenz der Randterme. Dieser Hamiltonoperator kann analytisch diagonalisiert werden und hat ein Spektrum freier Fermionen. Außerdem ist $H(\alpha,\beta)$ ähnlich zu $H(-\alpha,-\beta)$. Dazu muß die Transformation $\sigma^\pm \to -\sigma^\pm$ durchgeführt werden. Es zeigt sich, daß für $\alpha\beta > 0$ die charakteristischen Eigenschaften der bisher untersuchten Spektren im antiferromagnetischen Bereich erhalten werden.

5.1. Fermionisierung

Da H kein bilinearer Ausdruck in σ^+ und σ^- ist, läßt sich die Methode der Fermionisierung [50] nicht unmittelbar anwenden. Anstelle von H wird deshalb der Operator

$$H' = \sum_{j=1}^{N-1} \sigma_j^+ \sigma_{j+1}^- + \alpha \sigma_0^x \sigma_1^- + \beta \sigma_N^+ \sigma_{N+1}^x \tag{5.2}$$

betrachtet. Dabei wird die Kette um zwei Gitterplätze verlängert. Da σ_0^x und σ_{N+1}^x mit H' vertauschen und jeweils einen Eigenvektor zum Eigenwert *eins* haben, enthält das Spektrum von H' auch das Spektrum von H. Zur Fermionisierung werden neue Operatoren τ_j^+ und τ_j^- eingeführt durch

$$\tau_j^+ = (\prod_{i<j} \sigma_i^z)\sigma_j^x, \qquad \tau_j^- = (\prod_{i<j} \sigma_i^z)\sigma_j^y \qquad (j = 0, ..., N+1) \tag{5.3}$$

welche die Clifford-Algebra erfüllen:

$$\{\tau_i^\mu, \tau_j^\nu\} = 2\delta_{i,j}^{\mu,\nu} \qquad (i,j = 0,..,N+1; \mu,\nu = \pm 1). \tag{5.4}$$

Damit kann H' geschrieben als

$$H' = -\frac{1}{4} \sum_{j=0}^{N-1} (i\tau_j^- \tau_{j+1}^+ + \tau_j^- \tau_{j+1}^- + \tau_j^+ \tau_{j+1}^+ - i\tau_j^+ \tau_{j+1}^-) \tag{5.5}$$

$$- \frac{\alpha}{2}(i\tau_0^- \tau_1^+ + \tau_0^- \tau_1^-) - \frac{\beta}{2}(i\tau_N^- \tau_{N+1}^+ + \tau_N^+ \tau_{N+1}^+) \quad .$$

Dies läßt sich auch in der Form

$$H' = -\sum_{j=0}^{N} \sum_{\mu,\nu=\pm 1} A_j^{\mu,\nu} \tau_j^\mu \tau_{j+1}^\nu \tag{5.6}$$

schreiben, wobei

$$A_0 = \frac{\alpha}{2}\begin{pmatrix} 1 & i \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad A_j = \frac{1}{4}\begin{pmatrix} 1 & i \\ -i & 1 \end{pmatrix} \quad (0 < j < N) \quad , A_N = \frac{\beta}{2}\begin{pmatrix} 0 & i \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \tag{5.7}$$

Dabei wurden die Matrixelemente angeordnet gemäß

$$A = \begin{pmatrix} A^{--} & A^{-+} \\ A^{+-} & A^{++} \end{pmatrix} \quad . \tag{5.8}$$

Durch eine weitere lineare Transformation

$$T_n^\gamma = \sum_{j=0}^{N} \sum_{\mu=\pm 1} (\psi_n^\gamma)_j^\mu \tau^\mu \qquad (\gamma = \pm 1) \tag{5.9}$$

läßt sich H' in die gewünschte Form bringen.

$$H' = \sum_{n=0}^{N+1} \Lambda_n \, i T_n^- T_n^+ \tag{5.10}$$

mit

$$\{T_i^\mu, T_j^\nu\} = 2\delta_{i,j}^{\mu,\nu} \qquad (i,j = 0,..,N+1; \mu,\nu = \pm 1). \tag{5.11}$$

Die Λ_n und die Vektoren $\psi_n^\gamma = ((\psi_n^\gamma)_0^-, (\psi_n^\gamma)_0^+, ..., (\psi_n^\gamma)_{N+1}^-, (\psi_n^\gamma)_{N+1}^+)$ ergeben sich aus der Lösung des Eigenwertproblems

$$M(\psi_n^+ \pm i\psi_n^-) = \mp \Lambda_n(\psi_n^+ \pm i\psi_n^-) \quad . \tag{5.12}$$

Dabei ist M eine $(2N+4) \times (2N+4)$ Matrix gegeben durch

$$M = \begin{pmatrix} 0 & A_0 & & & & \\ -A_0^T & 0 & A_1 & & & \\ & -A_1^T & 0 & A_2 & & \\ & & ... & ... & ... & \\ & & & -A_{N-1}^T & 0 & A_N \\ & & & & -A_N^T & 0 \end{pmatrix} \quad , \tag{5.13}$$

mit den Matrizen A_j aus Gleichung (5.7). Die Diagonalisierung von M führt auf den Eigenwert $\Lambda_0 = 0$ und die folgende Bestimmungsgleichung für die restlichen Eigenwerte :

$$(2\Lambda)^{2N+2} = 4\alpha^2\beta^2(-1)^N \quad . \tag{5.14}$$

Daraus ergeben sich die Lösungen

$$\Lambda_0 = 0, \quad 2\Lambda_n = (2\alpha\beta)^{\frac{1}{N+1}}(\sin(k) - i\cos(k)) \tag{5.15}$$

mit

$$k = \frac{2n-1}{2N+2}\pi \quad (0 < n \le N+1) \quad . \tag{5.16}$$

Da die Operatoren $iT_n^- T_n^+$ wegen (5.11) die Eigenwerte ± 1 haben, kann man sich in (5.10) immer auf die Eigenwerte mit positivem Realteil beschränken, und die Energielücken im Spektrum sind gerade durch die $2\Lambda_n$ gegeben. Für die Grundzustandsenergie erhält man also den Ausdruck

$$E_0 = -\sum_{n=1}^{N+1} \Lambda_n = -\frac{(2\alpha\beta)^{\frac{1}{N+1}}}{2\sin(\frac{\pi}{2N+2})} \quad . \tag{5.17}$$

5.2. Skalenverhalten der Energien

Die Entwicklung des Grundzustandes für große N ergibt folgendes Verhalten :

$$-E_0 \approx \frac{N}{\pi} + \frac{1+\ln(2\alpha\beta)}{\pi} + \frac{\pi}{24N}\left(1 + \frac{12\ln^2(2\alpha\beta)}{\pi^2}\right) + o(N^{-2}) \quad . \tag{5.18}$$

Das Skalenverhalten der untersten Fermionenergien erhält man durch die Entwicklung um die Minima der Dispersionsrelation (5.15). Für $0 < n \ll N$ folgt damit :

$$2\Lambda_n \approx \frac{2n-1}{2}\frac{\pi}{N} - i\left(1 + \frac{\ln(2\alpha\beta)}{N}\right) \qquad \text{für} \qquad k < \frac{\pi}{2}, \tag{5.19}$$

$$2\Lambda_{N+2-n} \approx \frac{2n-1}{2}\frac{\pi}{N} + i\left(1 + \frac{\ln(2\alpha\beta)}{N}\right) \qquad \text{für} \qquad k > \frac{\pi}{2}. \tag{5.20}$$

Da die verlängerte Kette 4 mal so viele Eigenwerte hat wie die unverlängerte Kette, muß noch bestimmt werden welche Fermionanregungen das Spektrum von H ergeben. Der Vergleich mit den Daten aus der numerischen Diagonalisierung von H ergibt für den Fall $\alpha\beta > 0$, daß das Spektrum von H relativ zu E_0 für gerade N durch ungeradzahlige Anregungen und für ungerade N durch geradzahlige Anregungen freier Fermionen mit den Energien $2\Lambda_n$ gegeben wird. Der Grundzustand des Systems findet sich also bei ungeraden Kettenlängen, wie beim ursprünglichen Modell. Für andere α, β ist dies nicht der Fall! Aus der Entwicklung ergibt sich unmittelbar die Normierungskonstante $\xi = 1$.

Mit $\tilde{H} = \frac{N}{\pi}(H - E_0)$ und unter Benutzung der Dreifachproduktidentität [31] von Jacobi läßt sich nun zunächst schreiben:

$$\begin{aligned} \mathrm{tr} z^{\tilde{H}} &= \prod_{n=1}^{\infty}(1 + z^{n-\frac{1}{2}} z^{ia})(1 + z^{n-\frac{1}{2}} z^{-ia}) \\ &= \sum_{m\in\frac{Z}{2}}^{\infty} z^{2(m+i\frac{a}{2})^2+\frac{a^2}{2}} \prod_{n=1}^{\infty}(1 - z^n)^{-1} \end{aligned} \tag{5.21}$$

wobei

$$\frac{a}{2} = x + yN, \quad x = \frac{\ln(2\alpha\beta)}{2\pi}, \quad y = \frac{1}{2\pi} \quad . \tag{5.22}$$

Hier gilt ebenfalls $m \in Z$ für ungerade Kettenlängen und $m \in Z + \frac{1}{2}$ für gerade Kettenlängen. Der Term $\frac{a^2}{2}$ läßt sich wieder in den Grundzustand absorbieren, so daß man erhält :

$$E_0'(N) = -\frac{N}{2\pi} - \frac{1}{\pi} - \frac{\pi}{24N} + o(N^{-2}) \quad . \tag{5.23}$$

Dies entspricht der Erwartung für ein System mit $c = 1$. Damit ergibt sich die Zustandssumme

$$\mathcal{Z} = z^{-\frac{1}{24}} \sum_{m\in\frac{Z}{2}}^{\infty} z^{2(m+i(x+Ny))^2} \prod_{n=1}^{\infty}(1-z^n)^{-1} \quad . \tag{5.24}$$

Dies entspricht in der Form genau dem numerisch gefundenen Ergebnis für das ursprüngliche Modell mit $R^2 = 2$.

Die Dispersionsrelation (5.15) zeigt ferner, daß das Spektrum masselos ist. Man erhält hier ebenfalls einen kleinsten, nicht verschwindenden reellen Eigenwert bei geraden Gitterlängen durch Anregung des Fermions mit Energie

$$2\Lambda_{\frac{N}{2}+1} = (2\alpha\beta)^{\frac{1}{N+1}} \stackrel{N\to\infty}{\approx} 1 \quad . \tag{5.25}$$

Dies ist aber für alle N der Extremwert von (5.15). Eine Kombination dieser Anregung mit einer ungeraden Anzahl von Anregungen aus (5.19) und (5.28) reproduziert offensichtlich das Skalenverhalten der Energielücken des Spektrums bei ungeraden Kettenlängen, jedoch relativ zu $2\Lambda_{\frac{N}{2}+1}$.
Die wesentliche Schlußfolgerung daraus ist, daß das Auftreten von "Kopien" des unteren Spektrums relativ zu einem "massiven" Grundzustand völlig natürlich ist, obwohl das Spektrum masselos ist.

5.3. Periodische Randbedingungen

Zum Vergleich soll hier noch die Zustandssumme für das fermionisierbare Modell mit periodischen Randbedingungen angegeben werden. Betrachte dazu

$$H = \sum_{j=1}^{N} p\sigma_j^+\sigma_{j+1}^- + q\sigma_j^-\sigma_{j+1}^+ \quad . \tag{5.26}$$

Die Dispersionsrelation und die Grundzustandenergie wurde bereits in [52] berechnet :

$$H = \sum_k (u\cos(k) + iv\sin(k))a_k^\dagger a_k \tag{5.27}$$

mit $u = p + q$ und $v = p - q$. Die a_k sind hier gewöhnliche Fermionoperatoren. Die k können in Abhängigkeit von der Kettenlänge N und der Anzahl angeregter Fermionen N_f unterschiedliche Werte annehmen :

$$N \text{ gerade:} \quad k = \begin{cases} \pm\frac{\pi}{N}, \pm\frac{3\pi}{N}, ..., \pm\frac{(N-1)\pi}{N} & \text{für } N_f \text{ gerade} \\ 0, \pm\frac{2\pi}{N}, \pm\frac{4\pi}{N}, ..., \pm\frac{(N-2)\pi}{N} & \text{für } N_f \text{ ungerade} \end{cases} \tag{5.28}$$

$$N \text{ ungerade: } k = \begin{cases} \pm\frac{\pi}{N}, \pm\frac{3\pi}{N}, ..., \pi & \text{für } N_f \text{ gerade} \\ 0, \pm\frac{2\pi}{N}, \pm\frac{4\pi}{N}, ..., \pm\frac{(N-1)\pi}{N} & \text{für } N_f \text{ ungerade} \end{cases} \quad (5.29)$$

Der Grundzustand des Systems liegt bei geraden Kettenlängen:

$$E_0 = -\frac{u}{\sin(\frac{\pi}{N})} \approx -\frac{uN}{\pi} - \frac{u\pi}{6N} \quad . \quad (5.30)$$

Aus der Dispersionsrelation und mit den erlaubten Werten für die k läßt sich nun die Zustandsumme bestimmen. Bei der Rechnung wird lediglich die Dreifachproduktidentität von Jacobi benötigt. Sie findet sich im Anhang. Mit der Grundzustandsenergie

$$E_0' \approx -\frac{(2u^2 - v^2)N}{2\pi u} - \frac{u\pi}{6N} \quad (5.31)$$

ergibt sich mit $\xi = u$ und $y = \frac{Nv}{2\pi u}$ die Zustandssumme

$$\mathcal{Z} = z^{-\frac{1}{12}}[\sum_{\substack{n\in Z\\ m\in Z}} z^{\frac{n^2}{4}+(m+iyN)^2} + \sum_{\substack{n\in Z+1/2\\ m\in Z+1/2}} z^{\frac{n^2}{4}+(m+iyN)^2}] \prod_{i=1}^{\infty}(1-z^i)^{-2} \quad . \quad (5.32)$$

Hier sind m und n ganzzahlig bei geraden Kettenlängen und halbzahlig bei ungeraden Kettenlängen. Mit $p = q = 1$ erhält man das bekannte Ergebnis aus [23] für die symmetrische XXZ-Kette mit Anisotropie $\Delta = 0$. Mit $p = 1$ und $q = 0$ lassen sich die Ergebnisse für das periodische System mit denen des offenen Systems vergleichen. Die Konstante y stimmt mit dem für das offene System gefundenen Wert (5.22) überein, ebenso der Kompaktifizierungsradius R und die Normierungskonstante ξ. Der Vergleich der Zustandssummen zeigt, daß das offene System allein mit den magnetischen Ladungen eines modifizierten Coulombgases verbleibt.

6. Zusammenfassung der Ergebnisse und Ausblick

In dieser Arbeit wurden Eigenschaften des Eigenwertspektrums der asymmetrischen XXZ-Kette mit nichthermiteschen Randtermen untersucht. Zur Bestimmung der Eigenwerte fanden fast ausschließlich numerische Methoden ihre Anwendung. Bei vorliegender *CP*-Symmetrie des Systems konnten Eigenwerte für Ketten mit bis zu 21 Gitterplätzen berechnet werden.
Die ferromagnetische Kette beschreibt mit $\alpha, \beta > 0$ die Zeitentwicklung eines Reaktions-Diffusionssystems mit asymmetrischer Diffusion im *bulk* und Teilcheninjektion bzw. Teilchenextraktion an den Rändern. Durch Analyse der kleinsten Energielücke konnte das bereits bekannte Phasendiagramm für den stationären Zustand des total asymmetrischen Systems reproduziert werden. In den Bereichen mit algebrischem Abfall der Konzentration in räumlicher Richtung verschwindet die kleinste Energielücke. In der Phase mit maximalem Strom (Phase C) wurde der Exponent $\frac{3}{2}$ gefunden, der auch das Abfallverhalten der untersten Energielücke des Modells mit periodischen Randbedingungen charakterisiert. Auf der Koexistenzlinie, welche die Phasen A und B trennt, wurde der Exponent 2 identifiziert. In den Phasen A und B, mit exponentiellem Abfall der Konzentration in Raumrichtung, ist das Spektrum des Hamiltonoperators massiv. Die Masse hängt dabei von jeweils den Raten an den Rändern ab, von denen auch die räumliche Korrelationslänge abhängt. Dies bedeutet, daß sich die Unterteilung der Phasen A und B in A_1 und A_2 beziehungsweise B_1 und B_2 auch im Spektrum reflektiert. Quantitativ stimmen die Korrelationslängen in räumlicher und zeitlicher Richtung jedoch nicht überein.

Das Spektrum der antiferromagnetischen Kette $-H$ hat eine völlig andere Struktur. Hier ist das Spektrum masselos für $p > q$ und $\alpha, \beta > 0$. Mit $\alpha = 0$ oder $\beta = 0$ ist das Spektrum der Kette genau das der XXZ-Kette mit Anisotropie $\Delta < -1$ und zusätzlichen σ^z-Termen am Rand und deshalb massiv. Dies ist ein Hinweis auf eine oberflächeninduzierte Phasenstruktur auch im antiferromagnetischen Berich, ebenso wie die Tatsache, daß die Spektren für $q \geq p$ rein reell sind.
Im masselosen Bereich ist das Spektrum ähnlich dem eines konform invarianten Systems. Es treten jedoch, wie im periodischen Fall, zusätzlich nichtverschwindende Imaginärteile auf, die neuartig sind und deren Interpretation noch nicht geklärt ist. Bis auf diese Modifikation wird das Skalenverhalten der Energien durch eine nichtunitäre Darstellung der Virasoro Algebra mit $c = 1$ bestimmt. Das Ergebnis läßt sich in der Zustandssumme

$$\mathcal{Z} = z^{-\frac{1}{24}} \sum_{m \in \frac{\mathbb{Z}}{2}} z^{R^2(m+i(x+Ny))^2} \prod_{n=1}^{\infty} (1 - z^n)^{-1} \tag{6.1}$$

zusammenfassen. Der Vergleich mit der Zustandssumme des periodischen Systems zeigt, daß dies die Zustandssumme eines modifizierten Coulombgases nur mit magnetischen Ladungen ist. Der Parameter $y(q/p)$ tritt auch schon bei periodischen Randbedingungen auf, während $x(q/p, \alpha/p, \beta/p)$ von den Randbedingungen induziert wird. Diese Eigenschaften konnten mit einem fermionisierbaren Modell analytisch reproduziert werden.

Eine interessante Frage ist nun, welche Modifikation des Coulombgases das gefundene Skalenverhalten der Eigenwerte ergibt. Insbesondere ist dabei zu klären, welche Rolle die Darstellungstheorie der Virasoro Algebra hier spielt. Das Studium von Korrelationsfunktionen könnte dabei wertvolle Hinweise geben. Bei konform invarianten Systemen besteht ein unmittelbarer Zusammenhang zwischen den Eigenwerten des Hamiltonoperators und den Exponenten der Korrelationsfunktionen des Systems. Im vorliegenden Fall, mit nicht verschwindenden Imaginärteilen im Spektrum der nichthermiteschen Quantenkette, ist jedoch noch unklar, welche Form die Korrelationsfunktionen besitzen.
Hier bietet sich noch ein weites Feld zur Anwendung sowohl analytischer als auch numerischer Methoden, und Antworten auf diese Fragen könnten Einblicke in das Verhalten einer vieleicht neuen Klasse von Modellen ermöglichen.

Danksagung

An dieser Stelle möchte ich mich zunächst bei Prof. Dr. Vladimir Rittenberg für die Aufgabenstellung und seine Betreuung bedanken. Mein Dank gilt aber auch allen Mitgliedern seiner Arbeitsgruppe für die gute Atmosphäre und stete Diskussionsbereitschaft.
Besonders bedanken möchte ich mich bei Peter Arndt, Thomas Heinzel und Klaus Krebs für die aufmerksame Durchsicht meines Manuskripts.

Tabellenverzeichnis

Tabelle 1. Reaktions-Diffusionsmodell: Extrapolierte kleinste Energielücke E_G in Abhängigkeit von α und β. Die negativen Werte zeigen, daß der Fehler in der Größenordnung 10^{-5} liegt.

$\beta \setminus \alpha$	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8	0.9	1.0
1.0	0.12573	0.04014	0.01017	0.00119	0.00000	0.00001	−0.00002	−0.00001	−0.00000	0.00000
0.9	0.12575	0.04014	0.01021	0.00118	−0.00003	0.00000	−0.00004	−0.00001	−0.00000	
0.8	0.12573	0.04013	0.01019	0.00118	−0.00001	0.00000	−0.00004	−0.00004		
0.7	0.12587	0.04012	0.01019	0.00114	−0.00003	−0.00002	−0.00004			
0.6	0.12017	0.04016	0.01030	0.00120	−0.00001	−0.00001				
0.5	0.09999	0.03331	0.00861	0.00110	0.00000					
0.4	0.07213	0.02018	0.00330	−0.00005						
0.3	0.04173	0.00678	−0.00001							
0.2	0.01428	−0.00001								
0.1	−0.00000									

Tabelle 2. Reaktions-Diffusionsmodell: Gemäß (3.12) extrapolierte Korrekturexponenten für den ersten angeregten Zustand in Abhängigkeit von α und β. Die angegebenen Stellen sind stabil bei Variation des Extrapolationsparameters ω. Abweichungen von den Werten $\frac{3}{2}$ und 2 sind ein Hinweis auf unbequeme Korrekturterme.

$\beta \setminus \alpha$	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8	0.9	1.0
1.0					1.5000	1.470	1.456	1.480	1.4999	1.522
0.9					1.499	1.452	1.503	1.4994	1.4999	
0.8					1.4997	1.430	1.436	1.499		
0.7					1.462	1.405	1.499			
0.6					1.434	1.377				
0.5					1.49999					
0.4				2.01						
0.3			1.98							
0.2		2.010								
0.1	1.992									

Tabelle 3. Gemäß Gleichung (4.45) bestimmte Daten aus der Extrapolation der Spektren von $-H$ für $\alpha = \beta = 0.5$, $q = 0$, $p = 1$ mit Kettenlängen $2 \leq N \leq 21$: In den eckigen Klammern befinden sich die erwarteten Entartungen, zu nicht reellen Werten existiert auch der komplex konjugierte Wert, und die für $2R^2mx$ erwarteten Werte wurden aus dem extrapolierten Wert für $m = \frac{1}{2}$ und $r = 0$ bestimmt.

	$m = 0$				$m = \frac{1}{2}$		
r	$R^2m^2 + r$	$2R^2mx$	$2R^2my$	r	$R^2m^2 + r$	$2R^2mx$	$2R^2my$
1 [1]	1.000 000			0 [1]	0.317 63(2)	−0.120 70(3)	0.182 104
2 [2]	1.999 99(7)	0.000 0(0)	0.000 00(1)	1 [1]	1.317 65(7)	−0.120 702	0.182 104
3 [3]	3.000 0(0)			2 [2]	2.317 (4)	−0.120 (7)	0.182 1(1)
	2.999 (8)	−0.000 (1)	−0.000 (0)		2.317 6(8)	−0.120 70(2)	0.182 104
4 [5]	4.000 0(0)			3 [3]	3.3(2)	−0.12(0)	0.182 (1)
	4.00(0)	0.000 (1)	−0.000 (0)		3.317 (7)	−0.120 7(0)	0.182 1(0)
	4.0(0)	0.00(3)	−0.00(0)		3.31(7)	−0.120 6(8)	0.182 1(1)
5 [7]	4.99(6)			4 [5]	4.3(2)	−0.1(3)	0.18(4)
	5.00(0)	0.00(0)	0.000 (0)		4.31(8)	−0.120 (7)	0.182 (1)
	5.0(0)	0.0(0)	−0.00(1)		4.317 (7)	−0.120 (8)	0.182 0(8)
					4.31(6)	−0.12(2)	0.18(2)
6	5.99(7)				4.31(7)	−0.11(8)	0.182 (0)
	6.0(1)	0.0(0)	−0.00(1)				
	6.0(0)	0.00(1)	−0.00(0)	5 [7]	5.31(7)	−0.121 (4)	0.182 0(8)
	6.0(0)	0.0(0)	−0.00(1)		5.317 4(8)	−0.120 (7)	0.182 (1)
					5.31(4)	−0.12(2)	0.18(2)
7	7.0(1)				5.31(7)	−0.12(1)	0.18(2)
	6.99(9)	−0.0(0)	−0.000 (0)		5.3(2)	−0.1(3)	0.18(4)
	7.0(1)	0.0(0)	−0.00(1)		5.3(2)	−0.11(5)	0.1(8)
8	8.0(0)			6	6.3(1)	−0.11(7)	0.182 (1)
	8.0(2)				6.3(4)	−0.1(1)	0.18(1)
	8.0(1)	0.0(0)	−0.00(1)				
	8.(1)	0.(0)	−0.00(5)				
	8.0(1)	0.0(0)	−0.00(1)				
Erwartung	0.000 000+r	0.000 000	0.000 000		0.317 648+r	[−0.120 70]	0.182 104

Tabelle 4. Wie Tabelle 5 mit $m = 1$ und $m = \frac{3}{2}$.

	$m=1$				$m=\frac{3}{2}$		
r	R^2m^2+r	$2R^2mx$	$2R^2my$	n	R^2m^2+r	$2R^2mx$	$2R^2my$
0 [1]	1.270 (6)	−0.241 4(1)	0.364 2(1)	0 [1]	2.858 (9)	−0.362 10(7)	0.546 313
1 [1]	2.270 (6)	−0.241 3(6)	0.364 2(1)	1 [1]	3.85(6)	−0.362 (0)	0.546 3(2)
2 [2]	3.27(0)	−0.241 (8)	0.364 (0)	2 [2]	4.85(9)	−0.362 (2)	0.54(6)
	3.270 57(4)	−0.241 4(6)	0.364 2(1)		4.8(5)	−0.363 (6)	0.58(3)
3 [3]	4.270 5(6)	−0.241 3(9)	0.364 2(1)	3 [3]	5.85(9)	−0.362 (2)	0.54(6)
	4.27(0)	−0.241 (7)	0.364 (1)		5.85(7)	−0.36(3)	0.54(2)
	4.2(7)	−0.2(4)	0.36(6)		5.8(7)	−0.3(6)	0.551 (2)
4 [5]	5.270 (6)	−0.241 37(2)	0.36(4)	4 [5]	6.85(9)	−0.362 (2)	0.54(6)
	5.270 (2)	−0.241 5(5)	0.364 (2)		6.85(8)	−0.363 (3)	0.54(3)
	5.27(0)	−0.263 (0)	0.36(4)		6.8(6)	−0.3(6)	0.54(9)
	5.(3)	−0.(3)	0.3(7)		6.8(7)	−0.3(6)	0.55(1)
	5.2(7)	−0.2(4)	0.36(6)		7.(0)	−(0)	0.5(5)
5 [7]	6.2(7)	−0.23(8)	0.3(6)	5 [7]	7.85(8)	−0.36(2)	0.54(5)
					8.(0)	−0.(5)	0.5(5)
Erwartung	1.270 594+r	[−0.241 40]	0.364 209		2.858 836+r	[−.362 10]	0.546 313

Tabelle 5. Wie Tabelle 5 mit $m = 2$ und $m = \frac{5}{2}$.

	$m=2$				$m=\frac{5}{2}$		
r	R^2m^2+r	$2R^2mx$	$2R^2my$	r	R^2m^2+r	$2R^2mx$	$2R^2my$
0 [1]	5.082 (3)	−0.482 8(2)	0.728 (4)	0 [1]	7.9(4)	−0.60(4)	0.9(1)
1 [1]	6.0(8)	−0.483 (2)	0.72(8)	1 [1]	8.6(4)	−0.60(4)	0.8(9)
2 [2]	7.08(0)	−0.48(3)	0.72(7)	2 [2]	9.9(6)	−0.(6)	0.9(2)
	7.0(6)	−0.48(5)	0.74(1)		9.9(8)	−0.(6)	0.92(0)
3 [3]	8.0(9)	−0.4(8)	0.73(2)				
	8.0(9)	−0.4(81)	0.73(0)				
	8.1(1)	−0.(5)	0.73(6)				
Erwartung	5.082 375+r	[−0.482 80]	0.728 418		7.941 211+r	[−0.603 5]	0.910 522

Tabelle 6. Wie Tabelle 5 mit $m = 3$.

		$m = 3$	
r	$R^2m^2 + r$	$2R^2mx$	$2R^2my$
0 [1]	11.4(8)	−0.72(3)	1.0(9)
Erwartung	11.435 343+r	[−0.724 2]	1.092 627

Tabelle 7. Aus dem Grundzustand E_0 extrapolierte Werte für c (3.49).

$\beta \setminus \alpha$	1.5	1.3	1.1	0.9	0.7	0.5	0.3
0.1	2.6(5)	2.7(5)	2.9(6)	3.3(1)	3.9(1)	4.979(8)	6.9(7)
0.3	1.08(1)	1.0(9)	1.1(6)	1.2(7)	1.49(6)	1.973(8)	
0.5	1.02(6)	1.01(4)	1.002(2)	1.004(1)	1.059(2)		
0.7	1.20(3)	1.16(6)	1.11(3)	1.0(5)			
0.9	1.4(0)	1.3(5)	1.26(7)				
1.1	1.5(6)	1.4(9)					
1.3	1.6(7)						

Tabelle 8. Extrapolanten für R^2x in Abhängigkeit von α und β.

$\beta \setminus \alpha$	1.5	1.3	1.1	0.9	0.7	0.5	0.3
0.1	−0.29(9)	−0.30(9)	−0.32(5)	−0.35(2)	−0.39(3)	−0.45900	−0.565(6)
0.3	−0.06(8)	−0.07(8)	−0.09(4)	−0.12(1)	−0.1(6)	−0.22735	
0.5	0.0379(7)	0.02806	0.01165	−0.01467	−0.05601		
0.7	0.102(5)	0.092(6)	0.076(2)	0.049(9)			
0.9	0.14(3)	0.13(3)	0.11(7)				
1.1	0.17(0)	0.16(0)					
1.3	0.18(6)						

Tabelle 9. Die zentrale Ladung bestimmt aus dem Grundzustand E'_0 (3.50).

$\beta \setminus \alpha$	1.5	1.3	1.1	0.9	0.7	0.5	0.3
0.1	0.9(5)	0.9(3)	0.9(5)	0.9(6)	0.9(8)	1.000(3)	0.9(2)
0.3	0.99(2)	0.9(8)	0.9(9)	0.9(9)	0.99(7)	0.997(4)	
0.5	0.99(9)	0.99(9)	0.999(6)	1.000(0)	1.000(0)		
0.7	1.00(5)	1.00(4)	1.00(3)	1.0(0)			
0.9	1.0(1)	1.0(1)	1.00(6)				
1.1	1.0(1)	1.0(1)					
1.3	1.0(1)						

Tabelle 10. Die freie Oberflächenenergie f_∞ in Abhängigkeit von α und β.

$\beta \setminus \alpha$	1.5	1.3	1.1	0.9	0.7	0.5	0.3
0.1	0.4959(9)	0.30(9)	0.123(1)	−0.06(4)	−0.25(6)	−0.4631(0)	−0.71(0)
0.3	0.9086(1)	0.722(0)	0.535(8)	0.348(6)	0.1564(6)	−0.050216(5)	
0.5	1.15624(0)	0.96957(1)	0.78344(0)	0.596234(5)	0.4040372		
0.7	1.362(8)	1.176(2)	0.9900(9)	0.8028(9)			
0.9	1.555(0)	1.368(4)	1.18(2)				
1.1	1.742(2)	1.555(6)					
1.3	1.928(3)						

Tabelle 11. Extrapolierte Imaginärteile $\mathcal{I}_r^m$ mit $m = 1$, $r = 0$ dividiert durch den analytisch bestimmten Wert von Gwa und Spohn aus (4.39).

$\beta \setminus \alpha$	1.5	1.3	1.1	0.9	0.7	0.5	0.3
0.1	1.00(0)	1.00(0)	1.00(0)	1.00(0)	1.000(2)	0.9999(9)	1.00(0)
0.3	1.000(1)	1.000(1)	1.000(1)	1.000(1)	1.000(1)	0.9999(9)	
0.5	0.9999(9)	0.9999(9)	0.99999(9)	0.99999(9)	0.99999(9)		
0.7	0.999(9)	0.999(9)	0.999(9)	0.999(9)			
0.9	0.999(8)	0.999(8)	0.999(9)				
1.1	0.999(8)	0.999(8)					
1.3	0.999(8)						

Anhang A. Zustandsumme des periodischen Spielzeugmodells

Zur Bestimmung der Zustandssumme des periodischen Spielzeugmodells kann man die erlaubten Fermionimpulse k aus (5.28) bzw. (5.29) wie folgt parametrisieren:

N gerade

N_f gerade

(1)	$\frac{N}{2}$gerade:	$k = \pm(\frac{\pi}{2} - \frac{2j+1}{N}\pi), \quad \pm(\frac{\pi}{2} + \frac{2j+1}{N}\pi)$	$0 \leq j \leq \frac{N-4}{4}$	
(2)	$\frac{N}{2}$ungerade:	$k = \pm(\frac{\pi}{2} - \frac{2l+2}{N}\pi), \quad \pm(\frac{\pi}{2} + \frac{2j}{N}\pi)$	$0 \leq j \leq \frac{N-2}{4}$,	$0 \leq l \leq \frac{N-6}{4}$

N_f ungerade

(3)	$\frac{N}{2}$gerade:	$k = 0, \pm(\frac{\pi}{2} - \frac{2l+2}{N}\pi), \quad \pm(\frac{\pi}{2} + \frac{2j}{N}\pi), \pi$	$0 \leq j \leq \frac{N-4}{4}$,	$0 \leq l \leq \frac{N-8}{4}$
(4)	$\frac{N}{2}$ungerade:	$k = 0, \pm(\frac{\pi}{2} - \frac{2j+1}{N}\pi), \quad \pm(\frac{\pi}{2} + \frac{2j+1}{N}\pi), \pi$	$0 \leq j \leq \frac{N-6}{4}$	

N ungerade

N_f gerade

(5)	$\frac{N-1}{2}$gerade:	$k = \pm(\frac{\pi}{2} - \frac{2j+\frac{3}{2}}{N}\pi), \pm(\frac{\pi}{2} + \frac{2j+\frac{1}{2}}{N}\pi), \pi$	$0 \leq j \leq \frac{N-5}{4}$	
(6)	$\frac{N-1}{2}$ungerade:	$k = \pm(\frac{\pi}{2} - \frac{2l+\frac{1}{2}}{N}\pi), \pm(\frac{\pi}{2} + \frac{2j+\frac{3}{2}}{N}\pi), \pi$	$0 \leq j \leq \frac{N-7}{4}$,	$0 \leq l \leq \frac{N-3}{4}$

N_f ungerade

(7)	$\frac{N-1}{2}$gerade:	$k = 0, \pm(\frac{\pi}{2} - \frac{2j+\frac{1}{2}}{N}\pi), \quad \pm(\frac{\pi}{2} + \frac{2j+\frac{3}{2}}{N}\pi)$	$0 \leq j \leq \frac{N-5}{4}$	
(8)	$\frac{N-1}{2}$ungerade:	$k = 0, \pm(\frac{\pi}{2} - \frac{2l+\frac{3}{2}}{N}\pi), \quad \pm(\frac{\pi}{2} + \frac{2j+\frac{1}{2}}{N}\pi)$	$0 \leq j \leq \frac{N-3}{4}$,	$0 \leq l \leq \frac{N-7}{4}$

Durch diese Parametrisierung erhält man mit $\xi = u$ für die $\Lambda_k = u\cos(k) + iv\sin(k)$ mit $|k| \geq \frac{\pi}{2}$ und k in der Nähe von $\frac{\pi}{2}$

$$\lim_{N\to\infty} \frac{N}{2\pi\xi}\Lambda = -(j + \frac{1}{2} - \epsilon_{(i)}) \pm b, \quad 0 \leq j \tag{A.1}$$

und für die Λ_k mit $|k| < \frac{\pi}{2}$

$$\lim_{N\to\infty} \frac{N}{2\pi\xi}\Lambda = (j + \frac{1}{2} + \epsilon_{(i)}) \pm b, \quad 0 \leq j \tag{A.2}$$

wobei

$$\epsilon_{(1,4)} = 0, \quad \epsilon_{(2,3)} = \frac{1}{2}, \quad \epsilon_{(5,8)} = \frac{1}{4}, \quad \epsilon_{(6,7)} = -\frac{1}{4} \tag{A.3}$$

und

$$b = \frac{iNv}{2\pi u} \quad . \tag{A.4}$$

Summiert man nun für die verschiedenen Fälle alle Energien mit negativem Realteil, unabhängig von der erlaubten Fermionzahl N_f, so erhält man mit

$$-2u\sum_{j=0}^{x} \sin(\frac{2j+s}{N}\pi) = u\frac{\cos(\frac{2x+s+1}{N}\pi) - \cos(\frac{s-1}{N}\pi)}{\sin(\frac{\pi}{N})} \tag{A.5}$$

im Fall (i) den Energiewert $E_{(i)}$:

$$E_{(1,4)} = -\frac{u}{\sin(\frac{\pi}{N})}, \quad E_{(2,3)} = -\frac{u\cos(\frac{\pi}{N})}{\sin(\frac{\pi}{N})}, \quad E_{(5,6,7,8)} = -\frac{u\cos(\frac{\pi}{2N})}{\sin(\frac{\pi}{N})} \quad . \tag{A.6}$$

Dabei ist $E_{(1,4)}$ die Grundzustandsenergie E_0 des Hamiltonoperators. Daraus ergibt sich für $\Delta_{(i)} = \frac{N}{2\pi\xi}(E_{(i)} - E_0)$ und $N \to \infty$:

$$\Delta_{(1,4)} = 0, \quad \Delta_{(2,3)} = \frac{1}{4}, \quad \Delta_{(5,6,7,8)} = \frac{1}{16} \quad . \tag{A.7}$$

Weitere Energien des Systems erhält man nun in den Fällen (1)-(4) durch eine gerade Zahl von An- und Abregungen relativ zu $E_{(i)}$ und durch eine ungerade Anzahl in den Fällen (5)-(8). Dabei muß offensichtlich nicht zwischen (1) und (4), (2) und (3), (5) und (8) bzw. (6) und (7) unterschieden werden. Aus der Dreifachproduktidentität von Jacobi

$$\prod_{i=1}^{\infty}(1 + z^{i-\frac{1}{2}}\omega^{-1})(1 + z^{i-\frac{1}{2}}\omega)(1 - z^i)^{-1} = \sum_{m\in Z} z^{\frac{m^2}{2}}\omega^m \tag{A.8}$$

ergibt sich die hier benötigte Gleichung

$$\begin{aligned} & z^{\Delta}\prod_{i=0}^{\infty}(1 + z^{i+\frac{1}{2}}z^{b-\epsilon}\omega^{-1})(1 + z^{i+\frac{1}{2}}z^{-b+\epsilon}\omega)(1 + z^{i+\frac{1}{2}}z^{-b-\epsilon}\omega^{-1})(1 + z^{i+\frac{1}{2}}z^{b+\epsilon}\omega) \\ = \quad & z^{\Delta}[\sum_{\substack{r\in 2Z\\ m\in Z}} z^{\frac{r^2}{4}+(m+b)^2+r\epsilon-b^2}\omega^r + \sum_{\substack{r\in 2Z+1\\ m\in Z+1/2}} z^{\frac{r^2}{4}+(m+b)^2+r\epsilon-b^2}\omega^r]\prod_{i=1}^{\infty}(1 - z^i)^{-2} \quad . \end{aligned} \tag{A.9}$$

Dabei gibt r die Zahl der angeregten Fermionen relativ zu $E_{(i)}$ an. Bei der Bestimmung der Zustandsumme ist also für die verschiedenen Fälle (1)-(8) nur jeweils eine der Summen aus (A.9) auszuwählen. Der Spin n eines Zustandes ist durch $n = N_f - \frac{N}{2}$ mit der absoluten Zahl angeregter Fermionen verknüpft. Daraus folgt in den einzelnen Fällen

$$(1,4) \quad n = r, \quad (2,3) \quad n = r + 1, \quad (5,8) \quad n = r + \frac{1}{2}, \quad (6,7) \quad n = r - \frac{1}{2}. \tag{A.10}$$

Ferner gilt in allen Fällen

$$\frac{n^2}{4} = \frac{r^2}{4} + r\epsilon + \Delta \quad . \tag{A.11}$$

Absorbiert man den Term b^2 in die Grundzustandsenergie folgt für große N

$$E_0' = E_0 - \frac{2\pi u}{N}b^2 \approx -\frac{(2u^2 - v^2)N}{2\pi u} - \frac{u\pi}{6N} \quad . \tag{A.12}$$

Aus (A.9) ergibt sich damit die folgende Zustandsumme:

$$\mathcal{Z} = z^{\frac{1}{12}}[\sum_{\substack{n\in Z\\ m\in Z}} z^{\frac{n^2}{4}+(m+b)^2} + \sum_{\substack{n\in Z+1/2\\ m\in Z+1/2}} z^{\frac{n^2}{4}+(m+b)^2}]\prod_{i=1}^{\infty}(1 - z^i)^{-2} \quad . \tag{A.13}$$

Die erste Summe folgt aus dem Spektrum für gerade Kettenlängen, während sich der zweite Anteil aus den Energien bei ungerader Anzahl von Gitterplätzen ergibt.

Literatur

[1] Kadanoff L.P., Swift J. 1968 *Phys. Rev.* **165** 310

[2] Derrida B., Domany E., Mukamel D. 1992 *J.Stat.Phys* **69** 667

[3] Derrida B., Evans M.R., Hakim V., Pasquier V. 1993 *J. Phys. A: Math. Gen.* **26** 1493

[4] Schütz G., Domany E. 1993 *J.Stat.Phys* **72** 277

[5] Sandow S. 1994 *Phys. Rev.* **E50** 2660

[6] Eßler H.L., Rittenberg V. 1995 Preprint condmat/9506131

[7] Gwa L., Spohn H. 1992 *Phys.Rev.A* **46** 844

[8] Noh J.D., Kim D. 1995 *Phys.Rev.E* **53** 3225

[9] Kim D. 1995 *Phys.Rev.E* **52** 3512

[10] de Vega H.J., Gonzales-Ruiz A. 1994 *J. Phys. A: Math. Gen.* **27** 6129

[11] Inami T., Konno H. 1994 *J. Phys. A: Math. Gen.* **27** L913

[12] Kogut J.B., *Rev. Mod. Phys.* 1979 **51** 659

[13] Fan C., Wu F.Y. 1970 *Phys.Rev.B* **2** 723

[14] Sutherland B. 1967 *Phys. Rev. Lett.* **19** 103

[15] Lieb E., Wu F.Y. 1972 in *Phase Transitions and Critical Phenomena* Vol.1 (Academic Press: London)

[16] Nolden I.M. 1992 *J.Stat.Phys* **67** 155

[17] Belavin A.A., Polyakov A.M., Zamolodchikov A.B. 1984 *Nucl. Phys.* B **241** 333

[18] Cardy J.L. 1984 *Nucl. Phys.* B **240** 514

[19] Cardy J.L. 1986 *Nucl. Phys.* B **275** 200

[20] Cardy J.L. 1986 *Nucl. Phys.* B **270** 186

[21] Cardy J.L. 1984 *J. Phys. A: Math. Gen.* **16** L385

[22] Cardy J.L. 1988 in *Fields, Strings and Critical Phenomena* Les Houches 1988 (North-Holland: Amsterdam)

[23] Alcaraz F.C., Baake M., Grimm U., Rittenberg V. 1988 *J. Phys. A: Math. Gen.* **21** L117

[24] Hamer C.J., Quispel G.R.W., Batchelor M.T. 1987 *J. Phys. A: Math. Gen.* **20** 5677

[25] Hamer C.J., Batchelor M.T. 1988 *J. Phys. A: Math. Gen.* **21** L173

[26] Alcaraz F.C., Wreszinski W.F. 1990 *J.Stat.Phys* **58** 45

[27] Alcaraz F.C., Barber M.N., Batchelor M.T., Baxter R.J., Quispel G.R.W. 1987 *J. Phys. A: Math. Gen.* **20** 6397

[28] Alcaraz F.C., Barber M.N., Batchelor M.T. 1988 *Ann.Phys* **182** 280

[29] Alcaraz F.C., Barber M.N., Batchelor M.T. 1987 *Phys. Rev. Lett.* **58** 771

[30] Nienhuis B. 1987 in *Phase Transitions and Critical Phenomena* Vol.11 (Academic Press: London)

[31] Ginsparg P. 1988 in *Fields, Strings and Critical phenomena* Les Houches 1988 (North-Holland: Amsterdam)

[32] Albertini G., Dahmen S.R., Wehefritz B. 1995 Preprint condmat/9509026

[33] Saad Y.,1980 *Linear Algebra Appl.* **34** 269

[34] Saad Y.,1981 *Math. Comp.* **37** 105

[35] Saad Y.,1992 *Numerical Methods for Large Eigenvalue Problems* (Manchester University Press)

[36] Yildirim K., 1995 *Diplomarbeit*, BONN-IB-95-02

[37] Yang C.N., Lee T.D. 1952 *Phys. Rev.* **87** 404

[38] Lee T.D., Yang C.N. 1952 *Phys. Rev.* **87** 410

[39] Cardy J.L. 1985 *Phys. Rev. Lett.* **54** 1354

[40] Pasquier V. und Saleur H. 1990 *Nucl. Phys.* B **330** 523

[41] von Gehlen G. 1994 *Int. J. Mod. Phys.* **8** 3507

[42] Bilstein U., Wehefritz B. *in Vorbereitung*

[43] Alcaraz F.C., Droz M., Henkel M., Rittenberg V. 1994 *Ann. Phys., NY* **230** 250

[44] Affleck I. 1986 *Phys. Rev. Lett.* **56** 746

[45] Blöte H.W.J., Cardy J.L., Nightingale M.P. 1986 *Phys. Rev. Lett.* **56** 742

[46] Virasoro M.A., 1970 *Phys. Rev.* D **1** 2933

[47] Corrigan E. 1986 *Phys. Lett.* **169B** 259

[48] Goddard P., Olive D. 1986 *Int.J.Mod.Phys. A* **1** 303

[49] Kac V. 1979 *Lecture Notes in Mathematics* **94** 444

[50] Lieb E., Schultz T., Mattis D. 1961 *Ann.Phys.* **16** 407

[51] Dahmen S.R., Wehefritz B. *unveröffentlicht*

[52] Dahmen S.R., 1991 *Diplomarbeit*, UFSCAR/Brasilien

[53] Stoer J., Burlisch R. 1990 *Numerische Mathematik 2* (Springer: Berlin)

[54] Stoer J. 1979 *Einführung in die Numerische Mathematik 1* (Springer: Berlin)

[55] Bunse W.,Bunse-Gerstner A. 1985 *Numerische lineare Algebra* (Teubner: Stuttgart)

[56] Lanczos C. 1950 *J. Res. Nat. Bur. Stand.* **45** 255

[57] Burlisch R., Stoer J. 1964 *Numer. Math.* **6** 413

[58] Henkel M., Schütz G. 1988 *J. Phys. A: Math. Gen.* **21** 2617

[59] Christe P. und Henkel M. 1992 *Introduction to Conformal Invariance and its Application to Critical Phenomena*, Lecture Notes in Physics, (Springer: Berlin)

[60] Wolfram S. 1991 *Mathematica: A System for Doing Mathematics by Computer* (Addison-Wesley: Redwood City)