Inhaltsverzeichnis

1 Einleitung

Das chirale Potts–Modell kann entweder als 2–dimensionales Gittermodell oder als 1–dimensionale Spin–Quantenkette betrachtet werden. 1981 [69][58] wird es zur Beschreibung von Phasenübergängen zwischen kommensurablen und inkommensurablen Phasen physisorbter Systeme (z. B. eine einlagige Krypton–Schicht auf einer Graphit–Oberfläche [30]) als 2–dimensionales $\mathbb{Z}_3$–symmetrisches chirales Potts–Modell eingeführt; der assozierte Quantenketten–Hamilton–Operator [62][18] durch zeitliche τ–Kontinuumsgrenzwertbildung [59] kurz danach. Weil das Modell nicht selbstdual ist, erfolgt die Bestimmung der kritischen Mannigfaltigkeit numerisch. 1983 [57] erhält man die erste selbstduale $\mathbb{Z}_3$–symmetrische Spin–Quantenkette, die allerdings im 2–dimensionalen Modell im allgemeinen nicht zu positiven Boltzmann–Gewichten korrespondiert. Dennoch gibt es realistische physikalische Systeme, die durch dieses Modell beschrieben werden können, z. B. magnetische Fäden. Auch bietet es wegen seiner speziellen mathematischen Struktur großes Interesse : der niedrigste Gap (des selbstdualen Modells) ist *linear* in der inversen Temperatur [57]. In [39] wird gezeigt, daß dies verknüpft ist mit einem Hamilton–Operator, der die Dolan–Grady–Integrabilitätsbedingungen (Loop–Algebra Integrabilität) [24] — oder äquivalent [23][22] die Onsager–Algebra [68] — erfüllt; dieses wird unter anderem in [39] für $\mathbb{Z}_n$–Modelle verallgemeinert. Diese Integrabilitätsbedingungen — jetzt auch Superintegrabilität genannt — führen zu der bemerkenswerten Tatsache, daß alle Eigenwerte die spezielle Ising–artige Form besitzen. Der Hamilton–Operator für $\mathbb{Z}_n$–symmetrische Spin–Quantenketten (oder Logarithmus der Transfer–Matrix des 2–dimensionalen Systems), welcher ebenfalls im allgemeinen nicht positive Boltzmann–Gewichte besitzt, sieht wie folgt aus [39] :

$$\mathcal{H}_N^{(n)} := -\sum_{j=1}^{N}\sum_{k=1}^{n-1}\left(\alpha_k\sigma_j^k + \lambda\beta_k\Gamma_j^k\Gamma_{j+1}^{n-k}\right) \tag{1}$$

Hierbei bedeuten N die Anzahl der Gitterpunkte und σ_j und Γ_j sind n–dimensionale Operatoren, die im Vektorraum $\otimes^N\mathbb{C}^n$ lokal nur am Gitterpunkt j wirken (die $\mathbb{Z}_n$–Verallgemeinerungen der $\mathbb{Z}_2$–Pauli–Matrizen σ^z bzw. σ^x) und die Relationen

$$\sigma_j\sigma_l = \sigma_l\sigma_j, \quad \sigma_j\Gamma_l = \Gamma_l\sigma_j\omega^{\delta_{j,l}}, \quad \sigma_j^n = \Gamma_j^n = \mathbf{1}, \quad \Gamma_j^\dagger = \Gamma_j^{n-1}, \quad \sigma_j^\dagger = \sigma_j^{n-1}, \quad \omega = e^{\frac{2\pi i}{n}} \tag{2}$$

erfüllen. Dabei sind σ_j und Γ_j Tensorprodukte mit der möglichen Darstellung :

$$\sigma_j := \underbrace{\mathbf{1}\otimes\ldots\otimes\mathbf{1}}_{j-1 \text{ mal}}\otimes\begin{pmatrix} 1 & 0 & \ldots & \ldots & 0 \\ 0 & \omega & \ddots & & \vdots \\ \vdots & \ddots & \omega^2 & \ddots & \vdots \\ \vdots & & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \ldots & \ldots & 0 & \omega^{n-1} \end{pmatrix}\otimes\underbrace{\mathbf{1}\otimes\ldots\otimes\mathbf{1}}_{N-j \text{ mal}}$$

$$\Gamma_j := \underbrace{\mathbf{1}\otimes\ldots\otimes\mathbf{1}}_{j-1 \text{ mal}}\otimes\begin{pmatrix} 0 & \cdots & \cdots & 0 & 1 \\ 1 & \ddots & & & 0 \\ 0 & \ddots & \ddots & & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}\otimes\underbrace{\mathbf{1}\otimes\ldots\otimes\mathbf{1}}_{N-j \text{ mal}}$$

Die $\mathbb{Z}_2$–Version von (1) stellt das Standard–Ising–Modell dar.

Dieser Hamilton–Operator enthält $2n-1$ Parameter. Die inverse Temperatur λ sollte dabei reell sein, während die Kopplungskonstanten α_k und β_k im allgemeinen komplex sind; eine spezielle Parametrisierung durch nur zwei Parameter lautet :

$$\alpha_k := \frac{e^{i\varphi(\frac{2k}{n}-1)}}{\sin(\frac{\pi k}{n})}, \qquad \beta_k := \frac{e^{i\Phi(\frac{2k}{n}-1)}}{\sin(\frac{\pi k}{n})} \tag{3}$$

$\mathcal{H}_N^{(n)}$ ist genau dann *hermitesch*, wenn gilt :

$$\alpha_k = \overline{\alpha}_{n-k} \quad \text{und} \quad \beta_k = \overline{\beta}_{n-k} \tag{4}$$

Genügen die Parameter der Relation (Integrabilitätsbedingung)

$$\cos(\varphi) = \lambda \cos(\Phi), \tag{5}$$

so ist $\mathcal{H}_N^{(n)}$ *integrabel* nach einer neuen Art von Yang–Baxter–Gleichungen mit spektralen Parametern, die auf Riemannschen Flächen mit hohem Genus $(n^2(n-2)+1)$ [7] [71][8][9][12][11] definiert sind.

Mit Ausnahme des superintegrablen Falles, der in (5) für $\Phi = \varphi = \frac{\pi}{2}$ enthalten ist, und der $\lambda = 1$–Linie, auf der der *konforme* Potts–Punkt ($\varphi = \Phi = 0, \lambda = 1$) sowie dessen "Pendant"punkt ($\varphi = \Phi = \pi, \lambda = 1$) liegen, zwingen diese Gleichungen $\mathcal{H}_N^{(n)}$ dazu, nicht selbstdual ($\Phi = \varphi$) zu sein.

Aufbau der Arbeit

In dieser Diplomarbeit wird hauptsächlich der nicht–hermitesche Bereich des chiralen Potts–Modells mit $\mathbb{Z}_3$–Symmetrie für den integrablen Fall untersucht.

In Abschnitt 2 wird zunächst gezeigt, wie das integrable $\mathbb{Z}_3$–Modell analytisch fortsetzbar ist (2.2) und anschließend das Spektrum dieses Hamilton–Operators diskutiert (2.5); es läßt sich — wie im hermiteschen Teil des Parameterraumes – als aus $2(= n-1)$ fundamentalen Teilchen (Quasiteilchen) bestehend interpretieren. Die Symmetrien werden in (2.6) dargestellt; auf der hermitesch–nicht–hermiteschen Grenzkurve besteht *Paritätsinvarianz* und im nicht–hermiteschen Bereich ist das Spektrum konjugiert–komplex um Symmetrieimpulse (Impulsspiegelung) angeordnet. Dies gilt auch im oberen nicht–hermiteschen Bereich, wobei man dort eine ladungsabhängige *verschobene* Parität hat (s. in 2.5.2).
Die Dispersionsrelation der fundamentalen Teilchen in den nicht–hermiteschen Bereichen wird wegen *exakter* Symmetrie genauer betrachtet (2.7.1). Ferner wird der Impulsbereich der 1. Brillouin–Zone, auf dem das $Q = 2$–Quasiteilchen (stabil als Einteilchenzustand) existiert, analysiert (2.7.2).

Abschnitt 3 beschäftigt sich mit dem Phasendiagramm des integrablen $\mathbb{Z}_3$–Modells. Dabei wird eine neue numerische Methode zur Bestimmung der massiv–masselosen Phasengrenze in der Hochtemperaturphase vorgestellt; sie liefert sehr genaue Resultate (verbessert die bisherigen Werte um ca. eine Zehnerpotenz).

In Abschnitt 4 werden Energieniveaukreuzungen (angeregter Zustände) auf Grund von *generischen* Entartungen der Eigenwerte im gleichen Q_P–Sektor untersucht und eine Verbindung zum asymmetrischen chiralen Potts–Modell hergestellt.
Die Eigenwertverteilung des integrablen $\mathbb{Z}_3$–Modells wird untersucht.

Abschnitt 5 gibt eine Zusammenfassung der Ergebnisse.

Der Anhang besteht aus Tabellen, Diagrammen und einem mathematischen Teil, in dem u. a. ein Verfahren zur Ermittlung der (extremalen) Eigenwerte nicht–hermitescher Matrizen dargestellt (2.3) und diskutiert (C.3) wird.

2 Analytische Fortsetzung in den nicht–hermiteschen Bereich

2.1 Allgemeines zum chiralen Potts–Modell mit $\mathbb{Z}_n$–Symmetrie; Spezialisierung auf $n = 3$

Mit der $\mathbb{Z}_n$–Symmetrie ist eine Erhaltungsgröße Q verbunden [19], die *Ladung* genannt wird. Sie ist über die Eigenwerte des $\mathbb{Z}_n$–*Ladungs*operators $\mathcal{Q}$ definiert.

$$\mathcal{Q} := \prod_{j=1}^{N} \sigma_j \tag{6}$$

$\mathcal{Q}$ hat die Eigenwerte ω^Q; die korrespondierenden Eigenräume heißen *Ladungssektoren* $Q \in \{0,(1),n-1\}$. $\mathcal{H}_N^{(n)}$ kommutiert *unabhängig* von der Wahl der Kopplungskonstanten α_k und β_k nur auf Grund der Algebra (2) mit $\mathcal{Q}$.

Dieses Modell ist für verschiedene toroidale *Randbedingungen* formulierbar (wobei die $\mathbb{Z}_n$–Symmetrie erhalten bleibt) : $\Gamma_{N+1} := \omega^R \Gamma_1$ bzw. konjugiert komplex $\Gamma_{N+1} := \omega^{-R}\Gamma_1^\dagger, R \in \{0,(1),n-1\}$; freie Randbedingung bedeutet : $\Gamma_{N+1} := \mathbf{0}$.

$\mathcal{H}_N^{(n)}$ kommutiert auch mit dem *Translations*operator $\mathcal{V}_N$; die Eigenwerte von $\mathcal{V}_N$ sind die N–ten Einheitswurzeln, $e^{i\frac{2\pi}{N}P}$, wobei P der *Impuls* ist. Für eine Kettenlänge N hat man $P \in \{0,(1),N-1\}$. $\mathcal{V}_N$ wirkt auf die, gewöhnlich im $\otimes^N \mathbb{C}^n$–Vektorraum mit der Standardbasis des $\mathbb{C}^n$ ($\{e_1,\ldots,e_n\}$) dargestellten, *Ladungs*eigenzustände (7) (dabei ist i_j die Spinvariable am j–ten Gitterpunkt)

$$|i_1 \ldots i_N > := e_{i_1+1} \otimes \ldots \otimes e_{i_N+1}; \qquad 0 \le i_j \le n-1 \quad \text{mit} \quad \left(\sum_{j=1}^{N} i_j\right) \bmod n = Q \tag{7}$$

wie folgt [42] :

$$\mathcal{V}_N |i_1 \ldots i_N > := |i_N i_1 \ldots i_{N-1}> \tag{8}$$

Die *Impuls*eigenzustände (9) mit Impuls P können demnach aus den Ladungseigenzuständen durch endliche Fourier–Transformation gewonnen werden [42] :

$$\| i_1 \ldots i_N \gg_P := \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{l=0}^{N-1} e^{\frac{2\pi i}{nN} C_l} \mathcal{V}_N^l |i_1 \ldots i_N > \quad \text{mit} \quad C_l := NR \sum_{k=1}^{l} i_k - (RQ + Pn)l \tag{9}$$

$\mathcal{N}$ ist hierbei eine *geeignete* Normierungskonstante; im Falle, daß der Zustand $|i_1 \ldots i_N>$ *keine* Symmetrie aufweist, ist $\mathcal{N} = N$. Translationsinvarianz läßt sich durch geeignete Definition des Translationsoperators auch bei getwisteter Randbedingung erreichen.

Ferner ist der *Paritäts*operator [19] wie folgt definiert :

$$\mathcal{P}\sigma_j\mathcal{P}^\dagger := \sigma_{N-j+1}, \qquad \mathcal{P}\Gamma_j\mathcal{P}^\dagger := \Gamma_{N-j+1} \tag{10}$$

Er hat die Eigenwerte ± 1; die Eigenräume von $\mathcal{P}$ heißen *Paritätssektoren.* — Mit Q_P wird der Sektor der $\mathbb{Z}_n$–Ladung Q bei Impuls P bezeichnet.

Der *Ladungskonjugations*operator [19]

$$\mathcal{C} := \prod_{j=1}^{N} c_j \qquad \text{mit} \quad c_j := \begin{pmatrix} 1 & 0 & \ldots & \ldots & 0 \\ 0 & 0 & \ldots & 0 & 1 \\ \vdots & \vdots & \ddots & 1 & 0 \\ \vdots & 0 & 1 & \ddots & \vdots \\ 0 & 1 & 0 & \ldots & 0 \end{pmatrix}_j$$

$$\mathcal{C}\sigma_j\mathcal{C}^\dagger = \sigma_j^\dagger, \qquad \mathcal{C}\Gamma_j\mathcal{C}^\dagger = \Gamma_j^\dagger \tag{11}$$

besitzt die Eigenwerte ± 1 und transformiert den Ladungssektor $Q = q$ in $\tilde{Q} = (n - q) \bmod n$ und umgekehrt (C–Invarianz *nur*, wenn gleiche Eigenwerte der Ladungssektoren bei *gleichen* Impulsen P vorkommen). Bei C–Invarianz sind die Ladungssektoren, die $Q = \tilde{Q}$ erfüllen, zusätzlich noch nach $\pm$–Parität zerlegbar.

Ferner gilt (nach (10) und (11)) :

$$\mathcal{P}\mathcal{Q}\mathcal{P}^\dagger = \prod_{j=1}^{N} \sigma_{N-j+1} = \prod_{l=1}^{N} \sigma_l = \mathcal{Q}; \qquad \mathcal{C}\mathcal{Q}\mathcal{C}^\dagger = \prod_{j=1}^{N} \sigma_j^\dagger = \mathcal{Q}^\dagger \tag{12}$$

Während der Ladungsoperator $\mathcal{Q}$ unter der Paritätstransformation invariant bleibt, ändert die Ladungskonjugation ihn in den hermitesch konjugierten, den man auch als $\mathbb{Z}_n$–Anti–Ladungsoperator bezeichnen kann, denn seine Eigenwerte sind die konjugiert–komplexen zu denen von $\mathcal{Q}$.

Setzt man im *selbstdualen* Fall $\varphi = 0 = \Phi$ (nicht–chiraler Limes), so erhält man das *paritäts*– und C–invariante *normale* (Standard–)Potts–Modell; sonst ist das *chirale* ($\Phi \neq 0$) selbstduale Modell nicht P–invariant (außer für $\lambda = 0$) und nicht C–invariant (s. 2.6). Im nicht–chiralen Grenzwert erhält man Modelle mit einem Phasenübergang 2. Ordnung am selbstdualen Punkt $\lambda = 1$, welche für $N \to \infty$ durch *parafermionische konforme* Feldtheorien [5] mit der zentralen Ladung $c = 2\frac{n-1}{n+2}$ beschrieben werden. Diese sogenannten Fateev–Zamolodchikov–Modelle führen zu erweiterten konformen Algebren $\mathcal{WA}_{n-1}$, in denen die einfachen (primären) Felder die konformen Dimensionen $2, (1), n$ [32] [33] besitzen. Das Spektrum des Hamilton–Operators (1) mit $\varphi = 0 = \Phi$ kann durch die ersten *unitären minimalen* Modelle der $\mathcal{WA}_{n-1}$–Algebra beschrieben werden. Für $n = 3$ fällt dies mit dem 3–Zustands–Potts–Modell zusammen und die Symmetriealgebra ist die wohlbekannte erweiterte Spin 3 konforme Algebra mit der zentralen Ladung $c = \frac{4}{5}$ von Zamolodchikov [83].

Der Hamilton–Operator $\mathcal{H}_N^{(n)}$ läßt sich der *Dualitäts*transformation unterwerfen, die die Algebra (2) invariant läßt [59] :

$$\sigma_j \to \tilde{\sigma}_j := \Gamma_j^\dagger \Gamma_{j+1}, 1 \leq j < N, \qquad \sigma_N \to \tilde{\sigma}_N := \Gamma_N^\dagger, \qquad \Gamma_j \to \tilde{\Gamma}_j := \prod_{l=1}^{j} \sigma_l \tag{13}$$

$$\mathcal{Q} \to \tilde{\mathcal{Q}} := \prod_{l=1}^{N} \sigma_l \equiv \Gamma_1^\dagger \tag{14}$$

Die *massiven* Bereiche $0 \leq \lambda \leq 1$ und $\lambda \geq 1$ lassen sich aufeinander abbilden. Bezeichnet man mit $Q_R(\lambda)$ (der Index steht hier ausnahmsweise für die Randbedingung und nicht wie sonst für den Impuls) den Sektor des Spektrums von $\mathcal{H}_N^{(n)}$ mit der Ladung Q und der Randbedingung R, so gilt die *Dualitätsrelation* [39] :

$$Q_R(\lambda) = \lambda R_Q(\lambda^{-1}) \tag{15}$$

(d. h. [52] : im *Hoch*temperaturbereich ($0 \leq \lambda \leq 1$) ist im Grenzfall $N \to \infty$ die *Randbedingung* R ohne Bedeutung und im *Nieder*temperaturbereich ($\lambda \geq 1$) spielt die *Ladung* Q keine Rolle (n–fach entarteter Grundzustand).)

Auf Grund der Ladungs– und Translationsinvarianz des Hamilton–Operators zerfällt die Matrix H in *Diagonalblöcke*, gemäß den Q_P–Sektoren. Die *Dimension* einer solchen Blockmatrix für eine bestimmte Kettenlänge N, die für verschiedene Q_P–Sektoren im allgemeinen unterschiedlich ist, ist ein zahlentheoretisches Problem, welches mit der symmetrischen Permutationsgruppe verknüpft ist. Da die Symmetrien unabhängig sind, läßt sich als "Richtwert" für die Dimension der Wert $\frac{n^N}{nN} = \frac{n^{N-1}}{N}$ angeben.

Wählt man $\Phi := 0, \varphi$ bel., so gelangt man zum *asymmetrischen* Potts–Modell [38] [82] [31] [18] (der in diesen Referenzen gewählte *hermitesche* Hamilton–Operator ($n = 3$) hat eine andere Normierung und einen zusätzlichen reellen Summanden als (1), was eine Umskalierung und Verschiebung des Spektrums bewirkt). Dieses Modell ist *paritätserhaltend*. In Verbindung mit dem integrablen Potts–Modell wird die Integrabilitätsbedingung (5) auf $\cos(\varphi) = \lambda$ reduziert; d. h. die Untermannigfaltigkeit $(\lambda, \varphi, \Phi) = (\cos(\varphi), \varphi, 0)$ des Parameterraumes bildet die Schnittmenge dieser beiden Modelle (für $n = 3$, s. auch Abschnitte 2.2 und 2.6). In der 2.2 gewählten analytischen Fortsetzung des integrablen $\mathbb{Z}_3$–Modells besitzt das asymmetrische Modell keine Fortsetzung in den nicht–hermiteschen Bereich; dies ist jedoch für das *duale* asymmetrische Modell ($\varphi := 0, \Phi$ bel.) möglich (s. 2.2). Auch für dieses existiert eine Schnittmenge mit dem integrablen Modell auf der hermiteschen Mannigfaltigkeit $(\lambda, \varphi, \Phi) = (\frac{1}{\cos(\Phi)}, 0, \Phi)(\Phi \neq \frac{\pi}{2})$. Die Integrabilität, d. h. die Existenz *unendlich* vieler Erhaltungsgrößen, läßt sich für ein zweidimensionales Spinsystem durch die Forderung nach einer *Einparameterfamilie kommutierender Transfermatrizen* erreichen; dieses ist äquivalent mit der Gültigkeit der Sterndreiecksgleichung für die in der Transfermatrix auftretenden Boltzmanngewichte [7].

Im Potts–Punkt $\lambda = 1, \varphi = \Phi = 0$ besitzt das Modell einen *kontinuierlichen* Phasenübergang *zweiter* Ordnung und ist dort *konform* invariant (zur Einführung in die konforme Feldtheorie (CFT) eignen sich z. B. [49][16]); im Falle $n = 3$ ist die zentrale Ladung $c = \frac{4}{5}$. Diese legt die Gitterkonstante der Zeitrichtung (euklidische Zeit) für das 2–dimensionale System der statistischen Mechanik fest und damit auch die *Normierung* des durch Bildung des extrem anisotropen Kontinuumslimes [59] erhaltenen quantenmechanischen Hamilton–Operators für die eindimensionale Spin–Quantenkette.

Der Hamilton–Operator (1) mit der Parametrisierung (3) und der durch die CFT im kritischen Punkt zu $\frac{2}{\sqrt{3}}$ [41] bestimmte Normierung, die im gesamten Parameterraum beibehalten wird, lautet damit :

$$\mathcal{H} \equiv \mathcal{H}_N^{(3)} := -\frac{2}{\sqrt{3}} \sum_{j=1}^{N} \left(e^{-i\frac{\varphi}{3}} \sigma_j + e^{i\frac{\varphi}{3}} \sigma_j^\dagger + \lambda \left(e^{-i\frac{\Phi}{3}} \Gamma_j \Gamma_{j+1}^\dagger + e^{i\frac{\Phi}{3}} \Gamma_j^\dagger \Gamma_{j+1} \right) \right) \tag{16}$$

Es wird im Folgenden lediglich die Restriktion $(R = 0)$ (*periodische* Randbedingung) betrachtet, was im Zusammenhang mit den in Abschnitt 2.6 diskutierten Symmetrien das Hamilton–Operators (16) (auch) unter den Transformationen (10) und (11) steht.

2.2 Analytische Fortsetzung des Hamilton–Operators für den integrablen Fall

Im Hamilton–Operator (16) sind λ, φ und Φ zunächst unabhängige *reelle* Parameter, woraus folgt, daß dieser stets *hermitesch* ist. Bedingung (5) verknüpft die Parameter in der Weise, daß sich bei Vorgabe zweier der dritte Parameter automatisch ergibt, sofern es eine *reelle* Lösung gibt.

Durch Komplexifizierung der Parameter in (5) (*analytische* Fortsetzung) kann erreicht werden, daß der Hamilton–Operator (16) *nicht*–hermitesch wird. Wegen der Analytizität *bleibt* das Modell integrabel, da die Yang–Baxter–Gleichung weiterhin erfüllt wird.

Unter Beachtung von

$$\begin{aligned} \cos(z) &= \cos(x)\cosh(y) - i\sin(x)\sinh(y) \\ \text{wobei} \qquad z &= x + iy \qquad \text{mit} \qquad x, y \in \mathbb{R} \end{aligned} \tag{17}$$

lautet die allgemeinste komplexe Version von (5)

$$\cos(\varphi_x)\cosh(\varphi_y) - i\sin(\varphi_x)\sinh(\varphi_y) = (\lambda_x + i\lambda_y)(\cos(\Phi_x)\cosh(\Phi_y) - i\sin(\Phi_x)\sinh(\Phi_y))$$

welches ein Gleichungssystem von 2 Gleichungen (Re– und Im–Teil) mit 6 Unbekannten ist

$$\begin{aligned} \lambda_x \cos(\Phi_x)\cosh(\Phi_y) + \lambda_y \sin(\Phi_x)\sinh(\Phi_y) &= \cos(\varphi_x)\cosh(\varphi_y) \\ -\lambda_x \sin(\Phi_x)\sinh(\Phi_y) + \lambda_y \cos(\Phi_x)\cosh(\Phi_y) &= -\sin(\varphi_x)\sinh(\varphi_y) \end{aligned} \tag{18}$$

Weil λ proportional zur inversen Temperatur bleiben soll, sollte der Definitionsbereich für diesen Parameter reell und nicht–negativ sein (außerdem zeigt eine numerische Rechnung, daß bei komplexem λ der *Grund*zustand komplex wird und es auch im *unendlichen* System bleibt (lediglich die freie Energiedichte, d. h. der Quotient von Grundzustandsenergie und Kettenlänge, konvergiert gegen einen (komplexen) Wert); dies ist *physikalisch* nicht akzeptabel). Ferner soll der fortgesetzte Hamilton–Operator bei $\lambda = 0$ mit dem ursprünglichen (16) identisch sein, woraus folgt :

$$\varphi_y := 0, \quad \varphi_x := \varphi$$

Weil weitere Restriktionen nicht existieren, aber (18) *ein*deutig lösbar sein sollte, sei φ immer rein reell; damit ergibt sich :

$$\cos(\varphi) = \lambda \cos(\Phi) \qquad \text{mit} \qquad \lambda \in \mathbb{R}_0^+, \varphi \in [0, \pi], \Phi \in \mathbb{C} \tag{19}$$

Da φ *reell* gewählt ist, ist der *Diagonal*teil von $\mathcal{H}$ immer *hermitesch*. D. h., bei dieser Wahl der Definitionsbereiche für die angegebenen Parameter genügt es, zu untersuchen, in welchen Fällen der *Wechsel*wirkungsteil des Hamilton–Operators nicht–hermitesch wird.

Damit dieser nicht–hermitesch wird, muß zunächst gelten ((19) umformen ($\lambda \neq 0$)) :

$$\cos(\Phi) = \frac{\cos(\varphi)}{\lambda} \in \mathbb{R}\backslash[-1, 1] \qquad \Rightarrow \qquad 0 < \lambda < 1$$

($\lambda = 0$ bedeutet, daß der Wechselwirkungsteil verschwindet und daher $\mathcal{H}$ hermitesch ist.)

Die Periodizität der cos–Funktion erlaubt eine Einschränkung des Definitionsbereichs für den Wechselwirkungswinkel : $\Phi \in [0, \pi] \times \mathbb{R}$.

An dieser Stelle sieht man, daß eine “duale” Wahl der Parameterbereiche für die beiden Winkel, also $\varphi \in [0, \pi] \times \mathbb{R}$ und $\Phi \in [0, \pi]$, bewirken würde, daß der Bereich für λ damit ebenfalls dual festgelegt wäre, d. h. $1 < \lambda < \infty$.

Mit der Wahl eines reellen φ schränkt man gegebenenfalls den Bereich für λ weiter ein und legt $\Phi := x + iy$ fest; dazu sind nun zwei Fallunterscheidungen zu betrachten :

1) $\varphi := 0 \quad$ d. h. $\quad 1 = \lambda \cos(\Phi)$
   $\lambda := 1 \quad \Rightarrow \quad \cos(\Phi) = 1 \quad \Rightarrow \quad \Phi = x = 0$ (reell)
   $0 < \lambda < 1 \quad \Rightarrow \quad \cos(\Phi) > 1 \quad \Longleftrightarrow \quad (\cos(x) \underbrace{\cosh(y)}_{\geq 1} > 1 \quad \wedge \quad \sin(x)\sinh(y) = 0)$
   die zweite Bedingung erfordert : $y = 0 \quad \vee \quad x \in \{0, \pi\}$
   da die erste Bedingung > 1 sein soll, muß cosh > 1 sein, also $y \neq 0$
   ferner erfordert diese Bedingung auch, daß $\cos(x) > 0 \quad \Rightarrow \quad x \in [0, \frac{\pi}{2}[$
   insgesamt folgt : $(x = 0 \quad \wedge \quad y \neq 0) \qquad \Rightarrow \quad \Phi = iy \neq 0$ (rein imaginär)
   Der Wechselwirkungsteil von $\mathcal{H}$ sieht dann wie folgt aus (mit $y \neq 0$) :

$$\tilde{\mathcal{H}}_{WW} := \sum_{j=1}^{N} \left(e^{\frac{y}{3}} \Gamma_j \Gamma_{j+1}^\dagger + e^{-\frac{y}{3}} \Gamma_j^\dagger \Gamma_{j+1} \right), \qquad \tilde{\mathcal{H}}_{WW}^\dagger = \sum_{j=1}^{N} \left(e^{\frac{y}{3}} \Gamma_j^\dagger \Gamma_{j+1} + e^{-\frac{y}{3}} \Gamma_j \Gamma_{j+1}^\dagger \right)$$

   $\tilde{\mathcal{H}}_{WW}$ ist *nicht–hermitesch* für $0 < \lambda < 1$.
   Falls $\varphi \in]0, \frac{\pi}{2}[$ ist dies analog zu diesem Fall für $0 < \lambda := \cos(\varphi) < 1$.

2) $\varphi := \pi \quad$ d. h. $\quad -1 = \lambda \cos(\Phi)$
   $\lambda := 1 \quad \Rightarrow \quad \cos(\Phi) = -1 \quad \Rightarrow \quad \Phi = x = \pi$ (reell)
   $0 < \lambda < 1 \quad \Rightarrow \quad \cos(\Phi) < -1 \quad \Longleftrightarrow \quad (\cos(x)\cosh(y) < -1 \quad \wedge \quad \sin(x)\sinh(y) = 0)$
   die zweite Bedingung ist identisch wie in 1)

die erste Bedingung erzwingt : $x \in]\frac{\pi}{2}, \pi] \quad \wedge \quad y \neq 0$
ergibt zusammen : $(x = \pi \quad \wedge \quad y \neq 0) \qquad \Rightarrow \quad \Phi = \pi + iy, \quad y \neq 0$ (komplex)

$$\tilde{\tilde{\mathcal{H}}}_{WW} := \sum_{j=1}^{N} \left(e^{\frac{y}{3}} e^{-i\frac{\pi}{3}} \Gamma_j \Gamma_{j+1}^{\dagger} + e^{-\frac{y}{3}} e^{i\frac{\pi}{3}} \Gamma_j^{\dagger} \Gamma_{j+1} \right), \qquad \tilde{\tilde{\mathcal{H}}}_{WW}^{\dagger} = \sum_{j=1}^{N} \left(e^{\frac{y}{3}} e^{i\frac{\pi}{3}} \Gamma_j^{\dagger} \Gamma_{j+1} + e^{-\frac{y}{3}} e^{-i\frac{\pi}{3}} \Gamma_j \Gamma_{j+1}^{\dagger} \right)$$

$\tilde{\tilde{\mathcal{H}}}_{WW}$ ist *nicht–hermitesch* für $0 < \lambda < 1$.
Hier gilt für Werte von $\varphi \in]\frac{\pi}{2}, \pi[$ Analoges wie unter 1) mit $0 < \lambda := -\cos(\varphi) < 1$.

($\varphi := \frac{\pi}{2}$ bedeutet superintegrablen Fall; dann ist $\mathcal{H}$ aber hermitesch)

Neben $\lambda = 0$ erhält man als Grenzkurve des hermiteschen vom nicht–hermiteschen Bereich durch Setzen von $\cos(\Phi) = \pm 1$ die Bestimmungsgleichung $\pm\lambda = \cos(\varphi)$, woraus $\varphi(\lambda) = \arccos(\pm\lambda)$ resultiert. (Der Hamilton–Operator ist auf dieser 1–dimensionalen Untermannigfaltigkeit des 4–dimensionalen Parameterraumes (noch) hermitesch.) Die Untermannigfaltigkeit des Parameterraumes, auf der $\Phi \equiv 0$ oder $\Phi \equiv \pi$ gilt, stellt die in 2.1 erwähnte Schnittmenge mit dem Parameterraum des asymmetrischen Potts–Modells dar.

Damit ergibt sich als resultierende Formel für den integrablen Fall im nicht–hermiteschen Bereich :

$$\cos(\varphi) = \pm\lambda \cosh(\mathrm{Im}\Phi) \tag{20}$$

wobei "+" für $\varphi \in [0, \frac{\pi}{2}[$ ($\mathrm{Re}\Phi \equiv 0$), "−" für $\varphi \in]\frac{\pi}{2}, \pi]$ ($\mathrm{Re}\Phi \equiv \pi$) steht.
Dies läßt sich im (λ, φ)–Diagramm darstellen :

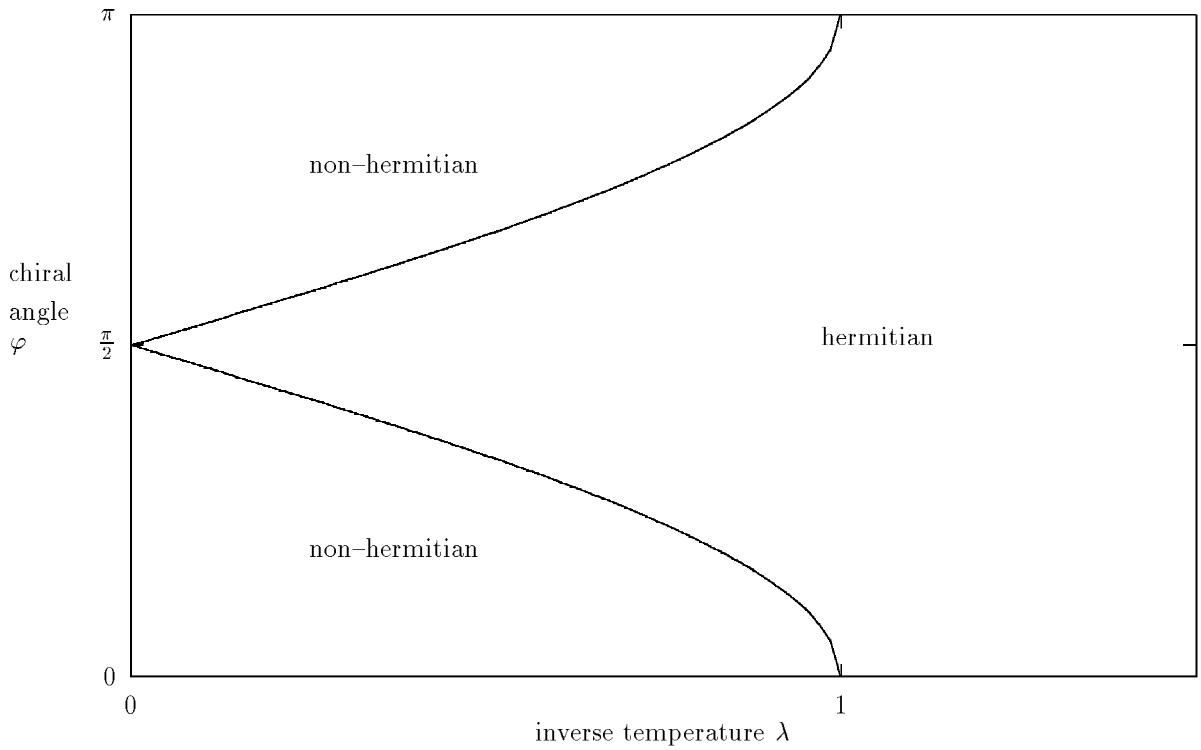

Diagramm 1: Das (λ, φ)–Diagramm (zweidimensionaler Parameterraum)

Der Hamilton–Operator ist *hermitesch* im "rechten" Teil der Darstellung, einschließlich der Grenzkurve, die spiegelsymmetrisch zu $\varphi = \frac{\pi}{2}$ ist und arkuscosinusförmig verläuft, sowie auf der von den beiden

Punkten $(0,0)$ und $(0,\pi)$ eingeschlossenen Strecke, wo man keine Wechselwirkung hat ($\lambda = 0$), und *nicht–hermitesch* auf der zweifach–zusammenhängenden Menge, die somit als "Rest" des kompakten Rechtecks übrigbleibt.

Da cosh eine bezüglich des Ursprungs *gerade* Funktion ist, aber im Hamilton–Operator nicht $\cosh(\mathrm{Im}\Phi)$, sondern nur Φ auftritt, muß geprüft werden, welche Auswirkungen das Signum von $\mathrm{Im}\Phi = y$ hat.

Im Folgenden genügt es, *einen* Summanden des Wechselwirkungsteils des Hamilton–Operators zu betrachten, denn der Diagonalteil ist *reell*, wenn φ reell gewählt wird :

$$e^{-i\frac{\varphi}{3}}\sigma_j + e^{i\frac{\varphi}{3}}\sigma_j^\dagger \quad = \quad 2\begin{pmatrix} \cos\left(\frac{\varphi}{3}\right) & 0 & 0 \\ 0 & \cos\left(\frac{\varphi-2\pi}{3}\right) & 0 \\ 0 & 0 & \cos\left(\frac{\varphi-4\pi}{3}\right) \end{pmatrix}_j =: \mathcal{D}_j \tag{21}$$

($e^{i\alpha} + e^{-i\alpha} = 2\cos(\alpha)$ mit $\alpha \in \mathbb{R}; \sigma_j^\dagger = \overline{\sigma}_j$, da $\omega^{-1} = \overline{\omega} = \omega^\dagger$, siehe Algebra (2))

$$\mathcal{H}_{WW}^{(+)} := e^{-\frac{i}{3}(x+iy)}\Gamma_j\Gamma_{j+1}^\dagger + e^{\frac{i}{3}(x+iy)}\Gamma_j^\dagger\Gamma_{j+1}, \qquad \mathcal{H}_{WW}^{(-)} := e^{-\frac{i}{3}(x-iy)}\Gamma_j\Gamma_{j+1}^\dagger + e^{\frac{i}{3}(x-iy)}\Gamma_j^\dagger\Gamma_{j+1}$$

1) $x = 0$

   Durch Transponieren von $\mathcal{H}_{WW}^{(-)}$ erhält man $\mathcal{H}_{WW}^{(+)}$ (Γ reell).
   $\Rightarrow \quad \mathcal{H}_{WW}^{(-)}$ und $\mathcal{H}_{WW}^{(+)}$ haben dieselben Eigenwerte.

2) $x = \pi$

   Durch hermitesche Konjugation gehen $\mathcal{H}_{WW}^{(+)}$ und $\mathcal{H}_{WW}^{(-)}$ ineinander über.
   $\Rightarrow \quad \mathcal{H}_{WW}^{(+)}$ und $\mathcal{H}_{WW}^{(-)}$ haben zueinander komplex konjugierte Eigenwerte.

Es genügt, Œ $\mathrm{Im}\Phi = y > 0$ zu betrachten.

Damit ergibt sich für y nach (20) die Bestimmungsformel (im nicht–hermiteschen Bereich) :

$$y = \mathrm{arcosh}\left(\frac{|\cos(\varphi)|}{\lambda}\right) \tag{22}$$

Als Parameterbereiche erhält man (bei Vorgabe von φ) :

$$\varphi \in [0,\pi] \setminus \left\{\frac{\pi}{2}\right\} \quad \Rightarrow \quad \lambda \in]0, |\cos(\varphi)|[\quad \Rightarrow \quad \Phi = \frac{\pi}{2}\left(1 - \frac{\cos(\varphi)}{|\cos(\varphi)|}\right) + i\mathrm{arcosh}\left(\frac{|\cos(\varphi)|}{\lambda}\right) \tag{23}$$

(oder bei Vorgabe von λ)

$$\lambda \in]0,1[\quad \Rightarrow \quad \varphi \in [0,\pi] \setminus \left[\frac{\pi}{2} + \arccos(\lambda), \frac{\pi}{2} - \arccos(\lambda)\right] \quad \Rightarrow \quad \Phi = \frac{\pi}{2}\left(1 - \frac{\cos(\varphi)}{|\cos(\varphi)|}\right) + i\mathrm{arcosh}\left(\frac{|\cos(\varphi)|}{\lambda}\right) \tag{24}$$

Der *richtige* Grenzwert für $\lambda \to 0$ kann jetzt auch notiert werden; nach (20) ist zu betrachten :

$$\lim_{\lambda\to 0} \lambda\cosh(\mathrm{Im}\Phi) = \lim_{\lambda\to 0} \lambda\cosh\left(\mathrm{arcosh}\left(\frac{|\cos(\varphi)|}{\lambda}\right)\right) = \lim_{\lambda\to 0} |\cos(\varphi)| = |\cos(\varphi)| \neq 0$$

d. h. im Limes muß das Produkt von λ und $\cosh(\mathrm{Im}\Phi)$ *konstant* (und endlich) bleiben, um (19) zu genügen. Andererseits muß $\mathcal{H}$ bei $\lambda = 0$ *hermitesch* sein, weil der Wechselwirkungsteil verschwindet; d. h. der Wert für Φ ist unerheblich. Konkret bedeutet dies folgendes : im (λ,φ)–Diagramm (Diagramm 1) bewege man sich bei $\varphi = \varphi_0 = const$ *parallel* zur λ–Achse im nicht–hermiteschen Bereich auf $\lambda = 0$ zu; im Grenzfall $\lambda = 0$ ist φ *unverändert* als φ_0 zu wählen, um *stetigen* Übergang der Eigenwerte zu gewährleisten; insbesondere ist *nicht* $\varphi = \frac{\pi}{2}$ zu wählen, wie man (vielleicht) zunächst allein aus (19) erwägen könnte !

Das *duale* asymmetrische Potts–Modell ($\varphi = 0$) hat mit dem integrablen die Schnittmenge mit der Bedingung $1 = \lambda \cos(\Phi)(\lambda \geq 1)$ gemeinsam und kann vermöge der Restriktion $1 = \lambda \cosh(\mathrm{Im}\Phi)$ in den nicht–hermiteschen Bereich des integrablen Modells fortgesetzt werden.

In Bezug auf (3) und (4) gilt hier :

$$\alpha_k = \overline{\alpha}_{3-k} \quad \text{und} \quad \beta_k = \overline{\beta}_{3-k} e^{2\mathrm{Im}\Phi\left(1-\frac{2k}{3}\right)} \quad \text{falls } \mathrm{Re}\Phi = 0, \text{ so ist } \beta_k \text{ reell} \tag{25}$$

Damit sind die lokalen Boltzmann–Gewichte im gesamten nicht–hermiteschen Bereich *komplex*, denn nach [4] sind diese (für das $\mathbb{Z}_3$–Modell) reell nur im konformen Potts–Punkt ($\lambda = 1, \varphi = 0 = \Phi$) und auf einer Untermannigfaltigkeit [11], wobei im letzten Fall der Hamilton–Operator der zugehörigen Quantenkette nicht–hermitesch ist; die Eigenwerte sind explizit bekannt [10].

Wenn β_k in (25) reell ist, so strebt es (bei festem φ) für $\lambda \longrightarrow 0$ gegen ∞ ($k = 1$) bzw. gegen 0 ($k = 2$); im asymptotischen Limes gilt wegen $\mathrm{arcosh}(u) = \log(u + \sqrt{u^2-1}), u \geq 1$, und $\sqrt{u^2-1} \overset{u\to\infty}{\simeq} u$ (mit $u := \frac{|\cos(\varphi)|}{\lambda}$) :

$$\beta_k = \frac{\left(u+\sqrt{u^2-1}\right)^{\pm\frac{1}{3}}}{\sin\left(\frac{k\pi}{3}\right)} \simeq \frac{2}{\sqrt{3}}(2u)^{\pm\frac{1}{3}} = \frac{2}{\sqrt{3}} \left\{ \begin{array}{lll} \left(2\frac{\cos(\varphi)}{\lambda}\right)^{\frac{1}{3}} & \overset{\lambda\to 0}{\longrightarrow} \infty & (k=1) \\ \frac{1}{\left(2\frac{\cos(\varphi)}{\lambda}\right)^{\frac{1}{3}}} & \overset{\lambda\to 0}{\longrightarrow} 0 & (k=2) \end{array} \right\}$$

Ist β_k in (25) komplex (d. h. oberer nicht–hermitescher Bereich), so strebt für $\lambda \longrightarrow 0$ in analoger Weise der Betrag von β_1 gegen ∞ und der von β_2 gegen 0.

In den Anhängen C.1 und C.2 wird gezeigt, daß dieser nicht–hermitesche Hamilton–Operator sogar nicht–normal, aber noch *biunitär* diagonalisierbar ist.

2.3 Numerische Methode zur Ermittlung des Spektrums

Das Spektrum des Hamilton–Operators (16) wird mittels Computerprogramm durch vollständige bzw. teilweise Diagonalisierung (bei größerer Kettenlänge) desselben unter Anwendung von Ähnlichkeitstransformationen (QR–Verfahren; numerisch stabil und quadratisch konvergent) ermittelt. — Daß man mittels unitärer Transformationen die Eigenwerte *jeder* Matrix ermitteln kann, sichert folgender Satz [81] :

Satz 1 (Satz von Schur; allgemeine Version)
Zu jeder $(M \times M)$–Matrix A gibt es eine unitäre $(M \times M)$–Matrix U mit

$$U^H A U = \begin{pmatrix} \mu_1 & * & \cdots & * \\ 0 & \mu_2 & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & * \\ 0 & \cdots & 0 & \mu_M \end{pmatrix}.$$

Dabei sind die $\mu_j, j = 1, (1), M$, die (nicht notwendig verschiedenen) Eigenwerte von A.

Hier symbolisiert * eine beliebige Zahl aus $\mathbb{C}$.

2.3.1 Mathematischer Hintergrund — Arnoldi–Verfahren

Für *hermitesche* Matrizen ist das *Lanczos*–Verfahren [70] seit geraumer Zeit bekannt und eine bewährte Methode, effektiv extremale Eigenwerte solcher Matrizen von großer Dimension numerisch zu ermitteln,

indem man eine orthogonale Projektion auf einen Unterraum betrachtet.
Ein zu diesem analoges Verfahren auch für *nicht*–hermitesche Matrizen stellt das *Arnoldi*–Verfahren [15][77][78] dar, wovon es mehrere Versionen gibt. Weil nur diejenige der "vollständigen Nachorthogonalisierung" in dieser Diplomarbeit zur Anwendung kommt (warum, s. 2.3.2), sollen an dieser Stelle auch nur die theoretischen Aspekte derselben diskutiert werden.

Krylov–Unterraum : orthogonale Projektionsmethode

Gegeben sei eine komplexe Matrix $A \in \mathbb{C}(M, M)$ der Dimension M und ein System $V_m = [v_1, v_2, \ldots, v_m]$, bestehend aus m linear unabhängigen Vektoren ($m \leq M$) in $\mathbb{C}^M$.
Die Projektionsmethode (*Galerkin*–Methode) auf den Unterraum Span$[V_m]$ approximiert ein Eigenpaar μ, χ von A durch $\mu^{(m)}$, $\chi^{(m)}$, die folgenden Bedingungen genügen :

$$\chi^{(m)} \in \mathrm{Span}[V_m] \tag{26}$$

$$(A - \mu^{(m)} I)\chi^{(m)} \perp v_j; \quad j = 1, (1), m \tag{27}$$

Mit $\chi^{(m)} = V_m y^{(m)}$ sind dann $\mu^{(m)}$, $\chi^{(m)}$ Eigenelemente des generalisierten Eigenwertproblems

$$(C_m - \mu^{(m)} B_m) y^{(m)} = 0$$

wobei die $(m \times m)$–Matrizen C_m und B_m wie folgt definiert sind :

$$C_m = V_m^H A V_m, \qquad B_m = V_m^H V_m$$

$\mu^{(m)}$ und $\chi^{(m)}$ werden durch Lösen des klassischen Eigenwertproblems

$$(B_m^{-1} C_m - \mu^{(m)} I) y^{(m)} = 0 \tag{28}$$

erhalten. Dabei heißen die Lösungen $\mu^{(m)}$ *Ritz*–Werte des Unterraumes Span$[V_m]$, und damit assoziiert der *Ritz*–Vektor $\chi^{(m)}$ ($\|\chi^{(m)}\|_2 = 1$ hermitesche Norm mit Skalarprodukt $< .|. >$).
Bei Verwendung eines *orthogonalen* Systems V_m reduziert sich B_m auf die Einheitsmatrix. Dann wird das ONS V_m durch die orthogonalen *Krylov*–Vektoren $v_1, Av_1, \ldots, A^{m-1}v_1$ erhalten, wobei v_1 ein beliebiger *reeller* (s. u.) Startvektor (der Norm 1) ist. Wird der orthogonale Projektor π_m auf dem *Krylov*–Unterraum $K_m := [v_1, Av_1, \ldots, A^{m-1}v_1]$ ($\dim K_m = m$) durch

$$\pi_m (A - \mu^{(m)} I)\chi^{(m)} = 0$$

eingeführt, so ist unmittelbar einsichtig, daß die Ritz–Vektoren die Eigenvektoren des Operators $A_m := \pi_m A \pi_m$ sind, welche zu K_m gehören, und die Ritz–Werte die korrespondierenden Eigenwerte darstellen. — Man beachte, daß jeder Vektor, der in $K_m^{\perp}$, dem orthogonalen *Komplement* von K_m, liegt, ein Eigenvektor von A_m ist, assoziiert mit dem Eigenwert *Null* !

Eine Methode, wie man die Vektoren $v_j, j = 1, (1), m$, erhalten kann, wird nun beschrieben durch das

Arnoldi–Verfahren

Hierbei wird eine Folge von Vektoren $v_j, j = 1, (1), m$, durch die Rekursionsformel

$$h_{j+1,j} v_{j+1} = A v_j - \sum_{i=1}^{j} h_{ij} v_i \tag{29}$$

erzeugt, wobei die $h_{ij}, i = 1, (1), j+1$, so gewählt sind, daß $v_{j+1} \perp v_i, i = 1, (1), j$, und $\|v_j\| = 1, j = 1, (1), m$.

Algorithmus

Für $j := 1$ bis m tue
1) $w := Av_j$
2) Für $i := 1$ bis j tue

$$w := w - v_i(<v_i|Av_j> =: h_{ij}) \tag{30}$$

3)

$$v_{j+1} := \frac{w}{\|w\| =: h_{j+1,j}} \tag{31}$$

Voraussetzung dabei : für $j \leq m$ muß $h_{j+1,j} > 0$ sein ($\rightarrow$ Nachorthogonalisierung; wenn z. B. A die Nullmatrix ist (Trivialfall), funktioniert das Verfahren nicht; ferner hat insbesondere zu gelten : $\det A \neq 0$, denn sonst ist der Wert Null Eigenwert, aber der zugehörige Eigenvektor liegt im Orthogonalraum von K_m; auch darf v_1 kein Eigenvektor von A sein (sonst gilt $\dim K_m = 1 \leq m$)).

Theorem 1
1) Das System $[v_1, \ldots, v_m]$, das durch obigen Algorithmus erhalten wird, ist eine Orthonormalbasis (ONB) von K_m, aufgespannt durch $[v_1, Av_1, \ldots, A^{m-1}v_1]$.
2) Sei V_m die $(M \times m)$–Matrix, die man durch die Spaltenvektoren $v_1, \ldots, v_m$ erhält. Dann ist $H_m = V_m^H AV_m$ eine obere $(m \times m)$–Hessenbergmatrix mit nicht–verschwindenden Einträgen, die durch (30) und (31) gegeben sind.

Bemerkungen

- H_m ist $B_m^{-1}C_m$ aus (28) vom letzten Abschnitt.
- Das Ergebnis gilt bei *exakter* Arithmetik. Nachorthogonalisierung (z. B. modifizierte (optionale) Gram–Schmidt–Methoden [20]) *muß* bei numerischer Rechnung mittels Computer durchgeführt werden, andernfalls besteht die Gefahr einer gravierenden numerischen Instabilität.
- Während beim Lanczos–Verfahren lediglich eine *symmetrische* Tridiagonalmatrix zu bestimmen ist, wird beim Arnoldi–Verfahren eine Hessenbergmatrix benötigt. Dies ist ein wesentlicher Punkt, warum eine Nachorthogonalisierung nötig ist; im Anhang C.3 wird dies anhand von Beispielen näher begründet.

Korollar 1
Die Ritz–Werte von A in K_m sind die Eigenwerte $\mu_i^{(m)}$ von H_m und die Ritz–Vektoren die Vektoren $V_m y_i^{(m)}$, wobei die $y_i^{(m)}$ Eigenvektoren von H_m, assoziiert mit $\mu_i^{(m)}$, sind.

In Abhängigkeit von der gewünschten Genauigkeit der/des extremalen Eigenwerte(s) kann man dieses Verfahren mit einem *anderen* Startvektor iterieren, z. B. (für $p(\leq m)$ dominante (= *extremale*) Eigenwerte)

$$u := \sum_{j=1}^{p} \|(A - \mu_j^{(m)} I)\chi_j^{(m)}\|_2 \mathrm{Re}\chi_j^{(m)} \qquad \text{und } v_1^{'} := \frac{u}{\|u\|_2} \quad (\text{sofern } \|u\|_2 \neq 0) \tag{32}$$

Gründe für *diese* Wahl des neuen Startvektors sind :

- Vermeidung unnötiger *komplexer* Arithmetik (Rundungsfehlerakkumulation)
- Durch $\mathrm{Re}\chi_j^{(m)}$ wird eine *paritätische* Kombination des konjugiert–komplexen Paares der Eigenvektoren $\chi_j^{(m)}$ und $\overline{\chi_j^{(m)}}$ erreicht (komplexer Startvektor kann die Konvergenz “behindern”)

Konvergenz

Für eine ausführliche Betrachtung der Konvergenzfrage sei nochmals auf [77][78] verwiesen. Zusammenfassend ist festzustellen, daß die Konvergenz für die *extremalen* Eigenwerte des Spektrums von A am besten ist. — Die Approximationen $\mu_i^{(m)}$ liegen in einer *Ellipse* in der komplexen Zahlenebene, die *nicht* die Null als Eigenwert enthalten darf (sonst keine Konvergenz"garantie"; außerdem ist Null der assozierte Eigenwert eines in $K_m^\perp$ liegenden Eigenvektors von A_m (!)). — Die Konvergenzfehler lassen sich durch *Tschebyschev*–Polynome 1. Art abschätzen.

2.3.2 Physikalische Anwendung

Ziel der Anwendung des soeben beschriebenen Verfahrens ist es, die niedrigsten Levels des $\mathbb{Z}_3$–Modells für verschiedene Kettenlängen N $(2 \leq N \leq 12)$ zu berechnen und für diese mittels Extrapolationsverfahren [14][13][53] mit $N \to \infty$ einen (eindeutig bestimmten) Grenzwert zu erhalten/schätzen.

Weil die Hamilton–Matrix für 12 Sites auch nach Ausnutzung der Symmetrien (Q_P–Sektoren) die riesige Dimension von bis zu 14800 erreicht, kann sie bei dem zur Verfügung stehenden Speicherplatz nicht mehr vollständig auf dem Rechner abgespeichert werden. Hier nutzt man es aus, daß diese Matrizen allerdings (wegen der ausschließlich "nächsten–Nachbar–Wechselwirkung") sehr dünn besetzt sind (maximal $(n-1)N+1$ Einträge pro Zeile bzw. Spalte sind ungleich Null).

Die *niedrigsten* Levels sind aber *extremale* Eigenwerte der Hamilton–Matrizen. Daher läßt sich vorstehende Methode anwenden (partielle Diagonalisierung). — Aus der vollständigen Diagonalisierung (bis $N = 8$ Sites) ist bekannt, daß sich das totale Spektrum etwa symmetrisch um Null gruppiert; Null darf allerdings nicht in oben erwähnter Ellipse liegen. (Außerdem gilt nach (2) :

$$\sum_{k=0}^{n-1} \omega^k = 0; \qquad \mathrm{Sp}\sigma_j = \mathrm{Sp}\Gamma_j = 0 \qquad \text{und damit} \quad \mathrm{Sp}\mathcal{H} = 0$$

Da die Spur eine (geometrische) Invariante ist, ist die Summe der Eigenwerte Null.) Abhilfe schafft hier eine *explizite* Spektralverschiebung um einen genügend großen (reellen) Betrag, so, daß alle Eigenwerte negative Re–Teile haben. Algebraisch ist dies eine Äquivalenzumformung. Dadurch wird die Konvergenz garantiert, beschleunigt und *jeder* erhaltene extremale Eigenwert ist eines der *untersten* Levels (eine Rückshiftung ist erforderlich, um absolute Zahlen (z. B. den Grundzustand) zu erhalten; Gaps sind ja nur relative Zahlen).

Für finite–size–Berechnungen ist es erforderlich, eine genügend große Genauigkeit (mindestens 10^{-8}) in den Zahlen zu haben. Um nun diese bei dem zur Verfügung stehenden Speicherplatz (Dimension des Krylov–Unterraumes) und in einer akzeptablen Rechenzeit (Nachorthogonalisierung) zu optimieren, bedarf es einiger Kombinationen.

Da bei *un*vollständiger Nachorthogonalisierung beim Arnoldi–Verfahren die Werte im Vergleich zur vollständigen Nachorthogonalisierung nur schlechter — bei etwa gleichem Zeitaufwand — sein können, findet ausschließlich letzteres Anwendung. Dies ist aber auch eine Frage des Speicherplatzes, und die Dimension des Unterraumes bestimmt (für $M > m$) die Anzahl der zuverlässig richtigen (die Reihenfolge betreffend) Levels (pro Level ca. 8 - 12 Dimensionen mehr im Unterraum; für untere Levels mehr), was wiederum die Genauigkeit beeinflußt — bei genügender Nachorthogonalisierung; damit schließt sich der Kreis. — Um aus dem Dilemma herauszukommen, ist es höchstförderlich eine — sofern auf dem Rechner implementiert — 4–fache Genauigkeit zu verwenden (auf der IBM des RHRZ BONN in der Programmiersprache FORTRAN 77 bietet eine REAL–Variable 4–facher Genauigkeit ca. 35 signifikante Dezimalstellen).

Die Dimension des Unterraumes m sollte als $m \geq [\sqrt{M}], m \leq M$, gewählt werden, jedoch sollte $m \geq 80$ sein, wenn man die ca. 10 extremalen Eigenwerte bestimmen möchte, bei Bestimmung *des* extremalen Eigenwertes genügt aber schon $m \geq 20$; sollen mehr als 10 Eigenwerte ermittelt werden, so ist m um ca. 10 pro zusätzlichen Eigenwert zu erhöhen. Diese Angaben beziehen sich auf die für finite–size–Rechnungen erforderlichen Genauigkeiten. Aus Stabilitätsgründen ist eine optionale Gram–Schmidt–QR–Nachorthogonalisierung [20] (numerisch stabil und quadratisch konvergent) bei nicht–hermiteschen Matrizen (bei hermiteschen und Lanczos–Verfahren keine (!)) erforderlich, um schon nach *einer* (!) Iteration die untersten 8 Levels mit einer Genauigkeit von $\leq 10^{-12}$, die untersten 15 Levels mit einer Genauigkeit von $\leq 10^{-10}$ zu erhalten. (Sind die Vektoren v_j “genügend” orthogonal (vierfache Genauigkeit), so braucht man nicht nachzuiterieren (was viel Zeit kostet und die Genauigkeit nicht fördert).) Durch die Nachorthogonalisierung der Arnoldi–Vektoren ist eine Abschätzung der absoluten Fehler der Eigenwerte mittels Abweichung dieser Vektoren von der Orthogonalität möglich.

Liegen *sub*dominante extremale Eigenwerte (= höhere Levels) “nahe” beieinander, so hilft eine Erhöhung (falls $m < M$) der Dimension des Krylov–Raumes (abhängig von Anzahl der Sites), um das richtige Spektrum bei sonst gleichen Bedingungen (Nachorthogonalisierung) zu bestimmen. Für *dominante* extremale Eigenwerte spielt (bei *maximalem* Nachorthogonalisierungsgrad) auch die algebraische Vielfachheit keine Rolle. — Die Dimensionserhöhung ist verständlich, wenn man bedenkt, daß das Verfahren die extremalen Eigenwerte am *besten* approximiert — aber nicht nur diese, darum liefert die Methode auch Eigenwerte, die höheren Levels entsprechen.

2.4 Spektrum — Überblick

Es soll zunächst ein Überblick über die Eigenwerte und das reskalierte Spektrum des Hamilton–Operators $\mathcal{H}$ im nicht–hermiteschen Bereich gegeben werden bevor die Symmetrien diskutiert und das Spektrum interpretiert werden.

Im Folgenden wird es nützlich sein, einige, das Spektrum betreffende, *Konventionen* einzuführen :

Grundzustand

In der massiven Hochtemperaturphase ist der *kleinste* Eigenwert des $\mathcal{H}$–Operators im *hermiteschen* Bereich im Sektor $Q_P = 0_0$ zu finden (für $\varphi, \Phi \in [0, \pi]$); daher die Bezeichnung *Grund*zustand. Diese Konvention beibehaltend, aber mit der Ergänzung, Eigenwert mit kleinstem *Re*–Teil, wird dieser für den integrablen Fall auch im nicht–hermiteschen Bereich in der massiven Phase seinem Namen gerecht. Grundzustand : $E_0(Q = 0, P = 0)$.

Energieniveaus (= Levels) (Gaps)

Der i–te Level ist als folgende Energiedifferenz definiert : $\Delta E_{Q,i} := E_i(Q, P = 0) - E_0(Q = 0, P = 0)$.

Reskaliertes Spektrum (= Anregungsspektrum)

Die Grundzustandsenergie E_0 ist im wesentlichen proportional zur Kettenlänge N (im $\mathbb{Z}_3$–Modell fällt E_0 (bei festem N) noch zusätzlich mit abnehmendem φ (abgesehen von “Rotationseffekten” im $(n = 3) * 2\pi$–periodischen Spektrum) und zunehmendem λ (auch für $\lambda > 1$) ab). Für finite–size–Extrapolationen braucht man die Energieeigenwerte im Grenzfall $N \to \infty$ von $\mathcal{H}_N$. Um sich der N–Abhängigkeit zu entledigen, reskaliert man das Spektrum von $\mathcal{H}_N : \Delta\mathcal{H}_N := \mathcal{H}_N - E_0(N)\mathbf{1}$.

Die Eigenwerte von H ($\mathcal{H}$ in Basisdarstellung) sind (mindestens) *stetig* in den Parametern λ, φ und Φ, weil die Matrixeinträge von H stetig von diesen abhängen. Daher verlaufen die Übergänge im Parameterraum vom hermiteschen zum nicht–hermiteschen Bereich *kontinuierlich*, wie man den Diagrammen 14, 15 und 13 entnehmen kann (Kettenlänge N und φ fest, λ variabel bzw. N, λ fest, φ variabel). Die finite–size–Effekte für kleine Kettenlängen N erkennt man daran sehr gut : für $N = 4$ biegen die Levels schon deutlich vor $\lambda = 1$ (Potts–Punkt ($\lambda = 1, \varphi = \Phi = 0$) erfüllt die Integrabilitätsbedingung) nach *oben* ab, während für $N = 11$ der Abbiegepunkt bei $\lambda = 0.95(1)$ zu lokalisieren ist (bei $\varphi = \frac{\pi}{4}$ verläuft die Phasengrenze massiv–masselos bei $\lambda = 0.993(1)$ (s. Tabelle 12); dies deutet auf *inkommensurable* Effekte hin (s. die Levelextrapolationsdiagramme 4 bis 12)).

Weil H keine hermitesche Matrix ist, treten in natürlicher Weise komplexe Eigenwerte (mit sowohl positiven wie auch *negativen* Im–Teilen) auf. Der *Grundzustand* ist für $\varphi < \frac{\pi}{2}$ *immer* reell und *eindeutig* (dies ist nicht "selbstverständlich", denn das Theorem von Perron–Frobenius [35] [72] [34] gilt nirgendwo im Parameterraum, s. auch Fußnote in Abschnitt 3), wohingegen er für $\varphi > \frac{\pi}{2}$ reell *nur* für Kettenlängen $N \bmod (n=3) = 0$ (s. 2.5.2) ist, sonst komplex und das gesamte Spektrum ist rein komplex ! Allerdings konvergiert bei solchen Kettenlängen der *Betrag* des Im–Teils für $N \to \infty$ gegen 0. Auch dies kann an Hand von finite–size–Effekten (komplexe Casimir–Energie) und aus Symmetrieprinzipien verstanden werden (s. 2.5.2 und 2.6). Genau bei solchen Kettenlängen findet man (auch im *hermiteschen* Bereich) die Eigenwerte — bis auf Ladungs– und Impulsverschiebung — modulo Signum im oberen und unteren Winkelbereich; dabei sind $\lambda = const, \varphi \to \pi - \varphi$ zu wählen ((40) und (41)).

Über das Anregungsspektrum geben die Tabellen 4 bis 10 sowie die Diagramme 2 und 18 bis 23 Auskunft; es ist die konsequente Fortsetzung aus dem hermiteschen Bereich mit komplexen Zuständen, wobei die meisten unteren Levels reell bleiben und auch die *Quasiteilchen*interpretation aufrecht erhalten werden kann (s. 2.5). Bemerkenswert ist insbesondere, daß das m_2–Teilchen auch im gesamten oberen nicht–hermiteschen Bereich auf der *ganzen* 1. Brillouin–Zone existiert, s. Diagramme 22 und 23 sowie die diesbezügliche Untersuchung im ganzen Parameterraum in 2.7.1.

Für $\varphi < \frac{\pi}{2}$ und $\varphi > \frac{\pi}{2}, N \bmod (n=3) = 0$, sind — insbesondere im $Q = 1$–, 2–, aber auch im $Q = 0$–Sektor — bei $P = 0$ (und $P = \pi \hat{=} \frac{N}{2}$) (für $\varphi > \frac{\pi}{2}$ in entsprechend verschobenen P–Sektoren, s. 2.5.2) *viele* Levels reell, während man bei anderen Impulsen P ein vorwiegend komplexes Spektrum erhält. Insbesondere sind bei $\varphi < \frac{\pi}{2}$, und für $\varphi > \frac{\pi}{2}$ analog, die niedrigsten Levels in $Q = 1, 2$ bei $P = 0$ *reell*. Man beachte auch die fast–Linearität des jeweils niedrigsten Levels in den Ladungssektoren $Q = 1, 2$ (siehe Diagramme 14 und 15) nahezu im *gesamten* λ–Bereich, welche erst bei näherer Betrachtung sich als nur fast–linear herausstellt (Differenzenwertbildung $\frac{\Delta E_{Q,0}(\lambda_{j+1}) - \Delta E_{Q,0}(\lambda_j)}{\lambda_{j+1} - \lambda_j}$ aufgetragen bei $\frac{1}{2}(\lambda_j + \lambda_{j+1})$ für $N = 8$ siehe Diagramme 16 und 17).

Der jeweils niedrigste Level ("fundamentale" Teilchen) in den $Q \neq 0$–Sektoren zeigt folgendes interessante Verhalten : das *Minimum* der Energie–Impuls–Dispersionskurve ist bei entsprechendem Impuls $P_{Q,Min}$ *immer reell*; *symmetrisch* um $P_{Q,Min}$ steigt die Kurve an, d. h. bei Impuls $P = P_{Q,Min} \pm k$ erhält man den gleichen *Re*–Teil der Energie, wobei die Im–Teile dann gleichen Betrag, aber verschiedenes Signum besitzen (komplex konjugierte Eigenwerte in konjugierten Impulssektoren, s. 2.5.2), s. die Diagramme 20 bis 23. Die Dispersionskurven, deren Phasenverschiebungen in den nicht–hermiteschen Bereichen *eindeutig* bestimmt werden können (s. auch 2.7.1), genügen mit großer Genauigkeit — allerdings *nicht* exakt — der *Klein–Gordon*–Gleichung auf dem Gitter !

Für $\varphi < \frac{\pi}{2}$ (N bel.) und für $\varphi > \frac{\pi}{2}$, $N \bmod (n=3) = 0$, findet man in jedem Q–Sektor zwei P–Sektoren, die zueinander komplex konjugierte Eigenwerte besitzen; $\varphi < \frac{\pi}{2}$: bei $P = 0$ und — falls $N \bmod 2 = 0$ (zusätzlich) gilt — auch bei $P = \pi$ sind diese im *selben* P–Sektor (dabei treten die *reellen* Eigenwerte nicht doppelt auf); $\varphi > \frac{\pi}{2}$: hier gilt das gleiche modulo *feste*, Q–abhängige Phasenverschiebung im gesamten oberen Winkelbereich (s. 2.5.2). Dies ist durch eine *Impulsspiegelung* an den jeweiligen Symmetrieimpulsen (s. 2.5.2 und 2.6.1) zu erklären. Diese konjugiert–komplexen Eigenwerte (sofern sie sich im gleichen P–Sektor befinden) werden *genau* an der hermitesch–nicht–hermiteschen Grenzkurve (unabhängig von N) reell und bilden dort einen *zweifach* entarteten Level (s. hierzu Abschnitt 4); diese Mannigfaltigkeit bildet die *Schnittmenge* mit dem asymmetrischen Potts–Modell, das *paritäts*invariant ist (s. auch 2.6.2). Bei $\lambda = 0$ hat man im allgemeinen eine noch höhere Entartung, weil der Wechselwirkungsteil dort entfällt.

Ansonsten ist das Spektrum (in jedem Q_P–Sektor) im allgemeinen nicht entartet — mit der Ausnahme einzelner *Punkte* im Parameterraum, denen noch eine besondere Bedeutung zukommen wird, sowie bei $\varphi = 0, N$ bel., $\varphi = \pi$ und $N \bmod (n=3) = 0$; im letzten Fall hat man eine *lokale* Symmetrie mit generischer *zweifacher* Entartung in *jedem* Q_P–Sektor (s. Abschnitt 4). Ferner hat der $Q = 0$–Sektor *ausschließlich* konjugiert–komplexe Eigenwerte, $Q = 1$ und $Q = 2$ besitzen — bis auf Impulsinversion — dieselben Eigenwerte (CP–Symmetrie, s. (54)). Bemerkenswert ist im diesem Zusammenhang noch die Tatsache, daß bei diesen beiden Winkeln für φ man (insbesondere im $Q = 0$–Sektor) einen λ–Bereich hat ($\lambda < 1$), in dem (insbesondere für kleine N) das (gesamte) Spektrum noch im nicht–hermiteschen Bereich *rein* reell wird, zumindest jedoch der niedrigliegende Teil des Spektrums (s. Abschnitt 4 und Diagramm 34) : sämtliche (konjugiert–)komplexe Eigenwerte werden reell (im reskalierten Spektrum : von unten nach oben) und bleiben es auch bis $\lambda = 1$ (und natürlich dann weiter darüber hinaus, da $\mathcal{H}$ dort hermitesch ist). Der λ–Wert, $\lambda_r(N)$, wo dies einsetzt, ist N–abhängig und $[\lambda_r(N), \lambda = 1[$ schrumpft *sehr* schnell mit wachsendem N (s. Diagramm 35), aber : selbst bei $N = 12$ Sites sind in $Q_P = 0_0$ bei $\lambda = 0.99$ noch (mindestens) die untersten 99 Levels reell ! Dies ist im Zusammenhang zu sehen mit der Erscheinung, daß die komplexen Levels für $\varphi \neq 0, \pi$ (in Abhängigkeit von φ (und λ)) bei festem φ, einen λ–Bereich ausbilden, wo sie — falls sie konjugiert–komplex sind — zwei verschiedene *reelle* Werte annehmen, aber bei weiter wachsendem λ wieder (konjugiert–)komplex werden (s. Diagramm 35). Von $\varphi = 0$ ausgehend, φ größer werdend (bei variablem λ), nimmt dieser N–abhängige λ–Bereich stark ab, endet in einem *Punkt*, wo *drei reelle* Eigenwerte entartet sind (s. Diagramm 32), um bei weiter wachsendem φ (solange man noch im nicht–hermiteschen Bereich ist) nur noch *punktweise doppelt* entartet zu werden (konjugiert–komplexer Level wird punktweise reell, dritter reeller Level wird repulsiert). Dieses Phänomen wird im Abschnitt 4 eingehend behandelt.

2.5 Interpretation des Spektrums als Quasiteilchen

In diesem Abschnitt wird untersucht, ob das Quasiteilchenbild auch im nicht–hermiteschen Bereich aufrecht erhalten werden kann. In [44] und [45] findet man ausführliche Darstellungen dieser Interpretation des Anregungsspektrums für $\mathbb{Z}_3$– und $\mathbb{Z}_4$–symmetrische chirale Potts–Modelle sowohl für den selbstdualen als auch *hermiteschen* integrablen Fall. Bei dieser Interpretation werden die niedrigliegenden (translationsinvarianten) Levels in den verschiedenen Q–Sektoren, jeweils bei Impuls $P = 0$, bis zu einer Kettenlänge $N \leq 12$ Sites berechnet, die Levels der verschiedenen N sortiert, und diese Werte dann mittels geeigneter Verfahren [14] [13] [53] extrapoliert ($N \to \infty$). Die Spektren können unter der Annahme der Existenz von $n-1$ *fundamentalen* Teilchen, die die $\mathbb{Z}_n$–Ladung $Q = 1, (1), n-1$ tragen und die Masse m_Q besitzen, erklärt werden. Im *super*integrablen Fall gilt überdies : $m_Q = Qm_1$ [44]. Essentiell hierbei ist, daß der im allgemeinen jeweils *niedrigste* Level in den Q_0–Sektoren ($Q \neq 0$) *isoliert* auftritt und *exponentielle* Konvergenz in N zeigt, während *alle* anderen Gaps *Potenz*konvergenz aufweisen. Der Re–Teil des Energieeigenwertes des exponentiell konvergenten Levels im Sektor Q_0 wird als die Masse m_Q des fundamentalen Teilchens identifiziert, welches die $\mathbb{Z}_n$–Ladung Q trägt. Alle anderen Levels sind dann als Vielteilchen–Streuzustände (Komposit–Zustände) der $n-1$ fundamentalen Teilchen, die *Ein*teilchenzustände darstellen, sowohl bezüglich Masse als auch $\mathbb{Z}_n$–Ladung *additiv* zusammensetzbar. Für Impulse $P \neq 0$ gelten unter Beachtung der Impulserhaltung analoge Formeln. Die Einteilchenzustände besitzen eine *Energie–Impuls–Dispersionskurve* [45], die in guter Näherung der *Klein–Gordon*–Gleichung auf dem Gitter entspricht. Betrachtet man das ganze (niedrigliegende) Spektrum bei allen (auf dem Gitter bei entsprechenden Kettenlängen realisierten) Impulsen, so erkennt man eine *Bänderstruktur* [56].

Es werden folgende Notationen eingeführt :

$$m_Q \equiv m_Q(P_{Q,Min}) := \mathrm{Re}(\Delta E_{Q,0}(P_{Q,Min})) \tag{33}$$

Für einen Einteilchenlevel ist eine exponentielle Konvergenz in N gemäß

$$\mathrm{Re}(\Delta E(N) - \Delta E(\infty)) \propto e^{-\frac{N}{\xi}} + \ldots \tag{34}$$

zu erwarten, wobei $\xi \propto m^{-1}$ die *Korrelationslänge* (im Skalenbereich) bedeutet; im Gegensatz zu den Vielteilchenzuständen, für welche Potenzkonvergenz gilt [61] [79] :

$$\mathrm{Re}(\Delta E(N) - \Delta E(\infty)) \propto N^{-y} + \ldots \tag{35}$$

Hierbei bezeichnet y die *Anzahl* der (fundamentalen) Teilchen des Komposit–Zustandes; dieser Exponent läßt sich wie folgt gewinnen :

$$y_N := -\frac{\log\left(\frac{|\mathrm{Re}(\Delta E(N)-\Delta E(\infty))|}{|\mathrm{Re}(\Delta E(N-l)-\Delta E(\infty))|}\right)}{\log\left(\frac{N}{N-l}\right)}, l \in \mathbb{N}, \quad \text{und} \quad \lim_{N\to\infty} y_N =: y \in \mathbb{N}\backslash\{1\} \tag{36}$$

Demzufolge sollte die Folge der y_N für die Einteilchenzustände *exponentiell* anwachsen.

Für die in 2.4 definierten Energieniveaus gilt :

$$\Delta E_{Q,k}(P) = \sum_{k=1}^{n-1} \sum_{j=0}^{N-1} \gamma_{kj} \Delta E_{k,0}(j) \qquad \text{mit} \quad \gamma_{kj} \in \mathbb{N}_0 \tag{37}$$

mit den *Nebenbedingungen (Auswahlregeln)*

$$\left(\sum_{j=0}^{N-1} j\gamma_{kj} \right) \bmod 2\pi = P, \qquad \sum_{k=1}^{n-1} \sum_{j=0}^{N-1} \gamma_{kj} = y, \qquad \left(\sum_{k=1}^{n-1} \sum_{j=0}^{N-1} \gamma_{kj} k \right) \bmod n = Q \tag{38}$$

Speziell für das $\mathbb{Z}_3$–Modell gilt die generelle Struktur des Spektrums wie sie im Diagramm 2 ersichtlich ist (Schwellenwerte).

Im nicht–hermiteschen Bereich des integrablen Modells treten nun neben *zahlreichen* reellen auch komplexe Levels auf; in den Q_0–Sektoren kommen sie im *unteren* Winkelbereich immer als konjugiert–komplexe *Paare* vor, im oberen Winkelbereich hat man gewisse Q–abhängige Phasenverschiebungen und die *erhebliche* Schwierigkeit, daß der *Grundzustand* (im $\mathbb{Z}_3$–Modell) *reell* nur bei Kettenlängen $N \bmod (n=3) = 0$ vorkommt. Darum werden die beiden Winkelbereiche getrennt diskutiert.

Ein komplexer Eigenwert bedeutet quantenmechanisch einen instabilen, zerfallenden Zustand, wobei der Betrag des Im–Teils proportional zur Zerfallsbreite bzw. invers proportional zur Lebensdauer ist. Für die Massen der Teilchen spielen diese folglich (in hiesigem Zusammenhang) keine Rolle, weshalb in diesem Abschnitt nur die *Re*–Teile betrachtet werden.

2.5.1 Interpretation des Spektrums im unteren Winkelbereich

Die gewohnte Quasiteilcheninterpretation kann im gesamten unteren Winkelbereich bestätigt werden; alle Erscheinungen, die im hermiteschen Bereich gelten, können wiedergefunden werden : der Grundzustand befindet sich stets im Sektor $Q_P = 0_0$ und ist *reell* und *eindeutig*; der jeweils niedrigste Level im $Q \neq 0$–Sektor zeigt exponentielle Konvergenz (*Ein*teilchenzustand) in N, alle anderen Levels haben Potenzkonvergenz, d. h. es existieren *zwei* fundamentale Teilchen, die bei $\varphi = 0$ entarten ($m_1 = m_2$) und für $0 < \varphi < \frac{\pi}{2}$ gilt $m_2 < 2m_1$, wobei mit wachsendem φ m_1 abnimmt und m_2 zunimmt (s. Tabellen 1 und 2). Mit $\varphi \uparrow \frac{\pi}{2}$ (superintegrabel $\Rightarrow$ zwangsläufig $\lambda \downarrow 0$, um im nicht–hermiteschen Bereich zu bleiben (s. auch Diagramm 1) folgt (in Übereinstimmung mit [44]) : $m_2 = 2m_1$. Das Massenverhältnis $\frac{m_1}{m_2}$ fällt bei $\varphi = const$ mit wachsenden λ–Werten sehr langsam und kontinuierlich ab; der Übergang in den hermiteschen Bereich des Parameterraumes erfolgt dabei — wie die Stetigkeit der Energieeigenfunktionen erwarten läßt — *stetig* (s. Tabelle 3). Die Schwellencharakteristika in den Q–Sektoren im nicht–hermiteschen Bereich stimmen mit denen des hermiteschen überein (siehe Diagramm 2). In den Diagrammen 18 bis 21 ist das niedrigliegende Spektrum zuerst für alle Ladungssektoren zusammen, dann wegen der dichtliegenden Punkte gesondert für jeden Q–Sektor dargestellt : aufgrund der Symmetrie (s. 2.6) ist die Impulsskala nur von 0 bis π aufgetragen; man beachte auch, wie gut die Einteilchenzustände auf den gestrichelt eingetragenen Klein–Gordon–Kurven (s. auch 2.7.1) liegen. Eine Bänderstruktur der Streuzustände ist klar erkennbar.

Dennoch sind einige Kommentare zu den Tabellen 4 bis 9 nötig :

diese Tabellen sind *repräsentativ* für den unteren Winkelbereich und zum Vergleich jeweils beim *gleichen* Winkel, $\varphi = \frac{\pi}{4}$, aber verschiedenen λ–Werten $(0.2, 0.4, 0.6)$ gewählt worden. Man beachte dabei insbesondere folgende Tatsachen : bei allen *exponentiell* konvergenten Levels (wohl auch in Tabelle 4 für den $Q = 1$–Level) tritt ein Effekt auf, der auf eine *inkommensurable* Phase hindeutet : ab einer gewissen Kettenlänge (in den Beispielen ist $N \approx 7 \pm 2$) *ändert* sich die Charakteristik der Folge; bei zunächst fallenden Werten mit wachsender Kettenlänge nehmen diese dann wieder geringfügig zu (beim $Q = 2$–Level wächst dieser Wert der Kettenlänge mit größer werdendem λ). Auf die y_N–Folge (36) hat dies auf den ersten Blick absurd erscheinende Konsequenzen : damit man die entsprechenden y_N überhaupt noch ermitteln kann, ist es in (36) erforderlich, *Beträge* zu betrachten. In den Tabellen 7, 8 und 9 erhält man demzufolge *fallende* Teilfolgen, ja sogar *negative* Werte für y_N. Bedenkt man jedoch, daß für $N \geq 12$ dieser Effekt *nicht* wiederkehren sollte, so ist die Annahme der *exponentiellen* Konvergenz dieser Levels doch gerechtfertigt (bei $\lambda = 0.2$ spielt der Extrapolationswert für $N \to \infty$ noch eine gewisse Rolle !).

Ein zweiter Punkt ist die teilweise (scheinbar sehr) schlechte Konvergenz der Extrapolationswerte für $N \to \infty$, insbesondere im $Q = 2$–Sektor, was mit zunehmendem λ immer mehr Einfluß auch auf den $Q = 0$–Sektor, aber nicht auf den $Q = 1$–Sektor, nimmt, denn es gilt : 1) $m_1 < m_2$, 2) $\mathrm{Re}(\Delta E_{0,1}) = m_1 + m_2$, 3) $m_2(\lambda = 0.2) \approx 1.78 m_2(\lambda = 0.6)$ und 4) $m_2 \approx 2m_1$ bei $P \approx \frac{2\pi}{3}$ ($\lambda = 0.6$) oder mit anderen Worten : je größer der λ–Wert ist, desto näher kommt der isolierte niedrigste $Q = 2$–Level bei $P \approx \frac{2\pi}{3}$ dem niedrigsten $Q = 2$–Band, während der isolierte niedrigste $Q = 1$–Level noch *unter* dem untersten $Q = 2$–Level liegt. Für die *komplexen* Kompositzustände in $Q = 0$ hat dies Konsequenzen, da sie sich (im allgemeinen) aus Impulsen $P \neq 0$ (s. unten) zusammensetzen. Daher weisen insbesondere die y–Werte für $\lambda = 0.6$ größere (geschätzte) Fehler auf als diejenigen für $\lambda = 0.2$. — Einen geradezu umgekehrten Effekt — bezüglich des λ–Wertes — erkennt man in den Tabellen 4, 5 und 6 allein schon an der *Anzahl* der aufgeführten – und zwischendurch *fehlenden (!)* — Levels im $Q = 2$–Sektor (in jedem Q–Sektor werden die Levels mindestens bis zum ersten (konjugiert–)*komplexen* Kompositzustand (leicht erkennbar daran, daß der Index i dort für *zwei* Levels steht) aufgeführt) : bei Betrachtung der Levelzuordnungsdiagramme (Diagramme 4 bis 12) wird deutlich, warum. Die Reihenfolge der — bezogen auf variable Kettenlänge N — zueinandergehörigen Levels weist bei kleinen λ–Werten wesentlich mehr Kreuzungen auf als bei größeren λ–Werten. Die "richtige" Zuordnung der Levels ist nicht "trivial" und oft dem optisch ästhetischen Eindruck überlassen, (der den "natürlichen" Verlauf der Eigenwerte impliziert,) nicht zuletzt weil die Kurven in den Levelzuordnungsdiagrammen *extrem* steil verlaufen (höhere Levels), was die Angelegenheit wirklich sehr schwierig bis unmöglich macht, zumal einige Levels (offenbar) erst bei $N \approx 8$ anfangen und/oder "dicht" beieinander liegen, sodaß eine *eindeutige* Zuordnung nicht mehr möglich erscheint (leider läßt sich (bislang) nur bis $N = 12$ rechnen). Auf diese Weise mag es verständlich erscheinen, daß im $Q = 2$–Sektor einige Levels ausgelassen worden sind und auch das "?" in Tabelle 5 bei $\Delta E_{2,8}$ erklärt sich somit.

Die manchmal recht schlechte Konvergenz der — insbesondere *komplexen* — Levels für $N \to \infty$ ruft in natürlicher Weise noch erheblich größere (geschätzte) Fehler bei der Extrapolation für den y–Wert hervor, was zu "good–will"–Interpretationen des Teilcheninhalts führt (es sind in solchen Fällen alle Möglichkeiten, aus *welchen* und *wievielen* Teilchen sich der Level zusammensetzen kann, zu betrachten). Dennoch sind die Teilcheninhalte fast immer eindeutig (Ausnahme : Tabelle 5, $\Delta E_{0,4}$). Erfreulicherweise ist — bis evtl. auf diese Ausnahme — die *Ladung* der Kompositzustände immer konsistent mit dem Ladungssektor, in dem sie vorkommen (Ladung ist *additiv* mod($n = 3$)). Die bisweilen schon großen Extrapolationsfehler für $N \to \infty$ bei den *komplexen* Levels und demzufolge *Abweichungen* von den fundamentalen Teilchen mit rein *reellen* Eigenwerten (Impuls $P = 0$–Zustände) implizierten Werten (für die Masse) *generell* nach *oben (!)*, sind einfach zu verstehen : komplexe Levels müssen sich im thermodynamischen Limes *additiv* aus *komplexen* fundamentalen Teilchen zusammensetzen (d. h. $P \neq 0$–Zustände) unter Berücksichtigung der Impulserhaltung; bei *genügend* kleinen λ–Werten ist das Energieniveau bei $N = 12$ Gitterpunkten schon (praktisch) identisch mit dem Wert im thermodynamischen Limes, sodaß man die Additivität auf das endliche System anwenden kann. Bei den Energie–Impuls–Dispersionskurven bilden die $P = 0$–Zustände (bei beiden fundamentalen Teilchen) die *Minima*, $P \neq 0$–Zustände haben also einen größeren Re–Teil ! Prüft man dies explizit, so stellt man fest, daß die angegebenen $N = \infty$–Werte damit in der Tat *konsistent* sind ! **Diese Erkenntnis ist der Schlüssel zum Verständnis der Konvergenz der Im–Teile dieser Levels !** Da der Impuls $P = 0$ bei *jeder* Kettenlänge N existiert, aber nicht ein ganz spezieller Impuls P_0, *nicht* notwendig ganzzahlig (mod$\frac{2\pi}{N}$), den ein spezieller komplexer Level im *unendlichen* System hat (offenbar setzen sich diese Levels *eindeutig* aus solchen speziellen Impulsen zusammen (sehr zuverlässige Kontrolle anhand der Im–Teile möglich)), ist der komplexe Level im *endlichen* System unter Impulserhaltung genötigt, sich aus den sich anbietenden (= vorhandenen) Impulsen zusammenzusetzen. Bei Betrachtung der Energie–Impuls–Dispersionskurven (s. z. B. Diagramme 24 und 25) der fundamentalen Teilchen wird klar, daß sich jener komplexe Level bei jeder Kettenlänge N im allgemeinen aus *anderen* Impulsen zusammensetzt, die, aus naheliegenden Gründen, möglichst nahe bei den eigentlichen Impulsen, aus welchen er sich im unendlichen System zusammensetzt, zu liegen haben. Dabei "wandert" der komplexe Level auf den Dispersionskurven bei variablem N, d. h. der Im–Teil ist für $N \to \infty$ *oszillatorisch konvergent* gegen den Im–Teil, den man bei den Impulsen $P_{Q,0}$ auf den Dispersionskurven findet ! *Allerdings* heißt dies auch, daß der *Re*–Teil (= Masse) des komplexen Levels mit wachsendem N mal steigt, mal fällt, je nachdem, ob die bei endlicher Kette günstigsten Impulse kleiner oder größer als $P_{Q,0}$ sind (um genauer zu sein : da es sich um einen *Mehr*teilchenzustand handelt, haben die verschiedenen Beiträge gegebenenfalls unterschiedlichen Einfluß bei diesem Effekt, was äußert sorgfältige Auswahl der Impulse (Im–Teile) in den Daten erfordert, um diesen Effekt zu erkennen). Dieser Sachverhalt läßt die zwar mit wachsender Kettenlänge *generell fallende* Re–Teil–Folge für komplexe Level aber *unregelmäßig* fallen (mal "stärker" als "normal", mal umgekehrt ("normal" bezieht sich hier auf eine analoge (fiktive) Folge, bei der immer $P = 0$–Zustände vorliegen)). Diese offenbare Tatsache überfordert das VBS–Verfahren total, das BST–Verfahren erzeugt (relativ) große Schätzfehler (diese sind in den genannten Extrapolationsverfahren als *Differenzenfehler* angesetzt).

Im allgemeinen sind die N–Extrapolationswerte mit dem BST–Verfahren berechnet (Parameterbereich $[-2.5; 2.5]$), während die y–Extrapolationswerte mit dem VBS–Verfahren ($[-1.5; 1.5]$) erhalten werden. Es wird immer dieser ganze Parameterbereich in Schritten von 0.01 durchgerechnet, wobei *glaubhafte* Werte bei unterschiedlichen Parameterwerten (*Stabilitätszonen*) (meist BST : $[0.4; 0.9]$ und $[1.8; 2.2]$, VBS : $[-1.1; -0.8]$ und $[0.4; 1.1]$) auftreten.

2.5.2 Interpretation des Spektrums im oberen Winkelbereich

Um das Spektrum in diesem Bereich zu verstehen, bedarf es zunächst einiger Erläuterungen.

Die *Phasengrenze* massiv–masselos verläuft (teilweise) durch diesen Bereich (s. Diagramm 30). In der *massiven* Phase liegt der *eindeutige* Grundzustand im Sektor $Q_P = 0_0$ und ist *reell* genau dann, wenn $N \bmod (n = 3) = 0$ gilt, sonst komplex; allerdings *konvergiert* der Im–Teil des Grundzustandes bei solchen Kettenlängen für $N \to \infty$ *oszillatorisch* gegen Null, wobei der *Betrag* des Im–Teils der Kettenlängen $N \bmod (n = 3) \neq 0$ *monoton* gegen Null konvergiert. Oszillatorisch bedeutet, daß das Vorzeichen des Im–Teils derjenigen Kettenlängen, die zwischen zwei aufeinanderfolgenden Kettenlängen, die $N \bmod (n = 3) = 0$ genügen, liegen, *gleich* ist, und die Im–Teile, die zwischen den nächsten beiden aufeinanderfolgenden Kettenlängen, die der Restriktion folgen, anderes Signum haben. Formelmäßig gilt näherungsweise (siehe auch Tabelle 11) :

$$\mathrm{Im}E_0 \approx \alpha e^{-\beta N} \sin(\gamma n m + \delta) + \epsilon \qquad \text{mit} \quad \gamma n m + \delta \overset{!}{=} k\pi, k \in \mathbb{Z}, m \in \mathbb{N}$$

Dabei sind $\alpha, \beta, \gamma, \delta, \epsilon$ abhängig von λ und φ; hier ist $\epsilon = \mathrm{Im}E_0(N = \infty) \equiv 0$ (diese Formel gilt auch für den Im–Teil der Levels, wobei darin $\epsilon = \mathrm{Im}E_{Q,i}(N = \infty)$ ist, aber $\gamma n m + \delta$ nicht notwendig ein ganzzahliges Vielfaches von π sein muß). Dieses Alternieren ist verständlich, wenn man die Wirkung der Kopplungskonstanten (3) in Betracht zieht : hier gilt $\mathrm{Re}\Phi = \pi$, also ein *zusätzlicher* komplexer Faktor $e^{\pm i\frac{\pi}{3}} \in \mathbb{C}$ vor den Γ_j. Diese Faktoren sind verantwortlich für die komplexen Grundzustände (bei entsprechenden Kettenlängen) ($\Rightarrow$ *ganzes* Spektrum (auf dem Gitter) rein komplex), die Periodizität des Spektrums ("Rotationseffekt") und für die Q–abhängigen Phasenverschiebungen (diese hängen auch von der $\mathbb{Z}_n$–Symmetrie ab). Dazu im einzelnen :

Setzt man $\Phi := x + iy$, so erhält man (β_k ist in (3) definiert) :

$$\sin\left(\frac{\pi}{n}k\right)\beta_k = e^{i\Phi\left(\frac{2k}{n}-1\right)} = \underbrace{e^{ix\left(\frac{2k}{n}-1\right)}}_{\text{Phasenfaktor}} \; e^{-y\left(\frac{2k}{n}-1\right)} =: e^{ix\left(\frac{\gamma_k}{\delta_k}\right)} e^{-y\left(\frac{2k}{n}-1\right)}$$

Dabei seien γ_k und δ_k *teilerfremd*. Setzen von

$$\delta := \max_{1 \leq k \leq n-1} \{\delta_k\} = \left\{ \begin{array}{ccc} n & : & n \;\; \text{ungerade} \\ \frac{n}{2} & : & n \;\; \text{gerade} \end{array} \right\} \qquad (39)$$

zeigt, daß das $\mathbb{Z}_n$–Modell $2\pi\delta$–periodisches Spektrum in Φ besitzt, denn x nimmt (im nicht–hermiteschen Bereich) nur ganzzahlige Vielfache von π an (wegen (19)) (φ und Φ jetzt nicht auf $[0,\pi]$ eingeschränkt) und die komplexe Exponentialfunktion ist $2\pi i$–periodisch (siehe auch (16)). — Für φ gilt Analoges.

Die numerischen Daten liefern, daß *nur* bei $N \bmod n = 0$ (n allgemein) Eigenwerte aus dem unteren Winkelbereich modulo Signum auf den oberen abgebildet werden (die entsprechenden Matrizen sind verschieden), gemäß (μ Eigenwert (*nicht* reskaliert)) : (beim Symbol $\mp$ bezieht sich das obere Vorzeichen auf den nicht–hermiteschen Bereich, das untere auf den hermiteschen; hier ist P mod $\frac{2\pi}{N}$)

$$\begin{aligned} \mu &\;\rightarrow\; -\mu \\ Q_{(P_{Q,Min}+P)\bmod 2\pi} &\;\rightarrow\; (n-Q)_{\left(P_{(n-Q),Max}\mp P\right)\bmod 2\pi} \qquad \text{für} \quad Q=1,(1),n-1 \\ 0_P &\;\rightarrow\; 0_{(2\pi\mp P)\bmod 2\pi} \end{aligned} \tag{40}$$

bei ($\alpha := \frac{\pi}{2} - \varphi$)

$$\lambda \;\rightarrow\; \lambda, \qquad \frac{\pi}{2} - \alpha \;\rightarrow\; \frac{\pi}{2} + \alpha \qquad \Rightarrow \quad \frac{\pi}{2} - \mathrm{Re}\Phi \;\rightarrow\; \frac{\pi}{2} + \mathrm{Re}\Phi \tag{41}$$

Diese Beziehungen sind *nicht* für das integrable Modell spezifisch; sie gelten z. B. auch im selbstdualen Fall.

Entsprechende Beziehungen ergeben sich, wenn man φ jeweils am nächstliegenden ganzzahligen Vielfachen von $\frac{\pi}{2}$ spiegelt. Dies werde als *Rotationseffekt* bezeichnet (Q_P–Sektoren rotieren); diese Beziehung gilt auch im hermiteschen Bereich. Dieser erklärt sich durch die *festen*, Q–abhängigen Phasenverschiebungen (siehe unten). Für N mod $3 = 0$ gibt es dabei nur *zwei verschiedene* reelle Grundzustandsenergien (z. B. sind die Grundzustände für $0 \le \varphi < \frac{\pi}{2}$ und $\frac{\pi}{2} < \varphi \le \pi$ verschieden), daher genügt es auch, φ auf $[0,\pi]$ einzuschränken. Bei N mod $3 \neq 0$ existieren bei Durchlaufen des φ–Winkelbereich von 0 bis 6π 1 (reeller) + 4 (komplexe) + 1 (anderer reeller) + 4 (komplex konjugierte) = 10 verschiedene Grundzustände. Nach einer halben Periode ($= 2\pi(n=3)\frac{1}{2} = 3\pi$, d. h. $-\mathcal{H}$ (s. (16))) setzt ein permutierender Umkehreffekt der komplex *konjugierten* Grundzustände ein. Auch dies deutet darauf hin, daß solche N gesondert betrachtet werden müssen.

Die Dispersionsrelationen der beiden fundamentalen Teilchen — wobei die Kurve für das im *nicht*–hermiteschen Bereich *bei jedem Impuls existierende* m_2–Teilchen im Diagramm 22 im $Q = 2$–Kontinuum liegt (aber aufgrund der *exponentiellen* Konvergenz (y–Wert (36)) erkannt werden kann) und im Diagramm 23 zwischen den beiden untersten Streubändern — sind phasenverschoben; im *gesamten* oberen nicht–hermiteschen Bereich um den *festen*, Q–abhängigen Betrag $\pm\frac{\pi}{3}$.

Die *Extrema* der Dispersionskurven haben *reelle* Eigenwerte, d. h. bei $P_{Q,Extr} = \{P_{Q,Min}, P_{Q,Max}\}$; *symmetrisch* um diese sind die Eigenwerte komplex konjugiert angeordnet (analog wie im unteren Winkelbereich, dort gilt : $P_{Q,Min} = 0, P_{Q,Max} = \pi \stackrel{\wedge}{=} \frac{N}{2}, Q = 1,2$ (weil $\mathrm{Re}\Phi \equiv 0$)), sie sollen deshalb auch *Symmetrieimpulse* P_{Symm} genannt werden. Auf der Grenzkurve, $\lambda = |\cos(\varphi)|, \frac{\pi}{2} < \varphi \le \pi$, gilt dann eine *verschobene*, Q–abhängige *Paritätserhaltung* (im $Q = 0$–Sektor ist $P_{Symm} = 0, \pi$) ! Mit dem $\mathcal{P}$–Operator (10) kann dies *nicht* bewiesen werden (s. dazu auch in 2.6.1).

Die Symmetrieimpulse für $Q \neq 0$ lauten :

$$P_{Symm}\frac{2\pi}{N} = 0, \pi \qquad \text{für unteren Winkelbereich} \tag{42}$$

$$P_{Symm}\frac{2\pi}{N} = \frac{\pi}{3}, \frac{4}{3}\pi; \frac{2}{3}\pi, \frac{5}{3}\pi \qquad \text{für oberen Winkelbereich} \tag{43}$$

Wegen der 2π–Periodizität des Spektrums entspricht $\frac{5}{3}\pi \stackrel{\wedge}{=} -\frac{\pi}{3}$.

Für $Q = 0$ ist auch im oberen Winkelbereich $P_{Symm} = 0, \pi$.

Die störungstheoretische Formel [45] [55] [56] für die Phasenverschiebung (in niedrigster Ordnung) lautet

$$P_0 = \left(1 - \frac{2Q}{n}\right)\Phi \tag{44}$$

Dies ist konsistent mit P_{Symm}, wenn man für Φ den *Re*–Teil einsetzt. D. h., die Koeffizienten *aller* höheren Ordnungen verschwinden *identisch*. Durch Einsetzen von $Q := n - k$ in (44) erhält man den wesentlichen Teil von β_k (3) :

$$\left(1 - \frac{2Q}{n}\right)\mathrm{Re}\Phi = \left(1 - \frac{2\,(n-k)}{n}\right)\mathrm{Re}\Phi = \left(\frac{2k}{n} - 1\right)\mathrm{Re}\Phi \tag{45}$$

Weil diese Symmetrieimpulse für $N \bmod 3 \neq 0$ *nicht* auf dem Gitter *realisiert* sind, ist auch der *Grund*zustand (aus Symmetriegründen) betroffen und wird im oberen nicht–hermiteschen Bereich komplex (aber eindeutig, da konjugiert komplexer Eigenwert dazu nicht auf dem Gitter realisiert). Dies macht auch die Tatsache verständlich, daß der Im–Teil des Grundzustandes solcher Kettenlängen für $N \to \infty$ gegen Null konvergiert ! Daß dies tatsächlich *generell* zutrifft, wird *stichprobenweise* an Modellen mit höherer $\mathbb{Z}_n$–Symmetrie (n=4,5,8) geprüft. Es gilt (N endlich) :

$$\text{Grundzustand reell} \quad\Longleftrightarrow\quad \left\{\begin{array}{lcll} N \bmod n = 0 & : & n & \text{ungerade} \\ N \bmod \frac{n}{2} = 0 & : & n & \text{gerade} \end{array}\right\} \tag{46}$$

Bei $n = 8$ hat man eine *Doppel*alternierung des Vorzeichens zwischen zwei Kettenlängen mit $N \bmod (\frac{8}{2} = 4) = 0$ wegen verschiedener Phasenfaktoren in den Kopplungskonstanten : $e^{\pm\frac{3}{4}\pi i}, e^{\pm\frac{1}{2}\pi i}, e^{\pm\frac{1}{4}\pi i}, 1$.

Auch der Rotationseffekt ist nun vollständig zu verstehen : die Summe der Symmetrieimpulse ist immer 4π; nach 4 Spiegelungen von φ an ganzzahligen Vielfachen von $\frac{\pi}{2}$ tragen die Koeffizienten vor den Γ_j–Operatoren den Faktor $e^{i4\frac{\pi}{2}\frac{1}{3}} = e^{i\frac{2\pi}{3}} \neq 1$, nach 6 Rotationen $e^{i\pi} = -1$ (d. h. $-\mathcal{H}$) und nach 12 Rotationen $e^{i2\pi} = 1$ (und $12 * \frac{\pi}{2} = 6\pi \overset{(39)}{=} 2\pi(n=3)$).

In diesem Zusammenhang sei erwähnt, daß im massiven nicht–hermiteschen oberen Bereich das *Spektrum* des $Q = 2$–Sektors sein *Minimum* beim Symmetrieimpuls $P_{Symm} = \frac{N}{3} \mathrel{\hat{=}} \frac{2}{3}\pi$ und *Maximum* bei $P_{Symm} = \frac{5}{6}N \mathrel{\hat{=}} \frac{5}{3}\pi$ hat — gerade invers zur Verteilung der Extrema der m_2–Dispersionskurve. Beim $Q = 1$–Sektor sind die Symmetrieimpulse von Spektrum und m_1–Teilchen gleich (dort ist auch die Dispersionskurve der unterste Level). Im $Q = 0$–Sektor sind die Symmetrieimpulse $P_{Symm} = 0, \frac{N}{2} \mathrel{\hat{=}} \pi$. Dies läßt sich in eine Formel fassen, die *Spektrums*verschiebung genannt werden soll :

$$P_{Q,SpekExtr} = \frac{2\pi}{N}\left(((n-Q) \bmod n)\,\frac{N}{n} + \frac{N}{2}\right) \bmod N \tag{47}$$

Das Minimum befindet sich bei ($Q \neq 0$) :

$$\begin{aligned} Q\frac{\mathrm{Re}\Phi}{m} \quad &= \quad P_{Q\neq 0,SpekMin} = \min\left(\frac{2\pi}{N}\left(((n-Q) \bmod n)\,\frac{N}{n} + \frac{N}{2}\right) \bmod N\right) \overset{!}{>} 0 \\ &\text{mit} \quad m = \left\{\begin{array}{lcll} n & : & n & \text{ungerade} \\ \frac{n}{2} & : & n & \text{gerade} \end{array}\right\} \end{aligned} \tag{48}$$

Im Sektor $Q = 0$ liegt das Minimum nicht immer bei $P = \pi$.

Demnach ist der *niedrigste* Eigenwert im Q–Sektor bei Kettenlängen N zu erwarten bei :

$$P_{Q,SpekMin} = lQ \bmod \frac{2\pi}{N} \tag{49}$$

wobei $l = 0$ bei Start von $N = 2$ gesetzt und um 1 erhöht wird, wenn in (48) ein P (in teilerfremder Darstellung) den Nenner 2 hat; dann existieren bei *zwei* Impulsen Eigenwerte mit gleichem Re–Teil als niedrigste Level (siehe Phasengrenze, Abschnitt 3). Dies tritt bei $n = 3$ typischerweise bei *un*geradzahligen Vielfachen der Kettenlänge 3 auf. Im $Q = 2$–Sektor kommt es dann zu einer *Anomalie* : wegen $P_{2,SpekMin} = 2l, 2l + 2$ hat der Symmetrieimpuls des Spektrums $P_{2,SpekSymm} = 2l + 1$ einen *höher* liegenden Eigenwert als die benachbarten Impulse ! Bei $\mathbb{Z}_n$–Symmetrie gilt dies im $Q \neq 0$–Sektor allgemein bei Impulsen $P = Ql, (Q(l + 1)) \bmod N$.

Mit Eintritt in die masse*lose* Phase geschehen viele Grundzustandsänderungen (möglich, weil das Perron–Frobenius–Theorem nicht greift, siehe auch Fußnote in Abschnitt 3) in den Q_P–Sektoren; je mehr man sich $\varphi \uparrow \pi$ (und $\lambda \uparrow 1$) nähert, desto "dichter" liegen die einzelnen Phasen, und wenn der Grundzustand im $Q = 0$–Sektor erscheint, dann bei $0_{\frac{N}{2}}$ (*anti*ferromagnetische Phase). Interessant ist noch, daß man bei $\varphi = \pi$ eine Art CP–Symmetrie hat (auch im hermiteschen Bereich), siehe (40) und (54), die bei $N \bmod 3 = 0$ die Sektoren 1 und 2 verknüpft, bei $N \bmod 3 \neq 0$ dagegen gilt : der Ladungssektor Q, für den $(N + Q) \bmod 3 = 0$ gilt, wird auf sich selbst abgebildet (d. h. gleiche Eigenwerte) ($Q_P \to Q_{(N-P) \bmod N}$), die anderen ebenso : d. h. $Q = 0$ und $\tilde{Q}$, wobei $(N - \tilde{Q}) \bmod 3 = 0, 0_P \to \tilde{Q}_{(N-P) \bmod N}$. Insbesondere kommt es bei $N \bmod 3 \neq 0$ (für $\varphi = \pi$) *nicht* schon für $\lambda < 1$ zur Ausbildung (für kleine N) eines rein reellen Spektrums — im Gegensatz zum $\varphi = 0$–Fall, was nochmals bestätigt, daß solche Kettenlängen N *nicht* zum System gehören.

Nun kann die Interpretation des Spektrums erfolgen :

Kettenlängen mit $N \bmod 3 \neq 0$ müssen (bei finite–size–Rechnungen) herausgenommen werden, da nicht nur der Grundzustand komplex (komplexe Casimir–Energie) ist, sondern das ganze Spektrum, d. h. alle *reellen* Kompositzustände sind mit einem (in der Größe *nicht* zu bestimmenden) komplexen Anteil gestört, der auch deutlich Einfluß auf den Re–Teil ausübt ! Es existieren *keine konjugiert*–komplexen Levels mehr, deren Re–Teile sind *verschieden* stark beeinflußt. Dies macht es *unmöglich*, gleiche Levels bei verschiedenen Kettenlängen zuzuordnen. Dies tritt auch im *hermiteschen* Bereich auf — allerdings nicht so ausgeprägt (weil dort keine Im–Teile vorhanden sind). Zwar *sollten* die Levels der Serien $N \bmod 0, 1, 2$ jeweils getrennt für $N \to \infty$ gegen den *gleichen* Wert konvergieren (der Grundzustand für $N = \infty$ ist *reell* !), jedoch sind diese Effekte bis $N = 12$ zu groß, um sie zu trennen. *Deshalb* können bei finite–size–Rechnungen nur Kettenlängen, die $N \bmod 3 = 0$ erfüllen, betrachtet (d. h. $N = 3, 6, 9, 12$) werden. Da aber das Minimum auf der Dispersionskurve für beide Teilchen nach 43) auf Seite 19 nur bei Kettenlängen $N \bmod 6 = 0$ auftritt, hat man folglich nur zwei Werte; explizites Prüfen bei diesen Kettenlängen, wie sich die Levels zusammensetzen ("Im–Teil–Konstruktion") und Abschätzen, wohin die Re–Teile dieser Kompositzustände konvergieren (siehe Tabelle 10), bestätigt das Quasiteilchenspektrum : das m_2–Teilchen *existiert* bei *jedem* Impuls P (in der massiven Phase), es gilt : $m_2 > 2m_1$. In Tabelle 10 sind die Levels derjenigen Impulssektoren der Q–Sektoren aufgelistet, die dem *Minimum* der Dispersionskurven nach (48) und für $Q = 0$ ($P_{0,SpekMin} = \pi$) entsprechen; man findet (unter anderem) dort auch wieder konjugiert–komplexe Eigenwertpaare. Die untersten Kompositzustände in den einzelnen Q–Sektoren, $3m_1, 4m_1$ und $2m_1$, sind — sofern sie *komplex* erscheinen — aus *verschiedenen* Impulsen zusammengesetzt — mit der Restriktion in (38); für den $3m_1$–Level in $Q = 0$ ist dies *theoretisch* auch möglich — er könnte sich z. B. aus einem reellen und zwei, zueinander konjugiert komplexen Eigenwerten (Im–Teil–Kompensierung !) zusammensetzen : $m_1(P_1) + m_1(P_2) + m_1(P_3)$ mit $\left(\sum_{k=1}^{3} P_k\right) \bmod 2\pi = \pi$; er scheint aber aus $3m_1(P_{1,Min} = \frac{\pi}{3}) = 3 * 0.37 = 1.11$ zu bestehen. Somit erklärt sich im Schwellendiagramm 2 die Tatsache, daß die Längen für $3m_1, 4m_1$ und $2m_1$ *nicht* (notwendig) proportional zu den *Abstands*faktoren sind. Auf der superintegrablen Linie gelten *Fermi*–Auswahlregeln [21]. Ob diese hier auch gelten oder nicht, läßt sich aus den numerischen Daten nicht eindeutig beantworten; obiger Zustand $3m_1$ könnte sich z. B. auch aus Impulsen $P_{1,Min}$ und $P_{1,Min} \pm \epsilon, \epsilon$ klein, zusammensetzen, den Fermi–Auswahlregeln genügen und wegen der Im–Teil–Kompensierung (Impulse symmetrisch um $P_{1,Min}$) reell bleiben.

2.6 Symmetrie des Spektrums des gesamten nicht–hermiteschen Bereichs

2.6.1 Symmetrie der Hamilton–Matrix

Mittels charakteristischem Polynom ist eine Aussage hinsichtlich des Vorkommens *konjugiert–komplexer* Eigenwerte bei der Hamilton–Matrix H möglich (siehe Anhang C.5) : hat des charakteristische Polynom einer Matrix nur *reelle* Koeffizienten, so sind die zugehörigen Eigenwerte der Matrix reell bzw. konjugiert–komplex. — Sind andererseits die Eigenwerte einer *Matrix* bekannt und reell bzw. konjugiert–komplex, so kann das zugehörige charakteristische Polynom nur reelle Koeffizienten aufweisen; diese Folgerung resultiert durch Kombination von Faktorisierungssatz und Korollar des Fundamentalsatzes der Algebra, denn das charakteristische Polynom einer Matrix ist ein auf 1 (d. h. in (88) ist $a_n = 1$ und damit reell) normiertes Polynom.

Wenn H eine *reelle* Matrix ist, so hat das charakteristische Polynom trivialerweise nur reelle Koeffizienten.

1) $\mathrm{Re}\Phi = 0$ (unterer Winkelbereich)

   Hier ist der Hamilton–Operator $\mathcal{H}$ (16) *reell un*symmetrisch.
   Wenn die Impulskoeffizienten *reell* sind, bleibt auch H *reell* unsymmetrisch.
   Für Impuls $P = 0$ (alle Koeffizienten $= 1$) ist dies *immer* gegeben.
   H ist auch dann reell unsymmetrisch, wenn N gerade und $P = \pi \mathrel{\hat{=}} \frac{N}{2}$ ist (alle Koeffizienten ± 1).
   Es gilt ($N \in \mathbb{N}\backslash\{1\}$, $0 \leq P \leq N-1$) :

$$e^{-\frac{2\pi i}{N}(N-P)} = e^{\frac{2\pi i P}{N}} \underbrace{e^{-2\pi i}}_{=1} = e^{\frac{2\pi i P}{N}} = \overline{e^{-\frac{2\pi i P}{N}}} \tag{50}$$

   $\Rightarrow$ Matrizen H_k für Impuls $P = k$ und H_{N-k} für Impuls $P = N-k$ ($1 \leq k \leq N-1$) sind zueinander *komplex* konjugiert (*nicht* hermitesch konjugiert, denn die Matrixeinträge sind komplex konjugiert) : $H_k = \overline{H}_{N-k}$
   Nun haben $\overline{H}_{N-k}$ und H^H_{N-k} dieselben Eigenwerte
   $\Rightarrow$ H_k und H_{N-k} haben zueinander komplex *konjugierte* Eigenwerte (siehe Parität, 2.6.2); (zur Symmetrie ist es auch erforderlich, daß entsprechende Matrizen gleiche Dimension haben)

2) $\mathrm{Re}\Phi = \pi$ (oberer Winkelbereich)

   Der Hamilton–Operator $\mathcal{H}$ ist hier *komplex un*symmetrisch $\Rightarrow$ H auch
   in Abhängigkeit von Q (wegen Phasenverschiebung) existieren P–Sektoren ("Symmetrieimpulse"), in denen konjugiert–komplexe Eigenwerte vorkommen und *symmetrisch* um diese Sektoren haben die Matrizen $H_{P_{Q,Symm}\pm k}$ zueinander komplex konjugierte Eigenwerte (verschobene Parität), ohne daß dies den Matrixeinträgen offensichtlich zu entnehmen ist (siehe zweite Aussage im Vorspann).

$$Q=0 : P = 0, \frac{N}{2} \mathrel{\hat{=}} \pi; \qquad Q=1 : P = \frac{N}{6} \mathrel{\hat{=}} \frac{\pi}{3}, \frac{2}{3}N \mathrel{\hat{=}} \frac{4}{3}\pi; \qquad Q=2 : P = \frac{N}{3} \mathrel{\hat{=}} \frac{2}{3}\pi, \frac{5}{6}N \mathrel{\hat{=}} \frac{5}{3}\pi \tag{51}$$

   Ein Beweis für die Symmetrieimpulse steht noch aus.

   Daher ist klar, daß bei Kettenlängen N für auf dem Gitter *realisierten* Impulse P gilt :
   für $N \bmod (n=3) \neq 0$ existieren für *kein* Q und P konjugiert–komplexe Eigenwerte;
   für $N \bmod (n=3) = 0$ *existieren* konjugiert–komplexe Eigenwerte in P–Sektoren, abhängig von Q; allerdings nur *ein* Sektor (d. h. *Minimum* oder *Maximum* realisiert), es sei denn, es gelte *zusätzlich* $N \bmod 2 = 0$ ($\Rightarrow N \bmod 6 = 0$).

2.6.2 Symmetrie des Hamilton–Operators

Es soll nun festgestellt werden, welche (*lokalen*) Symmetrien der Hamilton–Operator (16) besitzt.

Dabei sind aus Periodizitätsgründen $\varphi, \mathrm{Re}\Phi \in [0, 6\pi[$, $\Phi = x + iy$.

P–Invarianz — Parität

Anwendung des in (10) definierten Paritätsoperators auf $\mathcal{H}$ liefert :

$$\begin{aligned}
\mathcal{PHP}^\dagger &= -\frac{2}{\sqrt{3}} \sum_{j=1}^{N} \left(e^{-i\frac{\varphi}{3}} \sigma_{N-j+1} + e^{i\frac{\varphi}{3}} \sigma^\dagger_{N-j+1} + \lambda \left(e^{-i\frac{\Phi}{3}} \Gamma_{N-j+1} \Gamma^\dagger_{N-j} + e^{i\frac{\Phi}{3}} \Gamma^\dagger_{N-j+1} \Gamma_{N-j} \right) \right) \\
&= -\frac{2}{\sqrt{3}} \sum_{k=0}^{N-1} \left(e^{-i\frac{\varphi}{3}} \sigma_{k+1} + e^{i\frac{\varphi}{3}} \sigma^\dagger_{k+1} + \lambda \left(e^{-i\frac{\Phi}{3}} \Gamma^\dagger_{k} \Gamma_{k+1} + e^{i\frac{\Phi}{3}} \Gamma_{k} \Gamma^\dagger_{k+1} \right) \right) \\
&\quad \text{(Indexverschiebung und } \Gamma_0 := \Gamma_N) \\
&\stackrel{!}{=} \mathcal{H} \quad \Rightarrow \quad (\Phi = 0, 3\pi \quad \vee \quad \lambda = 0) \qquad (52)
\end{aligned}$$

Aus diesen Betrachtungen geht hervor, daß im *unteren* Winkelbereich des nicht–hermiteschen Bereichs die *Parität* bezüglich des *Re*–Teils *erhalten* ist, die Im–Teile der miteinander korrespondierenden Impulssektoren (s. 1) in 2.6.1) sind zueinander konjugiert–komplex. In den Impulssektoren $P = 0$ und, wenn N, die Kettenlänge, *gerade* ist, auch bei $P = \pi$ treten komplexe Eigenwerte dann nur in konjugiert–komplexen Paaren auf. Für $\Phi \equiv \pi$ gilt eine verschobene Parität ($N \bmod (n = 3) = 0$) (siehe 2.5.2). Dadurch erhält man im oberen nicht–hermiteschen Bereich eine verschobene Parität der Re–Teile, wobei diese im Ladungssektor Q vom jeweiligen *Symmetrieimpuls* (s. 2.5.2) abhängt. Diese verschobene Parität kann mit dem $\mathcal{P}$–Operator (10) *nicht* bewiesen werden, weil dieser eine Invarianz nur liefert, falls das Spektrum symmetrisch zu $P = 0, \pi$ ist und unabhängig von der Kettenlänge N und der Ladung Q ist. Die verschobene Parität ist jedoch abhängig von der $\mathbb{Z}_n$–Symmetrie und somit von N (es muß $N \bmod n = 0$ gelten (s. 2.5.2)); außerdem sind die Symmetrieimpulse für jeden Ladungssektor Q verschieden (s. (40)). — Ferner folgt aus obigen Überlegungen unmittelbar : auf der *1–dimensionalen* Untermannigfaltigkeit im 4–dimensionalen Parameterraum, die genau die *Grenzkurve* vom hermiteschen zum nicht–hermiteschen (bzw. umgekehrt) Bereich darstellt, sind die Matrizen hermitesch und Matrizen zueinander konjugierter Impulse nach 1) in 2.6.1 zueinander komplex konjugiert, also sind die Eigenwerte *reell* und die Parität *erhalten* ! — Es sei noch einmal angemerkt, daß gerade diese Mannigfaltigkeit die Schnittmenge mit dem asymmetrischen chiralen Potts–Modell bildet.

C–Invarianz

Unterwirft man $\mathcal{H}$ der in (11) definierten Transformation, so verhält er sich wie folgt :

$$\begin{aligned}
\mathcal{CHC}^\dagger &= -\frac{2}{\sqrt{3}} \sum_{j=1}^{N} \left(e^{-i\frac{\varphi}{3}} \sigma^\dagger_{j} + e^{i\frac{\varphi}{3}} \sigma_{j} + \lambda \left(e^{-i\frac{\Phi}{3}} \Gamma^\dagger_{j} \Gamma_{j+1} + e^{i\frac{\Phi}{3}} \Gamma_{j} \Gamma^\dagger_{j+1} \right) \right) \\
&\stackrel{!}{=} \mathcal{H} \quad \Rightarrow \quad (\varphi = \Phi = 0, 3\pi \quad \vee \quad \varphi = 0, 3\pi, \lambda = 0) \qquad (53)
\end{aligned}$$

Hieraus folgt sofort : aus C–Invarianz $\Rightarrow$ P–Invarianz; aber nicht notwendig umgekehrt.

Das *integrable* $\mathbb{Z}_3$–Modell ist damit C–invariant im betrachteten Parameterraum nur im Potts–Punkt ($\varphi = \Phi = 0 \quad \Rightarrow \quad \lambda = 1$ wegen (5)) und im Punkt $\varphi = 0, \lambda = 0$ — sowie in den “Pendantpunkten” ($\varphi = \Phi = \pi, \lambda = 1$ und $\varphi = \pi, \lambda = 0$ wegen (40) ($N \bmod (n = 3) = 0$)).

CP–Invarianz

$$\begin{aligned}
\mathcal{CPHP}^\dagger\mathcal{C}^\dagger &= -\frac{2}{\sqrt{3}} \sum_{j=1}^{N} \left(e^{-i\frac{\varphi}{3}} \sigma^\dagger_{N-j+1} + e^{i\frac{\varphi}{3}} \sigma_{N-j+1} + \lambda \left(e^{-i\frac{\Phi}{3}} \Gamma^\dagger_{N-j+1} \Gamma_{N-j} + e^{i\frac{\Phi}{3}} \Gamma_{N-j+1} \Gamma^\dagger_{N-j} \right) \right) \\
&= -\frac{2}{\sqrt{3}} \sum_{k=0}^{N-1} \left(e^{-i\frac{\varphi}{3}} \sigma^\dagger_{k+1} + e^{i\frac{\varphi}{3}} \sigma_{k+1} + \lambda \left(e^{-i\frac{\Phi}{3}} \Gamma_{k} \Gamma^\dagger_{k+1} + e^{i\frac{\Phi}{3}} \Gamma^\dagger_{k} \Gamma_{k+1} \right) \right) \\
&\stackrel{!}{=} \mathcal{H} \quad \Rightarrow \quad \varphi = 0, 3\pi \qquad (54)
\end{aligned}$$

Das integrable $\mathbb{Z}_3$–Modell ist für $\varphi = 0$ *global* CP–invariant (unabhängig von λ und Φ) (und wegen (40) ($N \bmod (n = 3) = 0$) auch für $\varphi = \pi$); im $Q = 0$–Sektor gilt dort auch P–Invarianz (wegen (11)).

Die Dispersionskurven haben sowohl für $Q = 1$ als auch $Q = 2$ im nicht–hermiteschen Bereich *reelle* Eigenwerte nur in ihren *Extrema*, d. h. dort liegen diese quantenmechanisch stabil vor. Wie die instabilen Zustände (mit größerer Energie = Masse = Re–Teil) jedoch genau zerfallen, ist unklar, solange man die S–Matrizen nicht kennt. Ladungs– und Impulserhaltung haben aufgrund der Integrabilität des Modells auf jeden Fall zu gelten. Da es sich gemäß der Eigenwertverteilung (s. 4.2, [73]) um ein *dissipatives* Quantensystem handelt, ist (höchstwahrscheinlich) zu erwarten, daß eine nicht rein elastische Streuung vorliegt. Dies wird z. B. auch dadurch unterstützt, daß die Dispersionsrelation (58) *nicht exakt* erfüllt wird ($\lambda \neq 0$), wenn auch im nicht–hermiteschen Bereich (wesentlich) besser als im hermiteschen (s. 2.7.1).

2.7 Die fundamentalen Teilchen

2.7.1 Dispersionsrelation im gesamten Parameterraum

Die relativistische Energie–Impuls–Relation der *fundamentalen* Teilchen m_Q ist in guter Näherung die Klein–Gordon–Gleichung auf dem Gitter[1]. Sie stellt im Rahmen einer Fourier–Reihe eine Näherung 1. Ordnung dar, sodaß sich Abweichungen davon leicht feststellen lassen.

Für die paritätsinvarianten $\mathcal{WA}_{n-1}$–Quantenketten ist am kritischen Punkt $\lambda = 1$ der richtige konforme Normalisierungsfaktor ξ [6] [40]

$$\xi(\lambda = 1) = n \tag{55}$$

Somit kann die Klein–Gordon–Gleichung in der folgenden Form geschrieben werden [45] :

$$\frac{E}{\xi(\lambda)} = \sqrt{\mu_Q^2(\lambda) + K^2} \qquad \text{oder} \qquad E^2 = m_Q^2 + \xi^2(\lambda) K^2 \tag{56}$$

mit

$$K := 2\sin\left(\frac{P}{2}\right) \qquad \text{und} \qquad m_Q(\lambda) := \mu_Q \xi(\lambda). \tag{57}$$

Die im nicht–hermiteschen Bereich in sehr guter Näherung gültige Formel für die Dispersionskurven der fundamentalen Teilchen (siehe Symmetrieimpulse in 2.5.2)

$$|\Delta E_{Q,0}(P)|^2 = \beta + \alpha \sin^2\left(\frac{P - P_{Q,Min}}{2}\right) + O\left(\sin^4\left(\frac{P - P_{Q,Min}}{2}\right)\right) \tag{58}$$

(mit $\beta = m_Q^2(P_{Q,Min})$, $\alpha = 4\xi^2$ und $P_{Q,Min} = \left(1 - \frac{2Q}{n}\right) \mathrm{Re}\Phi$ [45] (dort *makroskopischer* Impuls genannt)) wird nun verglichen mit einer *diskreten* Fourier–Entwicklung (bis zur gleichen Ordnung der trigonometrischen Funktionen) und darüber hinaus auf Brauchbarkeit im *gesamten* Parameterraum (also auch im hermiteschen Bereich) für den *integrablen* Fall untersucht. Dabei ist im hermiteschen Bereich nach (5) $\mathrm{Re}\Phi = \arccos\left(\frac{\cos(\varphi)}{\lambda}\right)$ ($\lambda \neq 0$).

(58) läßt sich wie folgt umformen :

$$|\Delta E_{Q,0}|^2 = B + A\sin^2\left(\frac{P - P_0}{2}\right) = \underbrace{\frac{A}{2} + B}_{\frac{a_0}{2}} + \underbrace{\left(-\frac{A}{2}\cos(P_0)\right)}_{a_1}\cos(P) + \underbrace{\left(-\frac{A}{2}\sin(P_0)\right)}_{b_1}\sin(P) \tag{59}$$

[1] siehe Anhang C.4

Dies ist eine Fourier–Entwicklung bis erster Ordnung. Zu vergleichen sind dann also die Werte von $\beta \longleftrightarrow B, \alpha \longleftrightarrow A$ und insbesondere die Phasenverschiebung $P_{Q,Min} \longleftrightarrow P_0$. P_0 bestimmt sich einfach durch ($a_1 \neq 0$)

$$\frac{b_1}{a_1} = \frac{\frac{A}{2}\sin(P_0)}{\frac{A}{2}\cos(P_0)} = \tan(P_0) \quad \Rightarrow \quad P_0 = \arctan\left(\frac{b_1}{a_1}\right) \tag{60}$$

A und B folgen dann aus den Identifikationen in (59) mittels Fourier–Koeffizienten ($P_0 \neq \frac{\pi}{2}$)

$$A = -\frac{2a_1}{\cos(P_0)}, \qquad B = \frac{a_0 - A}{2} \tag{61}$$

Die Konstanten α und β in (58) bestimmt man durch Anpassen der Dispersionskurve bei zwei Impulsen; am *günstigsten* durch Wahl des (bei Kettenlänge N auf dem Gitter *realisierten*) kleinsten und größten Funktionswertes. Es ist der *Betrag* des Energieeigenwertes (im nicht–hermiteschen Fall) zu nehmen, damit die Teilchen (nahezu) auf der Klein–Gordon–Kurve liegen (im unteren Winkelbereich nehmen die Koeffizienten α, β fast die gleichen Werte wie bei der anderen Methode an, wenn man nur den Re–Teil nimmt (Betrag des Im–Teils ist dort klein gegen den Re–Teil), im oberen Bereich erkennt man (insbesondere beim m_1–Teilchen) aber diese Notwendigkeit, d. h. der Im–Teil gehört zur Energie des m_Q–Teilchens.

Betont sei in diesem Zusammenhang, daß die Interpretation der komplexen Kompositzustände in 2.5 hierzu keinen Widerspruch bildet : die Masse dieser Zustände ist der Re–Teil des Eigenwertes E, der Zustand selbst hat die Gesamtenergie $|E|$ (s. hierzu insbesondere Abschnitt 3).

Damit α, β und A, B *eindeutig* bestimmbar sind, müssen sie *unabhängig* von der Kettenlänge N sein; dies ist im Potts–Punkt und in dessen Nähe (für $N \leq 12$) *nicht* gegeben, sonst aber für $N \geq 4$ (finite–size–Effekte bei $N = 2, 3$) (auf mindestens 3 Nachkommastellen).

In Tabelle 15 sind für das m_1–Teilchen über die ganze massive Hochtemperaturphase Meßpunkte (siehe auch Diagramm 3) für beide Methoden aufgelistet (mit Kettenlängen $10 \leq N \leq 12$); hermitescher und nicht–hermitescher Bereich sind getrennt dargestellt. Während zur Bestimmung von α, β nur ($N \geq$) 2 Meßpunkte (= Impulse) gebraucht werden, berücksichtigt das Fourier–Verfahren alle Impulse und sollte damit für größere N immer besser werden. Neben den oben erwähnten Vergleichsgrößen werden als Kriterien dafür eingeführt :

1) die Standardabweichung

$$\sigma := \sqrt{\frac{1}{N}\sum_{k=0}^{N-1}\left(|\Delta E_{Q,0}(kP)| - E_{KG}(kP)\right)^2}$$

wobei E_{KG} die Klein–Gordon–Kurve mit den entsprechenden (vorher) ausgerechneten Konstanten darstellt.

2) der maximale absolute Fehler

$$F_{abs,Max} := \max_{0 \leq k \leq N-1} ||\Delta E_{Q,0}(kP)| - E_{KG}(kP)|$$

Die Fourier–Reihe der Ordnung $\left[\frac{N}{2}\right]$ sollte die Dispersionskurve *exakt* fitten.

Zusammenfassend läßt sich feststellen, daß

1) im nicht–hermiteschen Bereich die Fourier–Methode bezüglich des σ–Kriteriums etwas besser abschneidet, weil sie *alle* Impulse berücksichtigt. Ansonsten gilt : $P_{1,Min} = P_0$, $\alpha \approx A$ und $\beta \approx B$. Der Punkt $(\lambda, \varphi) = (\frac{2}{5}, \frac{3}{4}\pi)$ (liegt unmittelbar neben der Phasengrenze, s. Diagramm 3) verdient besonderer Betrachtung : bei $N = 10$ ist das Minimum der Kurve auf dem Gitter nicht realisiert;

obwohl noch $m_1 > 0$ gilt, nehmen sowohl β als auch B *negative* Werte an; da die Phasenverschiebung dort exakt bekannt ist (siehe 2.5.2), ist P_0 also *falsch* ! Bei $N = 6$ (Minimum auf Gitter existent) wird die Phasenverschiebung auch von der Fourier–Methode richtig geliefert, aber $B < 0$, während hier $\beta > 0$ ist und auch dem tatsächlichen Quadrat der Masse entspricht. Dies zeigt, daß das Verfahren, das die Integrabilitätsbedingung benutzt dem Fourier–Verfahren bezüglich der Bestimmung der *Phasenverschiebung* (und damit Bestimmung des Minimums = Masse des fundamentalen Teilchens) *überlegen* ist. (Für σ kann (gegebenenfalls) kein Wert erscheinen, wenn $\beta, B < 0$ ist und rechte Seite von (58) für gewisse P negativ wird.) Im unteren Bereich ($\varphi < \frac{\pi}{2}$) verschwinden aus Symmetriegründen alle Koeffizienten b_k vor den sin–Summanden in der Fourier–Reihe identisch. Die Koeffizienten höherer Ordnung vor den cos–Summanden $a_k, k \geq 2$, sind betraglich klein (10^{-2}); im oberen Bereich ($\varphi > \frac{\pi}{2}$) ist die Situation analog.

2) im hermiteschen Bereich die Werte für α, A und β, B sowie $P_{1,Min}, P_0$ oft nicht unerheblich voneinander abweichen, immer gilt : $P_{1,Min} > P_0$. Höhere Fourier–Koeffizienten sind hier deutlich größer als im nicht–hermiteschen Bereich.

Die Diagramme 24 und 25 veranschaulichen die Situation. Man erkennt daran insbesondere, daß das Minimum der Dispersionskurven, P_{Min}, innerhalb des hermiteschen Bereichs wegen der P–Verletzung (52) *nicht* durch eine einfache Formel ausgedrückt werden kann. P_{Min} nimmt zu größeren λ–Werten hin kontinuierlich ab, was man für den superintegrablen Fall exakt berechnen kann [1] [4].

In der Umgebung des Phasenüberganges ist der Minimum*bereich* gegenüber der gewöhnlichen Kurve *an*gehoben, daher auch die "falschen" Werte für β und B; dort ist ein *polynomialer* Fit angebracht (siehe hierzu die Bestimmung der Phasengrenze in Abschnitt 3).

Die Standardabweichung liegt generell im Bereich 10^{-2}, $F_{abs,Max} \approx 10^{-1} - 10^{-2}$ und damit etwas größer als die Extrapolationsfehler für die fundamentalen Teilchen (vgl. Tabellen 15 und 4, 5, 6), was bedeutet, daß es sich (wohl) nicht um eine reine massive Klein–Gordon–Theorie handelt (im nicht–hermiteschen Bereich sind die absoluten Fehler allerdings kleiner als im hermiteschen). Bemerkenswert ist noch, daß $F_{abs,Max}$ beim Fourier–Verfahren (fast) *immer* im Minimumbereich der Kurve erscheint; beim anderen Verfahren ist dieser zwischen den Extrema der Kurve zu finden, wie zu erwarten ist, siehe Bestimmung der Koeffizienten.

2.7.2 Stabilitätsbereiche des $Q = 2$–Quasiteilchens

Bisher war es eine offene Frage, ob und wenn ja, wo im Parameterraum das m_2–Teilchen (als *stabiler Ein*teilchenzustand) existiert — im Gegensatz zum m_1–Teilchen, das in der gesamten massiven Hochtemperaturphase vorhanden ist (2.7.1). Diese kann nun für den *integrablen* Fall (im Rahmen numerischer Untersuchungen des $Q = 2$–Spektrums) — zumindest qualitativ — beantwortet werden. Dabei wird essentiell Gebrauch von der exponentiellen Konvergenz eines Einteilchenzustands (34) und der y_N–Folge (36) gemacht. Im nicht–hermiteschen Bereich liefert die schnelle Konvergenz des Im–Teils eine zusätzliche wichtige Entscheidungshilfe.

Folgendes ist eine nützliche konstruktive Methode, um festzustellen, wo das m_2–Teilchen existiert : man halte $\lambda = const$ fest und variiere φ derart, daß man aus dem einen (unteren) nicht–hermiteschen Bereich kommend, durch den hermiteschen Teil in den anderen (oberen) Bereich gelangt.

In den nicht–hermiteschen Bereichen existiert das m_2–Teilchen (zumindest im thermodynamischen Grenzwert) auf der *ganzen* 1. Brillouin–Zone (d. h. der Impulsbereich ist $[0, 2\pi[$). Tabelle 16 gibt einen Überblick für das m_2–Teilchen in den nicht–hermiteschen Bereichen der massiven Hochtemperaturphase. Es gilt Analoges wie im Falle des m_1–Teilchens. Im *oberen* Bereich sind jedoch die Werte für σ_{int} und σ_F *erheblich* größer als im unteren Bereich (was in der Tabelle 15 für das m_1–Teilchen kaum auffällt); dies hat bei der Fourier–Methode auch Auswirkungen auf die korrekte Phasenverschiebung (je nachdem, ob bei gegebener Kettenlänge die Extrema auf dem Gitter realisiert sind oder nicht). Offenbar gilt auch : je "tiefer" der Parameterpunkt im nicht–hermiteschen Bereich liegt, desto besser ist die Annäherung durch den Klein–Gordon–Fit.

Um nun festzustellen, wo das m_2–Teilchen außerhalb der nicht–hermiteschen Bereiche existiert, wird hier exemplarisch der Impuls $P = \frac{2\pi}{3}$ (ein Endpunkt auf der superintegrablen Linie [1] [4]) behandelt. Dieser ist nur bei Kettenlängen $N \bmod 3 = 0$ existent, d. h. es stehen im Rahmen numerischer Rechnungen nur die Kettenlängen $N = 3, 6, 9, 12$ mit $P = 1, 2, 3, 4 \bmod \frac{2\pi}{N}$ zur Verfügung. In (36) ist daher $l = 3$ zu wählen.

Das folgende Bild ergibt sich konsistent bei verschiedenen λ–Werten; dabei gilt an den Parameterpunkten (λ, φ), an denen etwas besonderes auftritt, $\Phi \approx const.$

Beginnend bei $\varphi = 0$ liegt das stabile Einteilchenniveau *isoliert* unter dem untersten Streuband. In dieses taucht es kurz vor Verlassen des nicht–hermiteschen Bereiches ein; dabei wird die *untere* Bandkante vom Kompositzustand $2m_1$ gebildet. Genau an diesem Punkt passiert ein Pseudocrossing : der bis dahin komplexe Einteilchenlevel ändert das Vorzeichen seines Im–Teils, der komplexe $2m_1$–Kompositzustand bleibt davon unberührt. Der weitere Verlauf des im thermodynamischen Grenzwert *stabil* bleibenden Einteilchenniveaus ist zu erkennen durch den wesentlich kleineren Betrag des Differentialquotienten $\frac{\partial \mathrm{Re} E}{\partial \varphi}$, die Übereinstimmung der Im–Teile der Energiewerte bei den verschiedenen Kettenlängen und die y_N–Folge (s. Diagramm 27 und Tabellen 13 und 14). Für $N = 12$ ist dabei bemerkenswert, daß das Einteilchenniveau bei ca. $\varphi = 0.438\pi$ vom 2. auf den 3. Level *springt*, was an Hand der Im–Teile sehr gut erkennbar ist. Bis zur hermitesch–nicht–hermiteschen Grenzkurve (hier ist $\lambda = 0.15$, also $\varphi = \arccos(0.15) \approx 0.452\pi$) und darüber hinaus noch bis ca. $\varphi \approx 0.46\pi$ bleibt das Einteilchenniveau stabil (im thermodynamischen Limes). Denn nach der Kreuzung der entsprechenden Levels von $N = 6, 9, 12$ bei ca. $\varphi \approx 0.455\pi$ (s. Diagramm 27) *divergieren* diese deutlich (s. Diagramm 26). Diese bilden dann gemäß den Auswahlregeln (38) Kompositzustände ($2m_1$). Erst ab ca. $\varphi \approx 0.49\pi$ erhält man wieder einen stabilen Einteilchenzustand — diesmal an der *oberen* Bandkante des untersten Streubandes (s. Diagramme 26 und 28). Auf der superintegrablen Linie überkreuzen sich diese Niveaus für $N = 6, 9, 12$ wieder und der Zustand bleibt für $\varphi > 0.5\pi$ weiterhin stabil (der $N = 6$–Level liegt etwas neben den dicht nebeneinander liegenden Levels für $N = 9, 12$). Im Diagramm 26 erkennt man, daß das Einteilchenniveau das Streuband für ca. $\varphi \gtrapprox 0.52\pi$ nach oben verläßt und stabil wird. D. h., *jeweils* kurz nach Eintritt in das unterste Streuband wird das Einteilchenniveau instabil. Für $\varphi \approx 0.548\pi$ beginnt der obere nicht–hermitesche Bereich. Dort ist das (jetzt reelle) Einteilchenniveau stabil und liegt zunächst zwischen den beiden untersten Streubändern. Die Kreuzung mit dem oberen (2.) Streuband (s. Diagramm 29) beeinflußt die Stabilität des Einteilchenzustandes nicht. Somit ist das Einteilchenniveau in den nicht–hermiteschen Bereichen *immer* stabil.

Die Tabellen 13 und 14 enthalten für einige ausgewählte "kritische" Parameterpunkte die Extrapolationen für die Energie ΔE, die y_N–Werte (36) und als zusätzliche Information die *Differenzen*folge $\Delta y_N := y_N - y_{N-3}$. Falls Δy_N (deutlich) ansteigt, liegt *sicher* ein Einteilchenzustand vor; fällt Δy_N (deutlich) ab, handelt es sich *sicher* um einen Kompositzustand (hier $2m_1$), es sei denn, die Energiewerte implizieren wegen ihrer *sehr* schnellen Konvergenz einen Einteilchenzustand. Unterscheiden sich die Δy_N-Werte nicht deutlich, liegt offenbar ein Zwischenzustand vor, denn ein *abrupter* Übergang ist aus Stetigkeitsgründen ausgeschlossen. Tabelle 13 behandelt den von unten kommenden Einteilchenlevel, der sich allmählich ($\varphi \approx 0.47\pi$–0.49π oder $\Phi \approx 0.9$–1.35) in $2m_1$ verwandelt, wobei im (unteren) nicht–hermiteschen Bereich insbesondere die Im–Teile klein und relativ stabil sind (charakteristisch für ein Einteilchenniveau); Tabelle 14 befaßt sich mit dem Energieniveau, das zunächst die obere Bandkante des untersten Streubandes ($2m_1$) bildet. Dieses hat im (unteren) nicht–hermiteschen Bereich wesentlich größere Im–Teile (charakteristisch für Kompositlevels) als der Vergleichslevel und geht bei ($\varphi \approx 0.46\pi - 0.49\pi$ oder $\Phi \approx 0.58 - 1.35$) in das Einteilchenniveau über. Bemerkenswert ist die "Überkreuzungsanalogie" der Levels bei $\varphi = 0.5\pi$ bzw. $\approx 0.455\pi$ (siehe die Werte der Energien in den Tabellen 13 und 14).

Weil das m_2–Teilchen innerhalb des hermiteschen Bereiches nie auf dem ganzen Impulsbereich als Einteilchenzustand existiert, hat es physikalisch auch keinen Sinn, es dort durch Klein–Gordon zu approximieren (außerdem : Deformierung der Dispersionskurve; $|P_{2,Max} - P_{2,Min}| > \pi$, zumindest für große Bereiche $\varphi > \frac{\pi}{2}$).

Eine andere Frage in diesem Zusammenhang ist, ob die Masse des m_2–Teilchens wirklich mit wachsendem φ immer zunimmt. Dabei wird als Masse der Wert der Dispersionskurve am Minimum betrachtet, weil das Teilchen für $P = 0$ nicht immer existent ist und die Bestimmumg der Phasengrenze (s. Abschnitt 3) diese Massendefinition nahelegt. Tabelle 2 zeigt, daß dies für $\varphi > \frac{\pi}{2}$ nicht mehr gilt : dort wird die m_2–Masse (im hermiteschen Bereich bei $P \approx 0$ abgeschätzt) zunächst (bis zum Eintritt in den oberen nicht–hermiteschen Bereich) kleiner, dann wieder größer. Sie nimmt aber — wie gewohnt — bei $\varphi = const$ in λ–Richtung kontinuierlich ab.

Verläßt man die integrable Mannigfaltigkeit (in den nicht–hermiteschen Bereichen auf denen das m_2–Teilchen stets auf der ganzen 1. Brillouin–Zone $[0, 2\pi[$ existiert), so bleibt die Dispersionskurve für geringe Abweichung der Parameterwerte von der Integrabilitätsbedingung vollständig vorhanden, löst sich jedoch bei stärkerer Abweichung allmählich auf. Dabei nähert sich das unterste Energieniveau des ganzen $Q = 2$–Spektrums dem Wert 0 und bei der Grundzustandsentartung (Phasenübergang) löst sich die Dispersionskurve ganz auf. Die Quasiteilcheninterpretation verliert dann ihre Gültigkeit.

3 Phasengrenze des integrablen $\mathbb{Z}_3$–Modells

Auf Grund der Erkenntnisse in 2.7.1 ergibt sich : ausgehend von der *massiven* Hochtemperaturphase erreicht das Minimum der Dispersionskurve für das m_1–Teilchen für gewisse Wertepaare (λ_c, φ_c) den Wert Null (masselos) (während alle anderen Gaps noch positiv sind) — an diesen Stellen findet ein *kontinuierlicher* Phasenübergang statt, der Übertritt in die masse*lose* Hochtemperaturphase. — Dies widerspricht dem Theorem von Perron–Frobenius[2] [35] [72] [34] nicht, weil der Hamilton–Operator (1) die Vorausetzungen (auch mit algebraischen Modifikationen) nicht erfüllt : für $\lambda > 0$ sind nicht alle Nebendiagonalelemente reell, für $\lambda = 0$ existiert keine entsprechende Potenz (s. Fußnote), denn in diesem Fall handelt es sich um eine Diagonalmatrix. — Dies bedeutet, daß Energieniveaukreuzungen des Grundzustandes möglich sind.

3.1 Phasengrenze im Hochtemperaturbereich

3.1.1 Numerische Methode

Zur Bestimmung der Phasengrenze läßt sich an die Ergebnisse aus 2.7.1 anknüpfen : aus den dortigen Betrachtungen geht hervor, daß sich die Energie–Impuls–Kurve des m_1–Teilchens mit der exakten Formel, die sich aus der Integrabilitätsbedingung (5) ergibt, im nicht–hermiteschen Bereich und auf der hermitesch–nicht–hermiteschen Grenzkurve (sehr) gut approximiert werden kann. Insbesondere werden die *Extrema* der Kurve dadurch sehr genau bestimmt.

Hier gilt es, festzulegen, bei welchen Parameterwerten das *Minimum (= Masse)* der Kurve den Wert Null annimmt. Weil der Minimumbereich der Dispersionskurve im Phasenübergangsbereich leicht deformiert (angehoben) wird (s. 2.7.1), ist die Kurve dort am *besten* durch ein (mindestens) *quadratisches* Polynom zu fitten, denn Entwicklung um $P_{1,Min}$ in der Dispersionsformel (58) liefert :

$$|\Delta E_{1,0}(P)|^2 = m_1^2(P_{1,Min}) + \alpha \left(\frac{P - P_{1,Min}}{2}\right)^2 + O\left(\left(\frac{P - P_{1,Min}}{2}\right)^6\right) \qquad (P \approx P_{1,Min})$$

Setzt man folglich an

$$f(P) := aP^2 + bP + c \tag{62}$$

so sind diejenigen (λ_c, φ_c)–Werte zu bestimmen, bei denen das Minimum ($P_{Min} = -\frac{b}{2a}$) von f den Wert Null annimmt; P_{Min} ist zu vergleichen mit dem exakten Wert, welcher in den nicht–hermiteschen Bereichen sowie auf der Grenzkurve wegen exakter Symmetrie (s. 2.5.2 und 2.6) gegebenen ist und mit $P_{1,Min}$ bezeichnet wird. Innerhalb des hermiteschen Bereichs ist die Minimumstelle (bzgl. P) der Dispersionskurve wegen Paritätsverletzung (λ–abhängig) nur für den superintegrablen Fall bekannt.

Die Koeffizienten a, b, c sind durch 3 Energiewerte bei Impulsen P, möglichst nahe bei P_{Min}, festzulegen. D. h., welche Impulse $P = \frac{2\pi}{N}k, k = 0, (1), N-1$, und welche Kettenlänge N am *günstigsten* sind, hängt von P_{Min} ab. Diese Impulse sollten beidseitig um P_{Min} verteilt sein. Für $0 \leq P_{Min} \leq \frac{2\pi}{N=12}$ liegen diese (rechentechnisch bedingt) etwas entfernt von P_{Min}, was die Genauigkeit vermindern sollte. — Da die Phasengrenze durch den oberen nicht–hermiteschen Bereich verlaufen muß (denn bei $(0, \pi)$ befindet sich solch ein kritischer Punkt [57]), hat man dort das auf dem Gitter realisierte Minimum sofort für $N = 6, 12$ zur Verfügung; hier führen beide Methoden mit hoher Übereinstimmung zum selben Ergebnis, s. Tabelle 12 (bei Impulsen, deren Eigenwerte nicht–verschwindenden Im–Teil haben, ist lediglich der Re–Teil (= Masse) zu verwenden, weil nur die Masse, nicht die Gesamtenergie des Zustands, Null werden soll).

Da das m_1–Teilchen in der gesamten massiven Hochtemperaturphase (und auf dem ganzen Impulsbereich $0 \leq P < 2\pi$) existiert (s. 2.7.1), kann vorstehende Methode auch zur Bestimmung der Phasengrenze

[2] Das Theorem besagt, das eine Matrix, deren Elemente alle reell und positiv sind, einen einfachen Eigenwert besitzt, welcher betraglich größer ist als alle anderen; im Falle, daß nicht alle Einträge positiv sind, dann aber Null, gilt der Satz noch, falls eine gewisse Potenz der Matrix existiert, bei der kein Element (der *gesamten* Matrix) mehr verschwindet.

angewandt werden — lediglich, wenn die finite–size–Effekte “groß” werden ($\lambda \gtrapprox 0.85$), sind diese auch entsprechend zu berücksichtigen (d. h. die Koeffizienten der Dispersionsrelation sind dann nicht mehr unabhängig von der Kettenlänge, s. 2.7.1). Um auch in solchen Fällen die Energie–Impuls–Kurve für den thermodynamischen Limes zu simulieren (was auch in 2.7.1 wichtig ist, weil es sich um einen *Ein*teilchenzustand handelt), werden die Koeffizienten a, b, c des Polynoms (62), P_{Min} und die Masse am Minimum $f(P_{Min})$ wie folgt ermittelt : bei jeder Kettenlänge $6 \leq N \leq 12$ bestimmen die Eigenwerte der hier günstigsten Impulse $P = 0, \pm\frac{2\pi}{N}$ den für N besten Fit; man erhält somit Folgen $a_N, b_N, c_N, P_{Min,N} = -\frac{b_N}{2a_N}$ sowie $f_N(P_{Min,N})$. Diese Folgen werden alle extrapoliert, woraus man die Werte a, b, c, P_{Min} und $f(P_{Min})$ gewinnt. Bei Verändern der Parameter λ und/oder φ erweisen sich diese Werte als “stabil”. Man hat hierbei eine *mehr*fache Konsistenzkontrolle, z. B. die Möglichkeit der Abweichung der Minimumstelle P_{Min} vom analytischen Wert $-\frac{b}{2a}$. Die Hauptfehlerquelle bildet der Extrapolationswert der Folge $c_N = \Delta E_{1,0}(P = 0, N)$; da es sich bei den Extrapolationsverfahren VBS und BST [14] [13] [53] um *Differenzen*verfahren handelt, läßt sich ein moderater Fehler (ca. 10^{-3}) durch Verwendung hoher (Variablen–)Genauigkeit erzielen, s. Tabelle 12.

Daß es sich in solchen Bereichen auch wirklich noch um *Ein*teilchenzustände handelt, kann dabei an der y_N–Folge (36) ersehen werden : für kleine φ wächst diese nur sehr langsam, konvergiert aber gegen keinen *endlichen* Wert; daraus folgt, daß es ein *Ein*teilchenzustand sein muß (die langsame Divergenz erklärt sich dadurch, daß für $\varphi \downarrow 0$ auch $P_{Min} \downarrow 0$, d. h. die Masse $m_1 \downarrow 0$ und es gilt : $\xi \propto m^{-1}$ (man befindet sich im Skalenbereich) sowie $e^{-\frac{N}{\xi}}$ (s. (34) für einen Einteilchenzustand, was für eine kleine Masse relativ große Werte $e^{-\frac{N}{\xi}}$ hervorruft, so daß das Argument des Zähler–Logarithmus' der y_N–Folge (36) noch ≈ 1 ist für kleine Kettenlängen, jedoch $\Delta y_N := y_N - y_{N-1}$ *wächst* monoton).

Als Beleg, daß soeben beschriebene Methode (im Rahmen der numerischen Genauigkeit) richtige Ergebnisse liefert, sei angeführt, daß sie auf der superintegrablen Linie *ohne* Korrektur den Wert $\lambda_c = 0.9736(1)$ bei $P_{Min} = 0.1612(1)$ liefert, was in glänzender Übereinstimmung mit [3], aber nicht richtig ist, wie in [4] korrigiert wird; dort wird die mittels eines Integral erhaltene *exakte* Lösung mit $\lambda_c^{exakt} = 0.901293\ldots$ und $P_{Min}^{exakt} = 0.225\ldots$ angegeben. Dieser λ–Wert wird *mit* finite–size–Korrektur bestätigt ($\lambda_c = 0.902(1)$), während der P_{Min}–Wert ($P_{Min} = 0.266(2)$) etwa 10% zu groß ist. (Eine Fourier–Analyse der Ordnung $\left[\frac{N}{2}\right], N \leq 12$, fittet die Dispersionskurve an den Stützstellen exakt (s. auch 2.7.1); eine derart erhaltene und extrapolierte Folge für den Wert der Minimumstelle der Dispersionskurve und die zugehörige Folge für den Funktionswert (= Masse) konvergieren schlecht oder weisen große Extrapolationsfehler auf.) Dies ist ein Hinweis darauf, daß sich für $N > 12$ die Konvergenzcharakteristik der Einteilchenniveaus noch einmal ändert (s. auch Tabellen 4 bis 6) : z. B. konvergiert $\Delta E_{1,0}(P = 0)$ bei $\lambda = 0.9, \varphi = \Phi = \frac{\pi}{2}$ *monoton* gegen 0.186(1), wohingegen der *exakte* Wert 0.2 ist [1] [4]; dies entspricht ebenfalls einem relativen Fehler von ca. 10%.

Bei der Bestimmung der Phasengrenze im Hochtemperaturbereich werden nur Kettenlängen $N \geq 6$ verwendet, da noch kleinere N starke finite–size–Abhängigkeit zeigen und deren Impulse zu weit auseinander liegen. Damit ist ein polynomialer Fit mit höherer Ordnung als quadratisch für $\lambda \geq 0.85$ nach obiger Methode kaum möglich, da die Impulse *nahe* des Minimums liegen müssen und wegen der Extrapolation alle Stützstellen bei gleichem N zu nehmen sind, was zur Konsequenz hat, daß zu wenig Folgeglieder größere Extrapolationsfehler hervorrufen. λ_c wird bei *festem* φ ermittelt. P_{Min} steigt *kontinuierlich* von 0 auf $\frac{\pi}{3}$ an (s. Tabelle 12). Potts–Punkt und $(\lambda_c, \varphi_c) = (0, \pi)$ werden als Punkte der Phasengrenze bestätigt. Diagramm 30 zeigt die Phasengrenze für das integrable $\mathbb{Z}_3$–Modell; der untere nicht–hermitesche Bereich ist vollständig massiv.

3.1.2 Perturbative Methode

Die Bestimmung der Phasengrenze massiv–masselos mittels Störungstheorie bietet einen interessanten Vergleich. Dabei wird um $\lambda = 0$ entwickelt; die Störungsreihe sollte für nicht zu großes λ und solange das niedrigste Energieniveau *isoliert* auftritt, gültig sein. In [57] ist eine Entwicklung bis 1. Ordnung angegeben, die in [56][55] ist für allgemeines φ, Φ und P bis (einschließlich) 3. Ordnung in λ für die

Dispersionsrelation des niedrigsten $Q = 1$–Energieniveaus erweitert wird. Mit komplexem Φ werden die Argumente der entsprechenden cos–Ausdrücke in der Störungsreihe komplex.

$$\Delta E_{1,0}(\lambda,\varphi,\Phi,P) = 4\sin\left(\frac{\pi-\varphi}{3}\right) - \frac{4\lambda}{\sqrt{3}}\left(F(P)+\alpha-2\beta-(\alpha^2+2\beta^2)\cos(\Phi)\right) + O(\lambda^4), \tag{63}$$

mit

$$F(P) := (1-A)\cos(p) + \alpha\cos(p+\Phi) + \beta\cos(2p) + B\cos(2p+\Phi) + 2\beta^2\cos(3p),$$

wobei

$$p := P - \frac{\Phi}{3}, \quad \alpha := \frac{\lambda}{6\cos\left(\frac{\pi-\varphi}{3}\right)}, \quad \beta := \frac{\lambda}{6\cos\left(\frac{\varphi}{3}\right)}, \quad A := 3\beta^2 - 2\alpha\beta + 2\alpha^2, \quad B := 2\beta^2 + 2\alpha\beta - \alpha^2$$

sind. Die Koeffizienten in (63) sind für alle Werte $\varphi \in [0,\pi], y \geq 0$ stets *regulär*.

Um die Lösung λ_c^{pert} mit λ_c^{num} vergleichen zu können, wird auch λ_c^{pert} bei $\varphi = const$ bestimmt. Als Lösung sind folgende Werte anzusehen : für festes $\varphi = \varphi_0$ wählt man ein doppelt–iteratives Verfahren, wobei dieses bei $\lambda = 0$ anfängt. Damit ist wegen (19) Φ festgelegt, aber P in (63) noch unbestimmt. Bei diesen Parameterwerten wird (mit bel. Genauigkeit) derjenige P–Wert aus dem Intervall $[0, 2\pi[$ ermittelt, für den (63) den kleinsten Re–Teil besitzt. Ist der Funktionswert dieses P–Wertes Null (im Rahmen der geforderten Genauigkeit), so hat man $\lambda_c^{pert}(\varphi_0)$ und auch P_{Min}^{pert} bestimmt. Anderenfalls ist ein neuer λ–Wert (falls der vorhergehende Funktionswert positiv war, so einen größeren λ–Wert und umgekehrt) zu wählen und die neue Minimumstelle für P zu ermitteln.

Aufgrund der besonderen Symmetrie in den nicht–hermiteschen Bereichen (Paritätserhaltung bzgl. des Re–Teils, s. 2.5.2 und 2.6) und auf der hermiteschen Grenzkurve (Paritätsinvarianz), liefert die störungstheoretische Formel (in *jeder* Ordnung) die richtige Stelle für das Minimum des Impulses P auf der Dispersionskurve (s. Tabelle 12); dies ist innerhalb des hermiteschen Bereichs nicht gegeben. Insbesondere bedeutet dies auch, daß der gelieferte Funktionswert *reell* ist.

Als Fehler zu $\lambda_c^{pert}(\varphi_0)$ aus der 3. Ordnung Störungstheorie erscheint es statt $(\lambda_c^{pert})^4$ aufschlußreicher die *Differenz* der Lösungen (bei gleichem φ_0) von 3. und 2. Ordnung zu nehmen.

Weil die richtige Minimumstelle bzgl. P der Dispersionskurve nicht unerheblich ist, bedeutet dies, daß man *zuverlässige* perturbative Werte für die Phasengrenze nicht innerhalb des hermiteschen Bereiches erhalten kann, zumal dort auch λ groß (≈ 1) wird. Dies zeigt sich z. B. auf der superintegrablen Linie für die man die genauen Daten kennt [1] [4] : die 3. Ordnung Störungstheorie liefert die Werte $\lambda_c^{pert} = 0.867, P_{Min}^{pert} = 0.366$, was (erheblich) schlechter als die numerischen Daten (s. Tabelle 12) ist. Für den nicht–hermiteschen Bereich (Diagramm 31 und Tabelle 12) erkennt man jedoch sehr gute Übereinstimmung der perturbativen mit den numerischen Daten.

An der Grenzkurve bestätigt die perturbative Lösung den "Knick" der Phasengrenze (zu erklären durch die analytische Fortsetzung des cos in cosh in der Formel). Da der Potts–Punkt zur Phasengrenze gehört (und auf der paritätsinvarianten Grenzkurve liegt), jedoch $\lambda = 1$ schon recht groß ist, zeigt eine für das normale ($\varphi = \Phi = 0$) Potts–Modell entwickelte Störungsreihe bis zur 6. Ordnung [56], daß diese eine alternierende Summe bildet und nur *gerade* Ordnungen gute Werte ($\lambda_c^{pert} \approx 1$) liefern, während die ungeraden Ordnungen sich nur allmählich mit steigender Ordnung dem λ–Wert 1 nähern.

3.2 Phasengrenze im Niedertemperaturbereich

Die Energiewerte aus der *massiven* Hochtemperaturphase können über die Dualitätstransformation (13) auf die *massive* Niedertemperaturphase abgebildet werden. Dabei genügen die Parameter weiterhin der Integrabilitätsbedingung (19); weil im Niedertemperaturbereich (in der hiesigen Darstellung) alle Parameter reell sind, ist nur der im *hermiteschen* Bereich verlaufende Teil der Phasengrenze in der

Hochtemperaturphase dual abzubilden (der andere Teil würde bei *dualer* Wahl der Parameter entsprechend dual auf den Niedertemperaturbereich abgebildet werden). D. h. ($\lambda \neq 0$)

$$\lambda \to \tilde{\lambda} := \lambda^{-1}, \quad \varphi \to \tilde{\varphi} := \arccos\left(\frac{\cos(\varphi)}{\lambda}\right), \quad \Phi \to \tilde{\Phi} := \arccos(\cos(\Phi)\lambda) \tag{64}$$

Die Dualitätstransformation (13) verknüpft Spektren verschiedener Randbedingungen und Ladungssektoren. Weil im Niedertemperaturbereich der Grundzustand $n = 3$–fach entartet ist [52], ist es unerheblich, welchen Ladungssektor man betrachtet. Verschiedene Randbedingungen führen im Rahmen der Quasiteilcheninterpretation (im thermodynamischen Limes) auf das gleiche Ergebnis [52]. Deshalb läßt sich die Phasengrenze im Niedertemperaturbereich wie folgt bestimmen : man nähert sich aus der massiven Hochtemperaturphase den kritischen Werten *infinitesimal* und transformiert dual (Singularitäten treten dabei nicht auf, was auch die Störungsrechnung für höhere Ordnungen in λ zeigt [54], denn sonst würde die Störungsreihe nicht konvergieren). Diagramm 30 zeigt die Phasengrenze für das integrable $\mathbb{Z}_3$–Modell (dabei ist für den Niedertemperaturbereich das Superscript $\tilde{}$ aus (64) unterdrückt); man beachte, daß die Bogenlänge der Phasengrenzkurve im hermiteschen Bereich für $\lambda > 1$ bzw. < 1 unterschiedlich groß ist. Die Kurve ist in (sehr) guter Übereinstimmung mit der exakten Lösung [63], siehe Tabelle 12 (die Werte λ_c^{exakt} werden nach einer Parametertransformation (64) qualitativ aus einer vergrößerten graphischen Darstellung aus [63] abgelesen (es wird dort das duale Modell betrachtet); der angegebene Fehler bedeutet die Ableseungenauigkeit; für φ–Werte kleiner als ca. 0.3π lassen sich keine von 1 verschiedenen λ–Werte bestimmen, jedoch ist $\lambda_c^{exakt} < 1$ für alle $\varphi > 0$).

Man kann auf folgende Weise versuchen, die Phasengrenze im Niedertemperaturbereich *numerisch* zu bestimmen : bei festem (*nicht* auf die Kettenlänge N bezogenen) Impuls P rotiert das Spektrum der Ladungssektoren Q zyklisch umeinander (mit Q–“Ästen” im unteren Teil). Man verbinde die Energiewerte dieses Impulses bei gleicher Ladung Q und verschiedener Kettenlänge N polynomial (quadratischer Fit) und bestimme das Minimum (bei Impuls $P_{Min} \in [0, 2\pi[$) wie in 3.1.1. Weil im thermodynamischen Limes der 3–fach entartete Grundzustand bei Impuls $P = 0$ liegt [44] [52], sind die Gaps der Kettenlänge N auf den niedrigsten Energiewert bei Impuls 0 für $Q = 0, 1, 2$ zu beziehen. Es zeigt sich dabei, daß es immer einen eindeutig bestimmten Q–Ast gibt (dieser variiert mit wachsendem φ, angefangen bei $Q_P = 1_1$ über $2_2, 0_3, 1_4, 2_5$ hin zu 0_6). Vergleicht man den bei festem φ derart erhaltenen λ_{Min}–Wert mit dem λ_c–Wert aus der Dualitätstransformation, so zeigt sich, daß stets gilt : $\lambda_{Min} < \lambda_c$. Die Differenz beträgt dabei im Winkelbereich $0.7\pi \leq \varphi \leq \pi$ etwa 0.05; für noch kleinere Werte für φ wird diese Differenz rasch größer, so daß man schon für $\varphi \approx 0.6\pi$ den Wert $\lambda_{Min} = 1$ erreicht. Diese Differenz entsteht aufgrund von finite–size–Effekten, die im *Gegensatz* zum Hochtemperaturbereich nicht abgeschätzt werden können, denn dort sind die niedrigsten $P = 0$–Gaps noch deutlich > 0 und können extrapoliert werden, was im Niedertemperaturbereich wegen der Grundzustandsentartung nicht möglich ist. Weil Gaps (im allgemeinen) eine mit wachsender Kettenlänge fallende Konvergenzcharakteristik aufweisen, bestimmt man bei $\varphi = const$ ohne finite–size–Korrektur im Niedertemperaturbereich *systematisch* zu kleine λ–Werte (und im Hochtemperaturbereich zu große).

Eine alternative Methode, die bei festem φ dasjenige minimale λ bei Kettenlänge N bestimmt, bei dem der niedrigste Gap für $P \neq 0$ verschwindet [47], und diese Werte für $N = 2, (1), 12$ extrapoliert, liefert im wesentlichen übereinstimmende Werte mit λ_{Min}, jedoch sind die Extrapolationsfehler recht groß (> 0.1).

Da das integrable Modell für $\lambda = 1$ wegen (5) auch selbstdual ist, und weil für das selbstduale Modell aufgrund der Dualität für alle φ bei $\lambda = 1$ ein weiterer Phasenübergang zwischen den benachbarten masselosen Phasen existiert, besteht das integrable Modell wie auch das selbstduale aus vier verschiedenen Phasen.

4 Energieniveaukreuzungen und Eigenwertverteilung

4.1 Energieniveaukreuzungen

Energieniveaukreuzungen (Crossings) *angeregter* Zustände können sowohl vermiedener (avoided) als auch echter Art (lokale Erhaltungsgrößen der beteiligten Levels) sein und stellen keinen Widerspruch zum Perron–Frobenius–Thoerem dar, weil sich dieses nur auf den extremalen Eigenwert (Grundzustand) reell positiver Matrizen bezieht (s. auch Fußnote in Abschnitt 3). Im Falle (endlich–dimensionaler) *hermitescher* Matrizen existiert das von Neumann–Wigner–Theorem [67], welches besagt, daß für ein echtes Crossing eine bestimmte Mindestanzahl unabhängig zu variierender Parameter existieren muß (bei reellen Matrizen : 2, bei hermiteschen Matrizen : 3); diese Zahl wird durch Abzählen der Matrixeinträge und die Anzahl der verschiedenen Eigenwerte erhalten. Sonst seien Crossings stets vermiedener Art, es sei denn, es gäbe eine *generische* Symmetrie, also eine Erhaltungsgröße, wobei die Parameter kontinuierlich variieren.

Im Spektrum des Hamilton–Operators (16) treten im gleichen Q_P–Sektor — sowohl im integrablen als auch im selbstdualen Modell (z. B. auf der superintegrablen Linie) — beide Arten von Crossings auf; im nicht–hermiteschen Bereich existieren noch zusätzlich *Pseudo*crossings, d. h. Eigenwerte haben gleichen Re–Teil, aber verschiedenen Im–Teil (ohne daß diese beim Crossing beeinflußt werden).

Im Zusammenhang mit (echten) Crossings beobachtet man im nicht–hermiteschen Bereich des integrablen Modells den folgendes Ereignis eines reellen Levels mit einem konjugiert–komplexen Paar : in einem $(\lambda,\ \mathrm{Re}E)$–Diagramm nähern sich die Re–Teile der beteiligten Levels; bei geeigneter Parameterwahl verschwinden die Im–Teile in einem gewissen Punkt λ_V^{li} (zweifach entarteter reeller Eigenwert; Wurzelverzweigungspunkt) und die beiden Levels laufen bei weiterem Vergrößern von λ auseinander; einer davon bildet mit dem schon ursprünglich reellen Level ein echtes Crossing bei λ_{Cr}; der andere verbindet sich bei $\lambda_{Cr} < \lambda_V^{re}$ mit dem ursprünglich reellen Level wieder zu einem konjugiert–komplexen Paar. — Eine genauere Analyse zeigt folgendes Bild : diese Erscheinung passiert nicht immer bei Annähern der Re–Teil gewisser Levels (Pseudocrossings und avoided Crossings); das Ereignis ist stark parameter- und kettenlängenabhängig; da ein konjugiert–komplexes *Paar* benötigt wird, läßt sich dies nur im Ladungssektor Q bei Impulsen $P_{Q,Symm}$ (und im oberen Bereich mit der zusätzlichen Restriktion $N \bmod 3 = 0$) beobachten, wobei die Erscheinung im Sektor $Q = 0$ sehr viel deutlicher ausgeprägt ist als in den anderen Q–Sektoren (dort erst ab $N \geq 6$); in diesen kommt es sogar nur zur Repulsion mit Im–Teil–Kontraktion (s. u.).

Eine ähnliche Beobachtung ist in [46] erwähnt, wo die Situation jedoch grundsätzlich anders ist. Dort bildet der reelle *Grundzustand* mit einem anderen reellen Niveau ein Crossing bzw. bei endlicher Kettenlänge N *vorübergehend* (bzgl. λ) ein konjugiert–komplexes Paar. Bei weiterem Verändern von λ löst sich dieses wieder auf und der eine Level davon bildet mit einem dritten hinzukommenden reellen Level dann ein bestehendenbleibendes konjugiert–komplexes Paar, das über dem dann wieder reellen Grundzustand liegt. Somit kommt es für *endliche* Kettenlänge nicht zur Ausbildung einer *drei*fachen Entartung eines Energieniveaus, jedoch konvergiert der Abstand der beiden interessanten Punkte bei geeigneter Parameterwahl im thermodynamischen Limes gegen 0 [46], sodaß ein *tri*kritischer Punkt (Phasenübergang) entsteht. In dem Fall, der hier behandelt wird, kommt es schon bei *endlicher* Kettenlänge N zur dreifachen Entartung eines (reellen) Eigenwertes. In dem sogleich betrachteten Beispiel ist der Grundzustand nur im thermodynamischen Limes (Potts–Punkt, Phasengrenze) beteiligt, wobei es dann wegen der Masselosigkeit des Modells im Potts–Punkt zu einer *fünf*fachen Eigenwertentartung kommen müßte.

Als repräsentatives Beispiel wird bei $Q = P = 0, N = 5$ das niedrigste konjugiert–komplexe Levelpaar $(m_1 + m_2)$ und der darüberliegende reelle Level $(3m_1)$ im gesamten (nicht–hermiteschen) unteren Bereich $(\varphi < \frac{\pi}{2})$ untersucht :

Für $\frac{\pi}{2} > \varphi \gtrapprox 0.3197765\pi$ ist ein vermiedenes Crossing (Repulsion) der drei Levels feststellbar, wobei das konjugiert–komplexe Paar *punkt*weise reell entartet (d. h. $\lambda_V^{li} = \lambda_V^{re}$; und λ_{Cr} existiert nicht) (Kontraktion des Im–Teils).

Bei $\varphi \approx 0.3197765(1)\pi$ ($\lambda = 0.29106221(1)$) kommt es zur *punkt*weisen Entartung *dreier* reeller Levels (der reelle Level berührt gerade den Punkt der Im–Teil–Kontraktion), d. h. $\lambda_V^{li} = \lambda_{Cr} = \lambda_V^{re}$; dieser Punkt wird mit λ_{tri} bezeichnet. Damit das konjugiert–komplexe Paar in λ_{tri} die richtige *Krümmung* erhält, ist eine punktweise Entartung bei $\lambda_{Kr} < \lambda_{tri}$ nötig, s. Diagramm 32.
Für $0.3197765\pi \gtrapprox \varphi > 0$ entfernen sich die Verzweigungspunkte λ_V^{li} und λ_V^{re} voneinander; zunächst tritt sonst nur $\lambda_{Kr}(< \lambda_V^{li})$ auf, welcher über λ_V^{li} wandert, dann zwischen diesem Wert und λ_V^{re} liegt und mit λ_{Cr} bezeichnet wird, weil er nicht mehr zur Einstellung der Krümmung sorgt, sondern ein echtes Crossing zweier reeller Levels darstellt, s. Diagramm 33.
Exakt bei $\varphi = 0$ existiert nur noch λ_V^{li}; der für $\varphi > 0$ reelle Partnerlevel ist nun *generisch* (d. h. unabhängig von λ) *zweifach* entartet (dies hat nichts mit der CP–Symmetrie (54) zu tun; vielmehr treten bei $\varphi = 0$ solche stets doppelt entarteten reellen (sogar auch doppelt konjugiert–komplexe) Levels immer in diesem Zusammenhang auf). Dieser Doppellevel bildet echte Crossings (dreifach entartete reelle Eigenwerte) mit beiden reellen Levels des ursprünglich konjugiert–komplexen Paares. Es kommt nicht mehr zur Ausbildung eines konjugiert–komplexen Paares (weil eine Wurzelverzweigung obige generische Entartung aufheben würde), s. Diagramm 34.

Bei energetisch höheren konjugiert–komplexen Levels verschieben sich die speziellen Punkte (bei gleichem φ) zu immer größeren λ–Werten, insbesondere kommt es somit für $\varphi = 0$ im Spektrum von unten nach oben zur Ausbildung eines *rein reellen* Spektrums (für kleine $N \leq 5$ existiert ab einem λ_r–Wert kein komplexer Level mehr) schon bevor die hermitesch–nicht–hermitesche Grenzkurve ($\lambda = 1$) erreicht ist. Es sei betont, daß dies nur im $Q = 0$–Sektor auftritt — auch bei Impulsen $P \neq P_{0,Symm}$, denn bei $\varphi = 0$ treten im $Q = 0$–Sektor bei jedem Impuls keine einzelnen komplexen Eigenwerte auf !

Diagramm 35 zeigt für obiges Beispiel den Bereich im Parameterraum, in dem zwei reelle Eigenwerte statt des konjugiert–komplexen Paares existieren (reeller Konus); dieser Bereich nimmt mit wachsender Kettenlänge stark ab. Den Punkt λ_{tri} findet man im Diagramm 35 an der Stelle, wo die reelle Konusfläche für $\varphi = \varphi_0 > 0$ endet; die Kurve oberhalb $\varphi_0 < \frac{\pi}{2}$ stellt die punktweise reelle Entartung des konjugiert–komplexen Paares dar. Der Punkt λ_{Kr} (Im–Teil–Kontraktionspunkt bei Repulsion) wandert dabei auf die Grenzkurve, $\lambda_V^{li}(\varphi = 0)$ auf $\lambda = 1$ (Grenzkurve) und der Punkt dreifacher Entartung, $\lambda_{tri}(\varphi, N)$, deshalb in den konformen Potts–Punkt. Damit scheint das Ganze ein Artefakt *endlicher* Kettenlänge zu sein, (denn dies sollte sich wegen der Konvergenz der Störungsreihe [54] nicht wiederholen,) obwohl nicht sicher ist, ob für das *un*endliche System im Potts–Punkt ein Punkt *mehr*facher Entartung existiert (falls existent, sollte dieser *vier*fach entartet sein, denn es fallen Verzweigungspunkt und Crossing mit dem zweifach entarteten reellen Level zusammen). Kontrolle : das normale Potts–Modell ($\varphi = \Phi = 0$), welches den Potts–Punkt mit dem integrablen gemeinsam hat, besitzt (im gleichen Q_P–Sektor) keine generisch entarteten Eigenwerte, aber echte Crossings in 0_0 (aufgrund der C–Invarianz können Levels verschiedener Parität kreuzen).

Es sei angemerkt, daß es noch weitere Parameterpunkte *drei*facher Eigenwertentartung in diesem Zusammenhang gibt : im Diagramm 34, wo der *generisch* doppelte reelle Level einen anderen reellen kreuzt und im Diagramm 33, wenn λ_{Cr} von oberhalb nach unterhalb des Punktes λ_V^{re} (bzgl. ReE) wandert.

Diese *generische* Entartung bei $\varphi = 0$ (und wegen (40) auch bei $\varphi = \pi$ mit der Restriktion N mod $(n = 3) = 0$) läßt sich mit dem *dualen* asymmetrischen Potts–Modell in Verbindung bringen : der Zweig $\varphi = 0$ stellt gerade die nicht–hermitesche Fortsetzung des dualen asymmetrischen Modells dar (s. auch Abschnitt 2.2; Integrabilitätsbedingung mit $\cos(\varphi = 0) = 1 \stackrel{!}{=} \lambda\cos(\Phi)$). Diese Entartung bleibt *nur* auf dieser Schnittmenge dieses Modells mit dem integrablen (d. h. $\lambda \geq 1$) bestehen und ist außerhalb dieser "integrablen" Kurve des dualen asymmetrischen Potts–Modells nicht existent; d. h. wegen der *Integrabilität* dieses Modells auf dieser Kurve existieren bisher nicht erkannte zusätzliche Erhaltungsgrößen. — Auch für das asymmetrische Modell ($\Phi \equiv 0$) existiert solch eine Mannigfaltigkeit ($\lambda \stackrel{!}{=} |\cos(\varphi)|$, sowie $\lambda = 0$–Linie, s. 2.2). Auf dieser kommt es in den entsprechenden Q_P–Sektoren ebenfalls zur (stets zweifachen) generischen Entartung reeller Levels : die Verzweigungspunkte der konjugiert–komplexen Paare. Außerhalb der Kurve verschwindet diese Entartung ebenso wie beim dualen Modell.

Versucht man durch eine Parametrisierung der beiden reellen Levels (L1 und L2) vom Verzweigungspunkt aus (weil λ_{Kr} auf die Grenzkurve wandert, ist nur der Verzweigungspunkt auf dieser thermodynamisch interessant) nach Art einer Wurzelverzweigung [43]

$$\frac{\mathrm{L1}+\mathrm{L2}}{2} \pm \alpha(\varphi, N)\sqrt{\lambda(N) - \lambda_c(= \cos(\varphi))} \qquad (\lambda \geq \lambda_c)$$

den Parameter α im Limes $\lambda \uparrow 1, \varphi \downarrow 0, N \to \infty$ zu bestimmen, so scheint α gegen keinen bestimmten Wert *monoton* zu konvergieren (evtl. jedoch oszillatorisch gegen ein konformes Gewicht des $\mathbb{Z}_3$–Modells, z. B. $\frac{2}{3}$, denn im Potts–Punkt handelt es sich um einen Phasenübergang 2. Ordnung (man beachte hier auch, daß das Modell dort masselos wird)).

Im Zusammenhang mit obigem Beispiel ist die Frage nach der *Impuls*erhaltung noch zu klären (diese *Plausibilitäts*betrachtung gilt im *endlichen* System nur bei genügend kleinen λ–Werten, wo die Additivität schon praktisch anwendbar ist, s. dazu auch in Abschnitt 2.5.1 im Zusammenhang mit der Konvergenz der Im–Teile) : $m_1 + m_2$ gegenüber $3m_1(P = 0)$ und weil generell $m_1(0) < m_2(0)$ für $\varphi < \frac{\pi}{2}$ gilt, zeigt nochmals, daß (niedrige) komplexe Kompositzustände sich (im allgemeinen) nur aus Impulsen ungleich $P_{Q,Min}(= 0)$ $(Q = 1, 2)$ zusammensetzen müssen. Eine Erklärung, warum obiges Phänomen überhaupt auftreten kann, zeigt folgende Überlegung : bei *kleiner* (endlicher) Kettenlänge N sind auf dem endlichen Gitter nur wenige Impulse realisiert; der Im–Teil eines komplexen Kompositzustandes (im Beispiel $m_1 + m_2$) konvergiert oszillatorisch in N; bei kleinem N und entsprechender Parameterwahl kann es deshalb (unter Impulserhaltung) günstiger sein, daß sich der Zustand aus denjenigen Einteilchenzuständen zusammensetzt, die reelle Eigenwerte haben (d. h. aus den Symmetrieimpulsen, s. 2.5.2) oder so, daß sich die Im–Teile gerade aufheben (Im–Teil–Konstruktion), was bei großer Kettenlänge N aufgrund der wesentlich größeren Anzahl an Impulsen eher möglich erscheint. Daher erklärt sich auch, daß die Konusfläche für $N \to \infty$ gegen Null strebt (s. auch Diagramm 35). Da sich energetisch höhere komplexe Levels aus *vielen* Teilchen zusammensetzen, besteht für diese diesbezüglich eine größere Variationsmöglichkeit der Impulse, deshalb ist bei sonst gleichen Bedingungen die Konusfläche für diese kleiner. Dies ist konsistent mit der Feststellung, daß im $Q = 0$–Sektor die Erscheinung für $m_1 + m_2$–Kompositzustände wesentlich ausgeprägter ist als in $Q \neq 0$–Sektoren, wo die niedrigsten komplexen Kompositzustände aus 3 Teilchen bestehen. — Auch die eine Unsicherheit bei der Teilcheninterpretation in Tabelle 6 läßt sich damit (teilweise) verstehen.

In Impulssektoren $P \neq P_{Q,Symm}$ im Ladungssektor Q (außer für $Q = 0, \varphi = 0$ und $Q = 0, \varphi = \pi, N \bmod 3 = 0$) und für $\varphi > \frac{\pi}{2}$ bei $N \bmod 3 \neq 0$ sind die Spektren vollständig komplex, jedoch existieren keine konjugiert–komplexen *Paare*. Es treten neben Pseudocrossings auch vermiedene Crossings auf, wobei *ein* Level das Vorzeichen seines Im–Teils ändert; letzteres kann auch an einem *festen* Parameterpunkt auf dem Impulsintervall $[0, 2\pi[$ geschehen, z. B. im $Q = 2$–Sektor bei $\lambda = 0.6, \varphi = \frac{\pi}{4}$ (der $2m_1$–Zustand hat bei $P \approx \frac{2\pi}{3}$ etwa die gleiche Energie wie der Einteilchenzustand, welches das Vorzeichen des Im–Teils ändert; aus Symmetriegründen muß dies beim Einteilchenzustand mit Impuls $2\pi - P \approx \frac{4\pi}{3}$ ebenfalls stattfinden).

4.2 Eigenwertverteilung

Die bisher wenig beachteten *echten* Crossings werfen die Frage auf, ob es sich dabei um einen Artefakt endlicher Kettenlänge handelt. Eine statistische Untersuchung des *kompletten* Spektrums des Hamilton–Operators (16) ist aus Gründen der zur Verfügung stehenden Computerkapazität beim $\mathbb{Z}_3$–Modell nur bis $N = 9$ Sites (d. h. ≤ 737 Eigenwerte) möglich; andererseits sind weniger als ca. 50 Eigenwerte ($N = 6$) für eine Statistik nicht brauchbar. Bestimmt werden die Abstände *benachbarter* Eigenwerte im gleichen Q_P–Sektor (repräsentativ wird hier der 0_0–Sektor ausgewählt).

Levelstatistik ist eng verknüpft mit Zufallsmatrizen [66] [74] [17] und Zufallsvariablen. Der Levelabstand (euklidische Differenzenabstände) x kann jeden Wert im Intervall $[0, \infty[$ annehmen und ist somit als eine *stetige* Zufallsvariable auffaßbar. Die Funktion

$$\begin{array}{rcccl} F & : & \mathbb{R} & \longrightarrow & [0,1] \\ & & x & \longmapsto & F(x) = P(X \le x) := \int\limits_0^x \rho(t)\,dt \end{array}$$

heißt *Verteilungs*funktion mit dem *Wahrscheinlichkeitsmaß* $P(X \le x)$ der Zufallsvariable X; dabei stellt obiger Integrand die Wahrscheinlichkeits*dichte* $\rho : \mathbb{R} \to \mathbb{R}_0^+$ mit folgender Eigenschaft (Normierung) dar :

$$\int\limits_0^\infty \rho(t)\,dt \equiv 1 \tag{65}$$

Um eine solche Wahrscheinlichkeitsdichte aus den numerischen Daten, bei denen man eine *endliche* (= diskrete) Anzahl von Abständen vorliegen hat, zu bestimmen, führt man relative *Häufigkeiten*, $h_{rel}(\overline{x})$, durch geeignete Wahl von Abstandsintervallen ein und summiert diese bis x auf, um zu einer *Wahrscheinlichkeit*, $P(x)$, zu gelangen.

$$h_{rel}(\overline{x}_i) := \frac{\text{Anzahl der Abstände im Intervall } [x_i, x_{i+1}[}{\text{Anzahl aller Abstände} = \text{Anzahl der Eigenwerte } -1}; \quad \overline{x}_i := \frac{1}{2}(x_i + x_{i+1}), x_0 := 0$$

$$P(x) := \sum_{\substack{j \ge 0 \\ x \ge \overline{x}_j}} h_{rel}(\overline{x}_j)$$

Zu vergleichen sind dann die Werte $P(x)$ und $F(x)$, wobei als Kriterium dient :

$$\sigma := \left(\frac{1}{m} \sum_{i=1}^m \left(P(x_i) - F(x_i)\right)^2 \right)^{\frac{1}{2}} \tag{66}$$

Physikalisch relevant sind Wahrscheinlichkeitsdichten mit poisson– bzw. gaussartiger Verteilung

$$\rho_p(x) \equiv \rho_p(x; \gamma, a(\gamma), b(\gamma)) := a x^\gamma e^{-bx} \qquad \text{mit } b > 0, \gamma \in \mathbb{N}_0$$

$$\rho_g(x) \equiv \rho_g(x; \gamma, a(\gamma), b(\gamma)) := a x^\gamma e^{-bx^2} \qquad \text{mit } b > 0, \gamma \in \mathbb{N}_0$$

Für (2×2)–Matrizen existieren spezielle Ensembles [64] [65] [48] [28] [25] [26] [27], wie GOE (*gaussian orthogonal ensemble* für zeitinversionsinvariante Hamilton–Operatoren) ($\rho_g(x; 1, \frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{4})$), GUE (*gaussian unitary ensemble* für nicht zeitinversionsinvariante Hamilton–Operatoren) ($\rho_g(x; 2, \frac{32}{\pi^2}, \frac{4}{\pi})$) und symplektisches Ensemble (für Hamilton–Operatoren ohne Rotationssymmetrie) ($\rho_g(x; 4, \frac{2^{18}}{3^6\pi^3}, \frac{64}{9\pi})$).

Um die Normierung (65) zu Erfüllen, gilt (Beweise durch vollständige Induktion über γ) :

$$I_p(\gamma, a(\gamma), b(\gamma)) := \int\limits_0^\infty \rho_p(x)\,dx = a b^{-(\gamma+1)} \gamma! \equiv 1 \tag{67}$$

$$\begin{aligned} I_g(\gamma, a(\gamma), b(\gamma)) \quad &:= \int\limits_0^\infty \rho_g(x)\,dx = \frac{(\gamma-1)!!}{(2b)^{\left[\frac{\gamma}{2}\right]}} I_g(\gamma \bmod 2, a(\gamma \bmod 2), b(\gamma \bmod 2)) \equiv 1 \\ &\text{mit } I_g(0, a(0), b(0)) = \frac{a}{2}\sqrt{\frac{\pi}{2}}, \quad I_g(1, a(1), b(1)) = \frac{a}{2b} \end{aligned} \tag{68}$$

Zur Feststellung der Größe σ (66) braucht man ($y \ge 0$) (Beweise durch vollständige Induktion über γ)

$$\tilde{I}_p(y; \gamma, a(\gamma), b(\gamma)) := \int\limits_0^y \rho_p(x)\,dx = a \sum_{k=0}^{\gamma} x^{\gamma-k} e^{-bx} b^{-(k+1)} \prod_{j=0}^{k-1} (\gamma - j) \Bigg|_y^0$$

$$\tilde{I}_g(y;\gamma,a(\gamma),b(\gamma)) := \int\limits_0^y \rho_g(x)\,dx = a\sum_{k=0}^{\left[\frac{\gamma-1}{2}\right]} x^{\gamma-1-2k}e^{-bx^2}(2b)^{-(k+1)}\prod_{j=0}^{k-1}(\gamma-1-2j)\Bigg|_y^0$$

$$+ (2b)^{-\frac{\gamma}{2}}\tilde{I}_g(y;0,a(0),b(0))\delta_{0,\gamma\,\mathrm{mod}\,2}\sum_{k=1}^{\left[\frac{\gamma}{2}\right]}(\gamma+1-2k)$$

$$\text{mit } \tilde{I}_g(y;0,a(0),b(0)) := a\int\limits_0^y e^{-bx^2}\,dx$$

dabei wird $\tilde{I}_g(y;0,a(0),b(0))$ mittels Romberg–Verfahren (extrapolierendes Interpolations–Integrationsverfahren) [80] numerisch bestimmt.

Mittelwert (μ) und Standardabweichung (σ) lauten für die stetige Zufallsvariable X :

$$\mu_p(I_p(\gamma,a(\gamma),b(\gamma))) := \int\limits_0^\infty x\rho_p(x;\gamma,a(\gamma),b(\gamma))\,dx = \int\limits_0^\infty \rho_p(x;\gamma+1,a(\gamma),b(\gamma))\,dx = I_p(\gamma+1,a(\gamma),b(\gamma))$$

$$\mu_g(I_g(\gamma,a(\gamma),b(\gamma))) = I_g(\gamma+1,a(\gamma),b(\gamma))$$

$$\begin{aligned}\sigma_p(I_p(\gamma,a(\gamma),b(\gamma))) &:= \sqrt{\int\limits_0^\infty (x-\mu_p(I_p(\gamma,a(\gamma),b(\gamma))))^2\rho_p(x;\gamma,a(\gamma),b(\gamma))\,dx} \\ &= \sqrt{I_p(\gamma+2,a(\gamma),b(\gamma)) - 2\mu_p^2(I_p(\gamma,a(\gamma),b(\gamma))) + \mu_p^2(I_p(\gamma,a(\gamma),b(\gamma)))\underbrace{I_p(\gamma,a(\gamma),b(\gamma))}_{\equiv 1}} \\ &= \sqrt{I_p(\gamma+2,a(\gamma),b(\gamma)) - \mu_p^2(I_p(\gamma,a(\gamma),b(\gamma)))}\end{aligned}$$

$$\sigma_g(I_g(\gamma,a(\gamma),b(\gamma))) := \sqrt{I_g(\gamma+2,a(\gamma),b(\gamma)) - \mu_g^2(I_g(\gamma,a(\gamma),b(\gamma)))}$$

und für die diskrete Verteilung :

$$\mu_x := \frac{1}{m}\sum_{j=1}^m x_j; \qquad \sigma_x := \left(\frac{1}{m}\sum_{j=1}^m (x_j-\mu_x)^2\right)^{\frac{1}{2}}$$

Die Konstanten a und b werden durch Vorgabe von $b \in [0.01, 100]$ und Erfüllen von (67) bzw. (68) bestimmt, dabei variiert b in 0.01–Schritten, wobei das Minimum von σ (66) bei festem γ den besten b–Wert festlegt.

Die Untersuchung des integrablen Modells zeigt, daß die besten b–Werte in verschiedenen Parameterpunkten in der gleichen Größenordnung liegen und scheinen für $N \to \infty$ aufsteigend monoton gegen einen endlichen Wert zu konvergieren, der > 1 ist; die poissonartigen Verteilungen besitzen immer das kleinere σ (66), wobei im hermiteschen Bereich $\gamma = 0$ ("Poisson on the line"; kennzeichnend für *konservative* integrable Systeme [60]) und im nicht–hermiteschen $\gamma = 1$ ("Poisson in the plane"; kennzeichnend für *dissipative* integrable Systeme [60]) die besten Exponenten darstellen (s. auch Diagramm 36); auch die Mittelwerte und Standardabweichungen stimmen dann von stetiger und diskreter Verteilung am besten überein. Zum Vergleich dazu wird in Diagramm 37 die Eigenwertverteilung außerhalb der integrablen Mannigfaltigkeit gezeigt : die dortige poissonartige Kurve stellt noch den besten Fit an die Verteilung dar, jedoch ist der σ–Wert (66) um ein Vielfaches größer als im Falle, wenn die Integrabilitätsbedingung

(19) erfüllt wird. Dies ist, was man auch erwarten sollte, denn integrable Modelle besitzen (ohne Beweis) poissonartige Verteilungen [73].

Insgesamt bedeutet dies, daß echte Crossings *keinen* Artefakt endlicher Kettenlänge darstellen, sondern daß diese sogar noch vermehrt auftreten und man ein “dichtes” Spektrum erhält.

Im selbstdualen Fall erhält man als besten Fit ebenfalls eine poissonartige Verteilung mit $\gamma = 0$, jedoch sind die b–Werte noch größer als im integrablen Fall. Dies deutet auf eine Überlagerung mehrerer gaussartiger Verteilungen (mit $\gamma > 0$, wahrscheinlich $\gamma = 2$) hin, wobei die Wahrscheinlichkeitsdichte $\rho(0) \neq 0$ [66] ist, was dann einer poissonartigen Verteilung sehr ähnlich sieht. Verständlich ist dies, wenn man bedenkt, daß im Parameterraum die rein selbstdualen Bereiche umgeben sind von Mannigfaltigkeiten, auf denen das Potts–Modell integrabel ($\varphi = 0 : \mathcal{WA}_2$–Modell, $\varphi = \frac{\pi}{2}$: superintegrabel; $\lambda = 1$: integrabel nach Yang–Baxter–Relation, $\lambda = 0$: klassisch integrabel) ist und damit eine poissonartige Verteilung aufweist.

5 Zusammenfassung

Bei der analytischen Fortsetzung des $\mathbb{Z}_3$–symmetrischen integrablen Potts–Modells in den nicht–hermiteschen Bereich des Parameterraumes (welche auch für allgemeines $n \geq 3$ gilt) kann das Spektrum des Hamilton–Operators (in der massiven Hochtemperaturphase) wie im hermiteschen Bereich als *Quasiteilchenspektrum* mit 2 ($= n-1$) fundamentalen Teilchen interpretiert werden. Dabei bleiben auch im thermodynamischen Grenzwert die komplexen Zustände als komplex–konjugierte Eigenwerte in konjugierten Impulssektoren des gleichen Ladungssektors bestehen.

Das Spektrum besitzt in den nicht–hermiteschen Bereichen eine *exakte* Symmetrie, die durch Impulsspiegelung hervorgeht. Im unteren Bereich sind die Impulse ("Symmetrieimpulse"), zu denen die Eigenwerte bis auf komplexe Konjugation symmetrisch sind, ladungsunabhängig und für jede Kettenlänge gegeben. Im oberen Bereich hängen die Symmetrieimpulse von der $\mathbb{Z}_n$–Ladung Q ab und existieren (auf dem Gitter) nur für spezielle Kettenlängen ($N \bmod n = 0$) (2.5.2). Dadurch lassen sich die Extrema*stellen* der Dispersionsrelation der fundamentalen Teilchen in den nicht–hermiteschen Bereichen *exakt* bestimmen (2.7.1). Auf der hermiteschen Grenzkurve ($\lambda = |\cos(\varphi)|$) besteht *Paritätssymmetrie*, die für $\frac{\pi}{2} < \varphi \leq \pi$ *ladungs*– und kettenlängenabhängig ist. Diese Kurve ist die Schnittmenge mit dem asymmetrischen chiralen Potts–Modell.

In den nicht–hermiteschen Bereichen existiert das $Q = 2$–Quasiteilchen *stabil* als Einteilchenzustand auf dem *gesamten* Impulsbereich der 1. Brillouin–Zone $[0.2\pi[$. Die Existenz im Parameterraum zwischen den beiden nicht–hermiteschen Bereichen ist abhängig vom jeweiligen Impuls (2.7.2).

Die neuartige numerische Methode (3.1.1) erlaubt eine sehr genaue Bestimmung der Phasengrenze (im Hochtemperaturbereich); die numerischen Werte stimmen auf ca. 10^{-3} mit der exakten Lösung [63] überein (s. Tabelle 12). Das integrable $\mathbb{Z}_3$–Modell besitzt wie das selbstduale vier verschiedene Phasen — jedoch verlaufen die massiv–masselosen Grenzen (insbesondere für $\varphi > \frac{\pi}{2}$) grundlegend anders (s. Diagramm 30). Dies liegt an der Existenz der nicht–hermiteschen Bereiche im integrablen Modell (wegen der Integrabilitätsbedingung unterliegen die Parameter gewissen Restriktionen). Perturbative und numerische Lösungen stimmen im nicht–hermiteschen Bereich wegen der exakten Symmetrie (Impulsspiegelung) sehr gut überein.

Auf den Mannigfaltigkeiten, die die Schnittmengen des integrablen Modells mit dem asymmetrischen bzw. dualen asymmetrischen Potts–Modell bilden, gelten im selben Q_P–Sektor *generische* zweifache (reelle) Eigenwertentartungen, die zusätzliche lokale Erhaltungsgrößen darstellen, die bisher nicht entdeckt wurden (s. Abschnitt 4).

Die Eigenwertverteilung des integrablen $\mathbb{Z}_3$–Modells ist poissonartig und läßt im hermiteschen Bereich auf ein konservatives integrables und im nicht–hermiteschen Bereich auf ein dissipatives integrables System schließen (4.2).

Die Handhabung (großer) nicht–hermitescher Matrizen, insbesondere zur Ermittlung extremaler Eigenwerte, wird in 2.3 und C.3 dargestellt; das *Arnoldi*–Verfahren ist eine Verallgemeinerung des bekannten Lanczos–Verfahrens. Numerische Schwierigkeiten in Bezug auf Genauigkeit der erhaltenen Eigenwerte werden diskutiert.

Danksagung

Diese Diplomarbeit entstand unter der Betreuung von Herrn Professor G. von Gehlen, dem ich für die neuartige interessante Themenstellung, sein inspirierendes Engagement und seine Toleranz meiner Arbeitsweise gegenüber danke.

Für konstruktive Diskussionen bedanke ich mich bei Herrn Professor V. A. Fateev und Herrn Professor A. L. Talapov.

Ganz besonderer Dank gebührt meinem Mitarbeiter Andreas Honecker für zahlreiche wertvolle Diskussionen, Informationen und hervorragende Zusammenarbeit.

Ferner bedanke ich mich bei meinen Kolleginnen und Kollegen der theoretischen Abteilung des Physikalischen Instituts für ein gutes Arbeitsklima, insbesondere bei Simone Artz, Inga Daase, Jörg Gebhardt, Lars Jaeger, Michael Pröbsting und Christoph Richard.

A Tabellen

	φ							
λ	0	$\frac{\pi}{6}$	$\frac{\pi}{4}$	$\frac{\pi}{3}$	0.45π	0.55π	$\frac{3}{5}\pi$	$\frac{3}{4}\pi$
0.2			2.20640(1)					
0.25			2.07508(1)		1.570(5)	1.238(6)	1.064(1)	0.370(1)
0.4	2.1515(2)	1.8485(1)	1.6846(1)	1.5175(1)				0.099(1)
0.6			1.159(1)	1.0325(1)				

Tabelle 1: Massen des fundamentalen Teilchens m_1 für verschiedene Parameterwerte

	φ							
λ	0	$\frac{\pi}{6}$	$\frac{\pi}{4}$	$\frac{\pi}{3}$	0.45π	0.55π	$\frac{3}{5}\pi$	$\frac{3}{4}\pi$
0.2			3.1587(1)					
0.25			2.9964(1)		3.1004(1)	2.84(1)	2.275(1)	3.062(2)
0.4	2.1515(2)	2.3999(1)	2.492(3)	2.553(3)				2.677(2)
0.6			1.778(1)	1.786(4)				

Tabelle 2: Massen des fundamentalen Teilchens m_2 für verschiedene Parameterwerte

	φ							
λ	0	$\frac{\pi}{6}$	$\frac{\pi}{4}$	$\frac{\pi}{3}$	0.45π	0.55π	$\frac{3}{5}\pi$	$\frac{3}{4}\pi$
0.2			0.6985(1)					
0.25			0.6925(1)		0.506(2)	0.436(4)	0.4677(3)	0.121(1)
0.4	1.0000	0.7702(1)	0.6760(9)	0.5944(7)				0.037(1)
0.6			0.6519(8)	0.5781(9)				

Tabelle 3: Massenverhältnis $\frac{m_1}{m_2}$ für verschiedene Parameterwerte

N	$\mathrm{Re}(\Delta E_{Q=0,i}(P=0))$ $i=1$	$2+3$	$4+5$	6
2	6.3330322			
3	5.8230567			
4	5.6440530			8.0282063
5	5.5682359	6.8147324		7.6823871
6	5.5288564	6.4828072	7.5811620	7.4306868
7	5.5043680	6.2431654	7.2998957	7.2499990
8	5.4870410	6.0691380	7.0312252	7.1190079
9	5.4737718	5.9406295	6.7972954	7.0224636
10	5.4631347	5.8438848	6.6002329	6.9499986
11	5.4543692	5.7696489	6.4360715	6.8946636
12	5.4470113	5.7116552	6.2995518	6.8560405
∞	5.387(9)	5.375(4)	5.41(7)	6.67(8)
y	2.009(5)	2.00(4)	2.04(8)	3.0(3)
	m_1+m_2	m_1+m_2	m_1+m_2	$3m_1$

N	$\mathrm{Re}(\Delta E_{Q=1,i}(P=0))$ $i=0$	1	2	3	4	$5+6$
2	2.2551033	7.9416322				
3	2.2126221	7.1691132	9.2087407			
4	2.2073767	6.8235886	8.6898990	8.7205564		9.9658543
5	2.2065784	6.6501616	8.2251882	8.3996236	9.6782650	9.5614712
6	2.2064384	6.5522097	7.8329802	8.1958595	8.8652387	9.2024469
7	2.2064114	6.4915770	7.5308742	8.0630099	8.5919233	8.9115936
8	2.2064059	6.4514700	7.3020223	7.9727874	8.3060955	8.6827003
9	2.2064047	6.4236149	7.1278253	7.9088515	8.0459258	8.5036290
10	2.2064045	6.4035280	6.9936383	7.8617198	7.8206712	8.3620011
11	2.2064044	6.3885961	6.8888089	7.8257666	7.6294022	8.2530199
12	2.2064044	6.3772109	6.8057425	7.7976361	7.4680226	8.1750614
∞	2.20640(1)	6.317(6)	6.313(5)	7.67(9)	6.38(6)	7.73(9)
y	*expon.*	2.009(2)	2.00(4)	3.0(1)	2.1(1)	3.0(2)
	m_1	$2m_2$	$2m_2$	$2m_1+m_2$	$2m_2$	$2m_1+m_2$

N	$\mathrm{Re}(\Delta E_{Q=2,i}(P=0))$ $i=0$	1	2	3	4	7	$8+9$
2	3.1607886	6.0006707					
3	3.1367919	5.2932084				10.1604757	
4	3.1476104	4.9460460	6.5732942			9.6443755	11.0846916
5	3.1542755	4.7621534	6.1715492			9.3249324	10.6122694
6	3.1570795	4.6564386	5.8251773	6.7109015		9.1302156	10.2268813
7	3.1581361	4.5912353	5.5533089	6.4753784		9.0059892	9.9362573
8	3.1585160	4.5486162	5.3440715	6.2269955	6.7630179	8.9221029	9.6893815
9	3.1586492	4.5194050	5.1827289	5.9985459	6.6107865	8.8623168	9.4971767
10	3.1586953	4.4985876	5.0571594	5.7988130	6.4321002	8.8177011	9.3471220
11	3.1587111	4.4832650	4.9582788	5.6276417	6.2522974	8.7831508	9.2288511
12	3.1587165	4.4716776	4.8794543	5.4820173	6.0825694	8.7556116	9.1270215
∞	3.1587(1)	4.411(3)	4.411(5)	4.53(9)	4.55(9)	8.63(9)	8.65(9)
y	*expon.*	2.009(1)	2.00(4)	2.0(1)	2.0(2)	3.0(2)	3.0(3)
	m_2	$2m_1$	$2m_1$	$2m_1$	$2m_1$	$2m_2+m_1$	$2m_2+m_1$

Tabelle 4: Die niedrigsten Energiegaps $\Delta E_{Q,i}(P=0)$ für $\lambda=0.2, \varphi=\frac{\pi}{4}$

N	$\mathrm{Re}(\Delta E_{Q=0,i}(P=0))$ $i=1$	$2+3$	4	$5+6$	7
2	6.3543437				
3	5.1909389	8.8098874			
4	4.7141317	7.8423412	8.0894190		
5	4.4968326	7.1382198	7.2498710	9.0058629	
6	4.3883863	6.5128325	6.7798770	8.5060697	8.4987417
7	4.3299062	6.0309187	6.4581617	7.9824547	8.0967871
8	4.2960209	5.6754177	6.2032255	7.4682557	7.7648760
9	4.2749563	5.4072045	6.0041653	7.0363458	7.4365099
10	4.2609289	5.2011811	5.8478993	6.6710750	7.1476944
11	4.2509649	5.0403568	5.7240795	6.3630571	6.8991875
12	4.2434734	4.9129683	5.6249720	6.1030649	6.6866335
∞	4.201(3)	4.3(2)	5.12(5)	4.25(5)	5.2(1)
y	2.00(4)	2.1(1)	3.0(1)	2.02(1)	2.7(4)
	m_1+m_2	m_1+m_2	$3m_1$	m_1+m_2	$3m_1$

N	$\mathrm{Re}(\Delta E_{Q=1,i}(P=0))$ $i=0$	1	2	3	$4+5$
2	1.8432790	8.3747680			
3	1.7161150	6.9132001	9.2799068		
4	1.6907317	6.1667055	8.3129125	9.5141973	10.3773916
5	1.6855535	5.7645116	7.6388459	8.7270384	9.6577446
6	1.6846309	5.5325076	7.1811633	8.0383879	9.0187636
7	1.6845468	5.3896793	6.8659725	7.4880948	8.4950070
8	1.6845878	5.2963560	6.6445029	7.0567005	8.0735411
9	1.6846247	5.2320999	6.4857074	6.7181303	7.7346802
10	1.6846455	5.1858675	6.3695999	6.4503080	7.4609233
11	1.6846556	5.1513993	6.2830786	6.2363004	7.2384183
12	1.6846603	5.1249682	6.2174055	6.0634731	7.0560938
∞	1.6846(1)	4.99(1)	5.97(1)	5.10(5)	6.00(9)
y	*expon.*	2.1(1)	3.02(1)	2.1(1)	3.0(1)
	m_1	$2m_2$	$2m_1+m_2$	$2m_2$	$2m_1+m_2$

N	$\mathrm{Re}(\Delta E_{Q=2,i}(P=0))$ $i=0$	1	2	3	4	5	8	$9+10$
2	2.6105472	6.5722236						
3	2.4616080	5.3279610		10.1196528				
4	2.4493611	4.6402407	7.4103425	9.0291141				11.6237149
5	2.4606589	4.2389866	6.7497693	8.3146158			10.7864880	10.8194704
6	2.4723859	3.9909618	6.1621636	7.6146708	7.8564576		10.1931851	10.1013058
7	2.4805778	3.8301136	5.6849878	7.2328892	7.5564691		9.6058549	9.5199079
8	2.4856155	3.7215285	5.3052707	6.8229648	7.3544763	7.6950983	9.0757707	9.0724660
9	2.4885325	3.6456551	5.0030959	6.4383361	7.2145220	7.4491046	8.7074758	8.6853032
10	2.4901665	3.5910208	4.7609809	6.0949467	7.1148051	7.1568775	8.4090705	8.3764321
11	2.4910641	3.5506272	4.5652258	5.7945876	7.0418169	6.8587619	8.1660719	8.1281356
12	2.4915510	3.5200591	4.4054390	5.5339605	6.9870014	6.5732735	?	7.9278155
∞	2.492(3)	3.36(3)	3.44(4)	3.4(1)	6.77(9)	3.33(5)	6.9(2)	6.93(3)
y	*expon.*	2.02(1)	2.1(1)	2.0(2)	3.0(3)	2.0(4)	3.0(8)	3.0(1)
	m_2	$2m_1$	$2m_1$	$2m_1$	$2m_2+m_1$	$2m_1$	$2m_2+m_1$	$2m_2+m_1$

Tabelle 5: Die niedrigsten Energiegaps $\Delta E_{Q,i}(P=0)$ für $\lambda = 0.4, \varphi = \frac{\pi}{4}$

	Re($\Delta E_{Q=0,i}(P=0)$)				
N	$i=1$	$2+3$	4	$5+6$	7
2	6.6207927				
3	4.8446496	9.5936100			12.6267263
4	4.0146817	8.2583468	8.9148325		10.8837014
5	3.5848138	7.2189993	7.8687749	9.7722179	9.5891417
6	3.3449767	6.4400851	6.9779901	9.0688177	8.6542990
7	3.2038157	5.8489381	6.2812655	8.3714388	7.9720947
8	3.1173001	5.3869867	5.7528009	7.7473363	7.4651897
9	3.0625453	5.0146255	5.3595082	7.2060270	7.0815904
10	3.0269572	4.7104721	5.0632410	6.7395078	6.7863870
11	3.0032880	4.4616147	4.8322440	6.3360131	6.5557550
12	2.9872142	4.2572256	4.6468530	5.9855528	6.3734265
∞	2.905(5)	3.0(2)	3.59(9)	3.0(2)	5.41(9)
y	2.0(2)	2.0(2)	2.5(4)	1.8(2)	3.05(8)
	m_1+m_2	m_1+m_2	$3m_1$ oder $2m_2$	m_1+m_2	$3m_2$

	Re($\Delta E_{Q=1,i}(P=0)$)				
N	$i=0$	1	2	3	$4+5$
2	1.5074946	8.9770014			
3	1.2685607	6.9169092	9.5723998		
4	1.1939497	5.7501412	8.1984065	10.2638528	10.9673902
5	1.1684568	5.0594555	7.2065046	9.2028473	9.9469968
6	1.1600565	4.6288626	6.5017660	8.2631099	9.0376540
7	1.1577063	4.3486147	5.9909328	7.4983218	8.2852462
8	1.1573759	4.1596148	5.6118845	6.8860922	7.6729980
9	1.1576130	4.0281966	5.3246999	6.3948483	7.1743934
10	1.1579292	3.9342732	5.1032816	5.9974704	6.7656047
11	1.1581870	3.8654123	4.9300828	5.6729024	6.4275860
12	1.1583673	3.8136919	4.7929604	5.4052197	6.1456285
∞	1.159(1)	3.54(3)	4.10(1)	3.75(5)	4.16(7)
y	*expon.*	2.016(1)	3.06(3)	1.9(2)	3.01(1)
	m_1	$2m_2$	$2m_1+m_2$	$2m_2$	$2m_1+m_2$

	Re($\Delta E_{Q=2,i}(P=0)$)					
N	$i=0$	1	2	3	4	$5+6$
2	2.1635849	7.2856349				
3	1.8461075	5.6017872		10.3099751		
4	1.7508791	4.5994449	8.2948636	8.7063376		12.1023902
5	1.7249527	3.9729128	7.4254802	7.6048137		10.9873539
6	1.7237132	3.5595540	6.6384282	6.8577180	8.5323343	10.0095776
7	1.7307289	3.2745672	5.9857863	6.3394886	8.0347337	9.2058520
8	1.7395352	3.0711508	5.4547534	5.9708671	7.4963181	8.5542513
9	1.7476791	2.9218959	5.0224316	5.7027310	6.9852840	8.0265453
10	1.7543955	2.8098948	4.6680601	5.5039139	6.5230330	7.5958907
11	1.7596162	2.7242540	4.3750483	5.3540424	6.1130591	7.2294568
12	1.7635321	2.6577002	4.1306004	5.2394203	5.7522129	6.9146698
∞	1.778(1)	2.29(5)	2.35(5)	4.75(2)	2.42(9)	4.8(3)
y	*expon.*	2.04(5)	2.03(3)	3.003(5)	2.0(2)	3.0(1.0)
	m_2	$2m_1$	$2m_1$	$2m_2+m_1$	$2m_1$	$2m_2+m_1$

Tabelle 6: Die niedrigsten Energiegaps $\Delta E_{Q,i}(P=0)$ für $\lambda = 0.6, \varphi = \frac{\pi}{4}$

	y_N für $\mathrm{Re}(\Delta E_{Q=0,i}(P=0))$			
N	$i=1$	$2+3$	$4+5$	6
3	1.9102			
4	1.8371			
5	1.5662			1.3169
6	1.3437	1.4489		1.5678
7	1.2293	1.5976	0.9000	1.7593
8	1.1962	1.6973	1.1483	1.9170
9	1.2081	1.7665	1.3230	2.0554
10	1.2412	1.8157	1.4541	2.1845
11	1.2834	1.8515	1.5571	2.3101
12	1.3292	1.8782	1.6409	2.1680
∞	2.009(5)	2.00(4)	2.04(8)	3.0(3)

	y_N für $\mathrm{Re}(\Delta E_{Q=1,i}(P=0))$					
N	$i=0$	1	2	3	4	$5+6$
3	5.0748	1.5921				
4	6.4366	1.8087	0.6871			
5	7.6191	1.8799	0.9763	1.6337		0.8941
6	8.4245	1.9123	1.2613	1.7962	1.5524	1.1968
7	7.8783	1.9377	1.4407	1.8891	0.7558	1.4276
8	4.9326	1.9599	1.5631	1.9531	1.0362	1.6125
9	1.9306	1.9773	1.6504	2.0138	1.2320	1.7677
10	0.4127	1.9896	1.7148	2.0862	1.3788	1.9191
11	0.2358	1.9977	1.7633	2.1790	1.4945	1.9858
12	0.0000	2.0026	1.8006	2.2891	1.5895	1.8550
∞	*expon.*	2.009(2)	2.00(4)	3.0(1)	2.1(1)	3.0(2)

	y_N für $\mathrm{Re}(\Delta E_{Q=2,i}(P=0))$						
N	$i=0$	1	2	3	4	7	$8+9$
3	-5.9767	1.4517					
4	2.3668	1.7370				1.4297	
5	4.1178	1.8851	0.9209			1.6949	0.9667
6	5.5091	1.9612	1.2012			1.8033	1.1993
7	6.8479	1.9984	1.3844	0.7103		1.8519	1.3215
8	8.3871	2.0140	1.5145	0.9748		1.8906	1.5960
9	10.9272	2.0174	1.6109	1.1611	0.5806	1.9443	1.7360
10	22.5923	2.0135	1.6843	1.3016	0.8232	2.0240	1.8503
11	-9.0167	2.0050	1.7411	1.4127	1.0030	2.1344	1.9506
12	-4.5559	1.9935	1.7856	1.5034	1.1434	2.2782	2.2237
∞	*expon.*	2.009(1)	2.00(4)	2.0(1)	2.0(2)	3.0(2)	3.0(3)

Tabelle 7: Die Exponenten y_N für die niedrigsten Energiegaps $\Delta E_{Q,i}(P=0)$ für $\lambda = 0.2, \varphi = \frac{\pi}{4}$

N	y_N für $\mathrm{Re}(\Delta E_{Q=0,i}(P=0))$ $i=1$	$2+3$	4	$5+6$	7
3	1.9234				
4	2.3006	0.8129			
5	2.5006	0.9539	1.5073		
6	2.5593	1.2977	1.3897	0.6089	
7	2.5079	1.4939	1.4264	0.8516	0.8429
8	2.3926	1.5876	1.6233	1.1100	0.9113
9	2.2632	1.6659	1.7786	1.2235	1.1631
10	2.1586	1.7288	1.9177	1.3337	1.3124
11	2.1001	1.7790	2.0492	1.4277	1.4321
12	2.0946	1.8187	2.1780	1.5089	1.5358
∞	2.0(1)	2.00(3)	3.0(1)	2.02(1)	2.7(4)

N	y_N für $\mathrm{Re}(\Delta E_{Q=1,i}(P=0))$ $i=0$	1	2	3	$4+5$
3	3.9866	1.3919			
4	5.6903	1.7077	1.2011		
5	8.3403	1.8743	1.5204	0.8802	0.8049
6	18.8095	1.9528	1.7582	1.1549	1.0531
7	−3.5245	1.9821	1.9554	1.3452	1.2362
8	11.0283	1.9914	2.1263	1.4921	1.3857
9	−5.9887	1.9986	2.2791	1.6130	1.5149
10	−5.9783	2.0113	2.4210	1.7173	1.6302
11	−2.1034	2.0308	2.5602	1.8104	1.7336
12	−0.9326	2.0554	2.7057	1.8962	1.8303
∞	*expon.*	2.1(1)	3.02(1)	2.1(1)	3.0(1)

N	y_N für $\mathrm{Re}(\Delta E_{Q=2,i}(P=0))$ $i=0$	1	2	3	4	5	8	$9+10$
3	3.3570	1.2084						
4	−1.1770	1.4945		0.6156				
5	1.3795	1.6852	0.8155	0.6083				0.8423
6	2.5706	1.8183	1.0720	0.8427			0.9086	1.1196
7	3.5075	1.9090	1.2503	0.8660	2.0848		1.2743	1.3138
8	4.3562	1.9669	1.3876	0.8471	2.2066		1.6328	1.4204
9	5.1827	1.9999	1.5005	1.0120	2.3013	0.4948	1.5745	1.6922
10	6.0479	2.0148	1.5973	1.1383	2.3805	0.7020	1.7126	1.8369
11	7.0556	2.0164	1.6828	1.2398	2.4554	0.8556	1.8421	1.9760
12	8.4413	2.0087	1.7602	1.3243	2.5361	0.9753		2.1026
∞	*expon.*	2.00(1)	2.1(1)	2.0(2)	3.0(3)	2.0(4)	3.0(8)	3.0(1)

Tabelle 8: Die Exponenten y_N für die niedrigsten Energiegaps $\Delta E_{Q,i}(P=0)$ für $\lambda = 0.4, \varphi = \frac{\pi}{4}$

	y_N für $\mathrm{Re}(\Delta E_{Q=0,i}(P=0))$				
N	$i=1$	$2+3$	4	$5+6$	7
3	1.6033				
4	1.9412	0.7786			0.9609
5	2.1954	0.9745	0.9680		1.2093
6	2.3864	1.1021	1.2404	0.6015	1.3888
7	2.5098	1.2001	1.4643	0.7919	1.5315
8	2.5599	1.2951	1.5973	0.9250	1.6510
9	2.5325	1.4015	1.6532	1.0279	1.7540
10	2.4302	1.5047	1.6768	1.1158	1.8443
11	2.2639	1.5893	1.7133	1.1980	1.9742
12	2.0523	1.6578	1.7650	1.2756	1.9920
∞	2.0(2)	2.0(2)	2.5(4)	1.8(2)	3.05(8)

	y_N für $\mathrm{Re}(\Delta E_{Q=1,i}(P=0))$				
N	$i=0$	1	2	3	$4+5$
3	2.8539	1.1746			
4	3.9716	1.4735	1.0050		
5	5.8580	1.6792	1.2418	0.7901	0.7278
6	12.0215	1.8276	1.4112	1.0271	0.9376
7	-1.3139	1.9304	1.5513	1.1900	1.0868
8	-1.7033	1.9937	1.6754	1.3163	1.2031
9	1.3398	2.0280	1.7886	1.4217	1.2996
10	2.4557	2.0280	1.8927	1.5142	1.3832
11	2.8898	2.0140	1.9883	1.5980	1.4579
12	2.8816	1.9893	2.0750	1.6758	1.5260
∞	*expon.*	2.016(1)	3.06(3)	1.9(2)	3.01(1)

	y_N für $\mathrm{Re}(\Delta E_{Q=2,i}(P=0))$					
N	$i=0$	1	2	3	4	$5+6$
3	4.0525	1.0138				
4	4.8017	1.2531		1.1803		
5	-3.8403	1.4183	0.7021	1.4580		0.7338
6	-0.1489	1.5460	0.9144	1.6573		0.9303
7	1.0663	1.6492	1.0576	1.8207	0.5509	1.0691
8	1.9016	1.7332	1.1651	1.9618	0.7549	1.1754
9	2.6409	1.8003	1.2513	2.0860	0.9009	1.2571
10	3.3975	1.8517	1.3236	2.1955	1.0132	1.3244
11	4.2735	1.8885	1.3859	2.2914	1.1045	1.4300
12	5.4406	1.9120	1.4405	2.3746	1.1817	1.5404
∞	*expon.*	2.04(5)	2.03(3)	3.003(5)	2.0(2)	3.0(1.0)

Tabelle 9: Die Exponenten y_N für die niedrigsten Energiegaps $\Delta E_{Q,i}(P=0)$ für $\lambda = 0.6, \varphi = \frac{\pi}{4}$

N	$\mathrm{Re}(\Delta E_{Q=0,i}(P=\pi))$ i=1
6	1.7832014
12	1.3322850
∞	1.10(5)
	$3m_1$

N	$\mathrm{Re}(\Delta E_{Q=1,i}(P=\frac{\pi}{3}))$ i=0	$1+2$
6	0.37426441	4.1278922
12	0.37223232	2.9959191
∞	0.370(1)	2.4(1)
	m_1	$4m_1$

N	$\mathrm{Re}(\Delta E_{Q=2,i}(P=-\frac{\pi}{3}))$ i=0+1	2
6	2.1680201	3.0683209
12	2.0934892	3.0655602
∞	2.05(1)	3.062(2)
	$2m_1$	m_2

Tabelle 10: Die niedrigsten Energiegaps $\Delta E_{Q,i}$ für $\lambda = 0.25, \varphi = \frac{3}{4}\pi$

N	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
Signum	+		−	−		+	+		−	−	

Tabelle 11: Vorzeichen der Grundzustandsenergie E_0 bei $\lambda = \frac{1}{4}, \varphi = \frac{3}{4}\pi$

λ_c^{num}	λ_c^{pert}	λ_c^{exakt}	$\varphi_c[\pi]$	P_{Min}^{num}	P_{Min}^{pert}	P_{Min}^{exakt}
0.000000000000	0.000000000000	0	1.00			
0.00472005622(5)	0.004720149260		0.99	$\frac{\pi}{3}$	$\frac{\pi}{3}$	$\frac{\pi}{3}$
0.0129402511(3)	0.012942011362		0.98	$\frac{\pi}{3}$	$\frac{\pi}{3}$	$\frac{\pi}{3}$
0.0231076286(6)	0.023116792302		0.97	$\frac{\pi}{3}$	$\frac{\pi}{3}$	$\frac{\pi}{3}$
0.0346672638(4)	0.034695455381		0.96	$\frac{\pi}{3}$	$\frac{\pi}{3}$	$\frac{\pi}{3}$
0.04731623569(7)	0.047381344453		0.95	$\frac{\pi}{3}$	$\frac{\pi}{3}$	$\frac{\pi}{3}$
0.060868341(2)	0.060993895352		0.94	$\frac{\pi}{3}$	$\frac{\pi}{3}$	$\frac{\pi}{3}$
0.07520346(1)	0.075417377430		0.93	$\frac{\pi}{3}$	$\frac{\pi}{3}$	$\frac{\pi}{3}$
0.09024343(5)	0.090576474289		0.92	$\frac{\pi}{3}$	$\frac{\pi}{3}$	$\frac{\pi}{3}$
0.1059390(2)	0.106423067617		0.91	$\frac{\pi}{3}$	$\frac{\pi}{3}$	$\frac{\pi}{3}$
0.1222621(4)	0.122928514256		0.90	$\frac{\pi}{3}$	$\frac{\pi}{3}$	$\frac{\pi}{3}$
0.1392010(7)	0.140078927615		0.89	$\frac{\pi}{3}$	$\frac{\pi}{3}$	$\frac{\pi}{3}$
0.156757(2)	0.157872246603		0.88	$\frac{\pi}{3}$	$\frac{\pi}{3}$	$\frac{\pi}{3}$
0.174944(3)	0.176316450665		0.87	$\frac{\pi}{3}$	$\frac{\pi}{3}$	$\frac{\pi}{3}$
0.193786(4)	0.195428568741		0.86	$\frac{\pi}{3}$	$\frac{\pi}{3}$	$\frac{\pi}{3}$
0.213316(7)	0.215234289690		0.85	$\frac{\pi}{3}$	$\frac{\pi}{3}$	$\frac{\pi}{3}$
0.23358(1)	0.235768080030		0.84	$\frac{\pi}{3}$	$\frac{\pi}{3}$	$\frac{\pi}{3}$
0.25463(1)	0.257073784386		0.83	$\frac{\pi}{3}$	$\frac{\pi}{3}$	$\frac{\pi}{3}$
0.27654(2)	0.279205743860		0.82	$\frac{\pi}{3}$	$\frac{\pi}{3}$	$\frac{\pi}{3}$
0.29939(3)	0.302230531307		0.81	$\frac{\pi}{3}$	$\frac{\pi}{3}$	$\frac{\pi}{3}$
0.32329(3)	0.326229484555		0.80	$\frac{\pi}{3}$	$\frac{\pi}{3}$	$\frac{\pi}{3}$
0.34836(4)	0.351302339010		0.79	$\frac{\pi}{3}$	$\frac{\pi}{3}$	$\frac{\pi}{3}$
0.37477(5)	0.377572453683		0.78	$\frac{\pi}{3}$	$\frac{\pi}{3}$	$\frac{\pi}{3}$
0.40272(5)	0.405194452857		0.77	$\frac{\pi}{3}$	$\frac{\pi}{3}$	$\frac{\pi}{3}$
0.43248(6)	0.434365697170		0.76	$\frac{\pi}{3}$	$\frac{\pi}{3}$	$\frac{\pi}{3}$
0.46445(6)	0.465344128471		0.75	$\frac{\pi}{3}$	$\frac{\pi}{3}$	$\frac{\pi}{3}$
0.49918(5)	0.498477343258		0.74	$\frac{\pi}{3}$	$\frac{\pi}{3}$	$\frac{\pi}{3}$
0.53755(4)	0.534252872542		0.73	$\frac{\pi}{3}$	$\frac{\pi}{3}$	$\frac{\pi}{3}$
0.58115(2)	0.573392241698		0.72	$\frac{\pi}{3}$	$\frac{\pi}{3}$	$\frac{\pi}{3}$
0.619123(5)		0.619(2)	0.712512(1)	$\frac{\pi}{3}$		$\frac{\pi}{3}$
	0.614351339843		0.710582235876		$\frac{\pi}{3}$	$\frac{\pi}{3}$
0.623055(8)		0.622(2)	0.71	0.94442(2)		
0.63982(1)		0.641(2)	0.70	0.83578(2)		
0.67368(9)		0.674(2)	0.68	0.7072(1)		
0.7214(2)		0.720(2)	0.65	0.5736(3)		
0.7969(3)		0.796(2)	0.60	0.5425(4)		
0.8605(5)		0.860(2)	0.55	0.392(2)		
0.902(1)		0.9013	0.50	0.266(2)		≈ 0.225
0.954(1)		0.953(2)	0.42	0.132(2)		
0.981(1)		0.983(3)	0.33	0.076(2)		
0.993(1)			0.25	0.047(1)		
0.997(2)			0.17	0.026(1)		
0.999(3)			0.08	0.0091(3)		
1.000(3)		1	0.00	0.0000(3)		0

Tabelle 12: (λ_c, φ_c)–Werte für den Hochtemperaturbereich

$\varphi = 0.435\pi$			
N	ΔE	y_N	Δy_N
3	$4.1471083 + i0.0303045$		
6	$4.1709420 - i0.0057470$	4.6030	
9	$4.1767973 - i0.0342617$	−4.8741	−9.4771
12	$4.1571196 - i0.0407265$	−2.2218	+2.6523
∞	$4.17(1) - i0.0470(4)$	*expon.*	

$\varphi = 0.438\pi$			
N	ΔE	y_N	Δy_N
3	$4.1440617 + i0.0266245$		
6	$4.1680494 - i0.0078920$	0.6524	
9	$4.1825372 - i0.0335442$	1.0390	0.3866
12	$4.2019129 - i0.0511586$	4.2497	3.2107
∞	$4.21(1) - i0.10(1)$	*expon.*	

$\varphi = 0.44\pi$			
N	ΔE	y_N	Δy_N
3	$4.1419240 + i0.0240919$		
6	$4.1658294 - i0.0087232$	0.5274	
9	$4.1821579 - i0.0302711$	0.8847	0.3573
12	$4.1973120 - i0.0431668$	1.7783	0.8936
∞	$4.22(1) - i0.070(5)$	*expon.*	

$\varphi = 0.445\pi$			
N	ΔE	y_N	Δy_N
3	$4.1361926 + i0.0172997$		
6	$4.1585705 - i0.0086911$	0.6620	
9	$4.1736965 - i0.0219689$	1.2337	0.5717
12	$4.1837460 - i0.0291543$	1.9616	0.7279
∞	$4.197(1) - i0.041(1)$	*expon.*	

$\varphi = \arccos(0.15) \approx 0.452\pi$			
N	ΔE	y_N	Δy_N
3	4.1270939		
6	4.1433589	0.8383	
9	4.1528073	1.5094	0.6711
12	4.1582379	2.3080	0.7986
∞	4.164(1)	*expon.*	

$\varphi = 0.455\pi$			
N	ΔE	y_N	Δy_N
3	4.1324841		
6	4.1283803	4.3585	
9	4.1282936	1.3108	−3.0477
12	4.1282459	1.6950	+0.3842
∞	4.12817(1)	*expon.*	

$\varphi = 0.46\pi$			
N	ΔE	y_N	Δy_N
3	4.1296254		
6	4.1075580	1.0520	
9	4.0989337	1.3414	0.2894
12	4.0939275	1.8905	0.5491
∞	4.087(1)	*expon.*	

$\varphi = 0.47\pi$			
N	ΔE	y_N	Δy_N
3	4.1149579		
6	4.0621592	0.8871	
9	4.0399087	1.0928	0.2057
12	4.0273466	1.3140	0.2212
∞	4.00(1)		

$\varphi = 0.48\pi$			
N	ΔE	y_N	Δy_N
3	4.0927515		
6	4.0111800	0.9609	
9	3.9774996	1.2224	0.2615
12	3.9589901	1.5112	0.2888
∞	3.925(5)		

$\varphi = 0.49\pi$			
N	ΔE	y_N	Δy_N
3	4.0643205		
6	3.9556584	1.0204	
9	3.9122462	1.3050	0.2846
12	3.8889001	1.6341	0.3291
∞	3.850(5)		

$\varphi = 0.50\pi$			
N	ΔE	y_N	Δy_N
3	4.0302994		
6	3.8966133	1.0113	
9	3.8448860	1.2313	0.2200
12	3.8175229	1.4577	0.2264
∞	3.765(5)		

Tabelle 13: Kritischer Stabilitätsbereich des untersten Energieniveaus als Einteilchenlevel für $Q = 2$ bei $P = \frac{2}{3}\pi$ und $\lambda = 0.15$.

$\varphi = 0.445\pi$			
N	ΔE	y_N	Δy_N
3	$4.6560057 + i0.0835590$		
6	$4.7419714 + i0.0892189$	1.6301	
9	$4.7636812 + i0.0917681$	1.8576	0.2275
12	$4.7721023 + i0.0929437$	1.9901	0.1325
∞	$4.783(1) + i0.09416(1)$	2.2(1)	

$\varphi = \arccos(0.15) \approx 0.452\pi$			
N	ΔE	y_N	Δy_N
3	4.6103922		
6	4.6880739	1.6080	
9	4.7083092	1.8808	0.2728
12	4.7162685	2.0776	0.1968
∞	4.726(2)	2.3(1)	

$\varphi = 0.46\pi$			
N	ΔE	y_N	Δy_N
3	4.6544145		
6	4.7250277	1.4915	
9	4.7454064	1.8251	0.3336
12	4.7538073	2.0871	0.2620
∞	4.764(1)		

$\varphi = 0.47\pi$			
N	ΔE	y_N	Δy_N
3	4.6461862		
6	4.7014238	1.3278	
9	4.7190280	1.6190	0.2912
12	4.7266885	1.7876	0.1786
∞	4.738(2)		

$\varphi = 0.48\pi$			
N	ΔE	y_N	Δy_N
3	4.6309522		
6	4.6682008	1.2570	
9	4.6812955	1.6540	0.3970
12	4.6874118	2.0548	0.4008
∞	4.695(2)		

$\varphi = 0.49\pi$			
N	ΔE	y_N	Δy_N
3	4.6145670		
6	4.6330507	1.2173	
9	4.6399878	1.6963	0.4790
12	4.6435225	2.4379	0.7416
∞	4.647(1)	*expon.*	

$\varphi = 0.5\pi$			
N	ΔE	y_N	Δy_N
3	4.5973971		
6	4.5999970	23.5182	
9	4.6000000		
12	4.6000000		
∞	4.6000000	*expon.*	

$\varphi = 0.51\pi$			
N	ΔE	y_N	Δy_N
3	4.5846119		
6	4.5718895	1.2357	
9	4.5666553	2.0105	0.7748
12	4.5642136	3.0791	1.0686
∞	4.5625(2)	*expon.*	

$\varphi = 0.52\pi$			
N	ΔE	y_N	Δy_N
3	4.5718871		
6	4.5500834	1.7012	
9	4.5432682	3.0008	1.2996
12	4.5411380	4.7187	1.7179
∞	4.5404(1)	*expon.*	

$\varphi = 0.53\pi$			
N	ΔE	y_N	Δy_N
3	4.5606343		
6	4.5341791	2.1970	
9	4.5282272	4.0520	1.8550
12	4.5270460	6.1114	2.0594
∞	4.5268(1)	*expon.*	

$\varphi = \arccos(-0.15) \approx 0.548\pi$			
N	ΔE	y_N	Δy_N
3	4.5434948		
6	4.5159578	2.9923	
9	4.5124654	5.2792	+2.2869
12	4.5121164	4.8173	−0.4619
∞	4.5120(1)	*expon.*	

Tabelle 14: Kritischer Stabilitätsbereich des obersten Energieniveaus des untersten Streubandes als Einteilchenlevel für $Q = 2$ bei $P = \frac{2}{3}\pi$ und $\lambda = 0.15$.

(λ,φ)	N	α	A	β	B	$P_{1,Min}$	P_0
$(\frac{1}{4},\frac{\pi}{4})$	11	8.2305	8.2010	4.3061	4.3652	0	0
$(\frac{3}{5},\frac{\pi}{4})$	11	17.8849	17.9347	1.3414	1.2318	0	0
$(\frac{1}{4},\frac{3}{4}\pi)$	12	2.5680	2.5568	0.1386	0.1232	$\frac{\pi}{3}$	$\frac{\pi}{3}$
$(\frac{1}{4},\frac{3}{5}\pi)$	10	3.6581	3.6646	1.1269	1.0734	$\frac{\pi}{3}$	1.047197862
$(\frac{2}{5},\frac{3}{4}\pi)$	10	3.7010	3.5103	-0.0049	-0.1144	$\frac{\pi}{3}$	0.9768477009
	6	3.7235	3.7433	0.0087	-0.1346	$\frac{\pi}{3}$	$\frac{\pi}{3}$
$(\frac{1}{10},0.53\pi)$	10	1.7182	1.7152	2.7641	2.7578	0.9322051215	0.9257021075
$(\frac{1}{4},0.55\pi)$	10	4.0831	4.0787	1.5740	1.5160	0.7489578117	0.7117240386
$(\frac{1}{4},0.45\pi)$	10	5.2354	5.1862	2.4659	2.4508	0.2982397394	0.2608857302
$\left(\frac{3}{5},\arccos\left(\frac{3}{5}\frac{\cos(0.45\pi)}{\frac{1}{4}}\right)\right)$	10	14.6450	14.3849	0.6109	0.5742	0.2982397394	0.2100345657
$(0.35,\frac{2}{5}\pi)$	11	8.0439	8.0610	2.1882	2.1205	0.1629271403	0.1313911772
$(\frac{2}{5},0.55\pi)$	10	6.4999	6.5493	0.8639	0.6816	0.6575359271	0.5883191711
$(\frac{2}{5},\frac{3}{5}\pi)$	10	5.7179	5.7179	0.5583	0.3973	0.8178773101	0.7701674383
$(\frac{3}{5},\frac{\pi}{3})$	11	15.5376	15.5797	0.9178	0.8005	0.1952285144	0.1316891332
$(\frac{3}{5},\frac{\pi}{2})$	11	11.0406	11.1531	0.4533	0.0133	$\frac{\pi}{6}\approx 0.5235987756$	0.4137667204
$(\frac{3}{5},\frac{2}{3}\pi)$	11	7.0886	7.1410	-0.0963	-0.4725	0.8519690367	0.7929662093
$(\frac{7}{10},\frac{3}{10}\pi)$	10	19.2862	19.1635	0.5041	0.3912	0.1913594215	0.1183811510
$(\frac{4}{5},\frac{2}{5}\pi)$	10	19.0850	18.3622	-0.5005	-0.3767	0.3914035629	0.2600248410
$(\frac{9}{10},\frac{\pi}{6})$	10	29.9947	29.8751	0.1031	0.1624	0.09188093307	0.04216324074
$(\frac{9}{10},\frac{2}{5}\pi)$	11	21.3975	20.8057	-0.8155	-0.6029	0.406770849	0.2616946735

(λ,φ)	σ_{int}	σ_F	$F^{int}_{abs,Max}$	$F^{F}_{abs,Max}$	$P(F^{int}_{abs,Max})$	$P(F^{F}_{abs,Max})$
$(\frac{1}{4},\frac{\pi}{4})$	0.0103	0.0063	0.0173	0.0142	2, 9	0
$(\frac{3}{5},\frac{\pi}{4})$	0.0201	0.0171	0.0331	0.0483	2, 9	0
$(\frac{1}{4},\frac{3}{4}\pi)$	0.0114	0.0098	0.0194	0.0212	5, 11	2
$(\frac{1}{4},\frac{3}{5}\pi)$	0.0196	0.0133	0.0319	0.0251	4	2
$(\frac{2}{5},\frac{3}{4}\pi)$	0.1166		0.2949	0.1882	8	8
	0.0755		0.1181	0.0439	0, 2	0, 2
$(\frac{1}{10},0.53\pi)$	0.0029	0.0018	0.0060	0.0025	9	0
$(\frac{1}{4},0.55\pi)$	0.0253	0.0132	0.0547	0.0264	9	1
$(\frac{1}{4},0.45\pi)$	0.0202	0.0084	0.0414	0.0134	8	0
$\left(\frac{3}{5},\arccos\left(\frac{3}{5}\frac{\cos(0.45\pi)}{\frac{1}{4}}\right)\right)$	0.1142	0.0498	0.2000	0.1108	9	0
$(0.35,\frac{2}{5}\pi)$	0.0264	0.0139	0.0579	0.0291	9	0
$(\frac{2}{5},0.55\pi)$	0.0712	0.0406	0.1534	0.1030	9	1
$(\frac{2}{5},\frac{3}{5}\pi)$	0.0689	0.0524	0.1384	0.1280	9	1
$(\frac{3}{5},\frac{\pi}{3})$	0.0798	0.0391	0.1481	0.1006	10	0
$(\frac{3}{5},\frac{\pi}{2})$	0.1658	0.1286	0.2924	0.3910	0	1
$(\frac{3}{5},\frac{2}{3}\pi)$	0.1751		0.3656	0.1372	0	10
$(\frac{7}{10},\frac{3}{10}\pi)$	0.1083	0.0534	0.2049	0.1477	9	0
$(\frac{4}{5},\frac{2}{5}\pi)$			0.3714	0.3185	9	1
$(\frac{9}{10},\frac{\pi}{6})$	0.0918	0.0100	0.1680	0.0249	1	1
$(\frac{9}{10},\frac{2}{5}\pi)$			0.4202	0.1177	10	10

Tabelle 15: Vergleichswerte für Dispersionskurven von Fourier–Transformation und mittels Integrabilitätsbedingung implizierter Phasenverschiebung für $Q=1$

(λ, φ)	N	α	A	β	B	$P_{1,Min}$	P_0
$(\frac{2}{5}, \frac{\pi}{6})$	11	18.7999	18.7263	5.7572	5.8624	0	0
$(\frac{1}{4}, \frac{\pi}{4})$	11	12.5994	12.5592	8.9754	9.0374	0	0
$(\frac{2}{5}, \frac{\pi}{4})$	11	19.1860	19.1559	6.2054	6.1865	0	0
$(\frac{3}{5}, \frac{\pi}{4})$	11	26.2730	26.3851	3.0962	3.0992	0	0
$(\frac{1}{4}, \cos(-\frac{1}{4}))$	10	10.9833	10.3884	12.5090	13.3134	$-\frac{\pi}{3}$	-1.041881553
	6	11.9023	11.0256	11.6192	12.8706	$-\frac{\pi}{3}$	$-\frac{\pi}{3}$
$(\frac{1}{4}, \frac{3}{5}\pi)$	10	11.7443	11.4065	11.6118	12.2125	$-\frac{\pi}{3}$	-1.051809946
	6	12.3134	11.9003	11.0519	11.8360	$-\frac{\pi}{3}$	$-\frac{\pi}{3}$
$(\frac{1}{4}, 0.68\pi)$	11	12.8112	12.6241	9.9879	10.4612	$-\frac{\pi}{3}$	-1.047208703
	6	12.7950	12.6405	9.9996	10.4613	$-\frac{\pi}{3}$	$-\frac{\pi}{3}$
$(\frac{1}{4}, \frac{3}{4}\pi)$	12	12.7604	12.6216	9.3977	9.8206	$-\frac{\pi}{3}$	$-\frac{\pi}{3}$
$(\frac{2}{5}, \frac{3}{5}\pi)$	10	19.7666	19.3234	7.2891	8.3036	$-\frac{\pi}{3}$	-1.047077361
	6	19.9879	19.5003	7.1681	8.2891	$-\frac{\pi}{3}$	$-\frac{\pi}{3}$

(λ, φ)	σ_{int}	σ_F	$F^{int}_{abs,Max}$	$F^{F}_{abs,Max}$	$P(F^{int}_{abs,Max})$	$P(F^{F}_{abs,Max})$
$(\frac{2}{5}, \frac{\pi}{6})$	0.0131	0.0081	0.0218	0.0218	$2,9$	0
$(\frac{1}{4}, \frac{\pi}{4})$	0.0074	0.0044	0.0129	0.0103	$2,9$	0
$(\frac{2}{5}, \frac{\pi}{4})$	0.0064	0.0049	0.0068	0.0072	$2,9$	$3,8$
$(\frac{3}{5}, \frac{\pi}{4})$	0.0138	0.0115	0.0287	0.0208	$3,8$	$3,8$
$(\frac{1}{4}, \cos(-\frac{1}{4}))$	0.0816	0.0459	0.1452	0.1113	0	8
	0.1421	0.0964	0.2382	0.1789	$0,4$	5
$(\frac{1}{4}, \frac{3}{5}\pi)$	0.0662	0.0364	0.1020	0.0853	0	8
	0.0953	0.0622	0.1533	0.1159	$0,4$	5
$(\frac{1}{4}, 0.68\pi)$	0.0600	0.0357	0.0948	0.0738	0	9
	0.0620	0.0392	0.0941	0.0363	$0,4$	$0,4$
$(\frac{1}{4}, \frac{3}{4}\pi)$	0.0560	0.0327	0.0873	0.0682	$0,8$	10
$(\frac{2}{5}, \frac{3}{5}\pi)$	0.1285	0.0825	0.2141	0.1785	0	8
	0.1465	0.1020	0.2333	0.2018	$0,4$	5

Tabelle 16: Vergleichswerte für Dispersionskurven von Fourier–Transformation und mittels Integrabilitätsbedingung implizierter Phasenverschiebung für $Q = 2$

B Diagramme

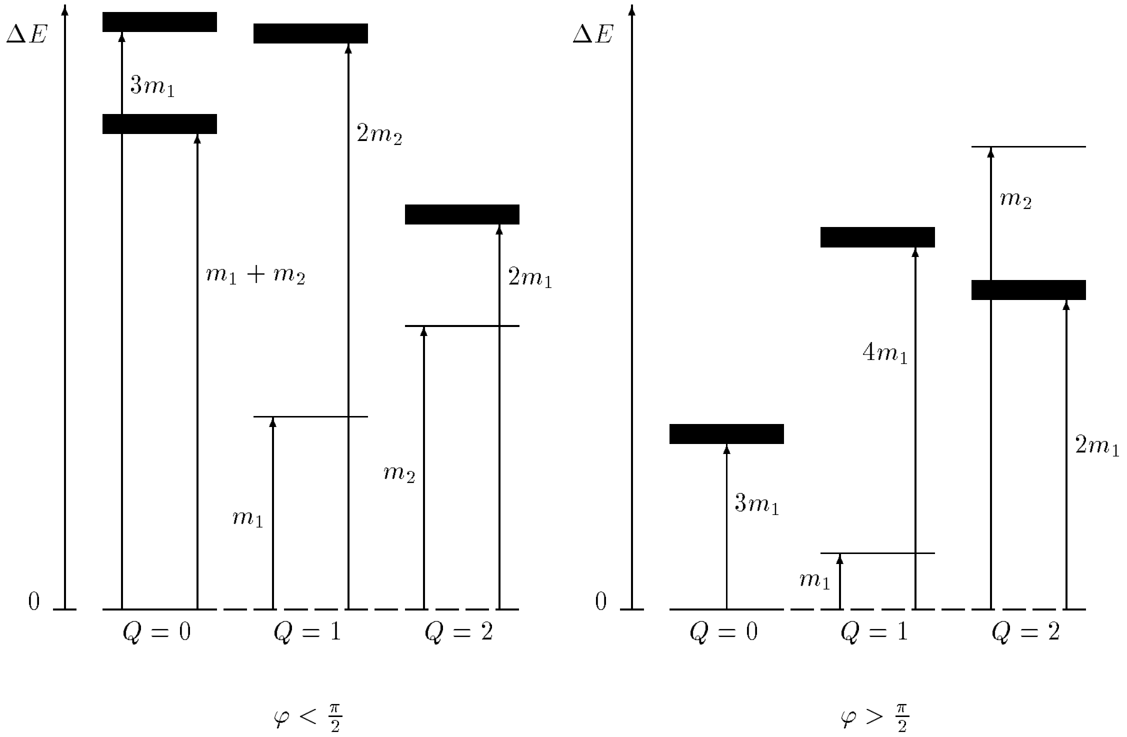

Diagramm 2: Generelle Struktur des niedrigliegenden Spektrums

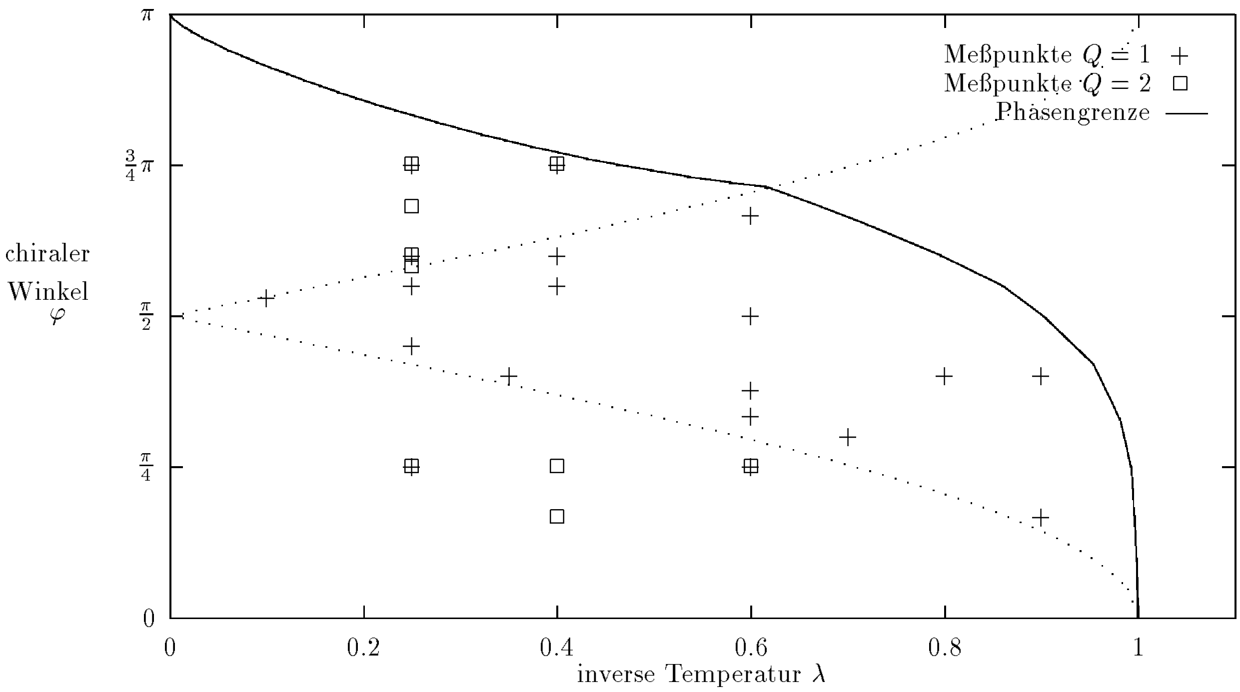

Diagramm 3: Verteilung der Meßpunkte zur Dispersionsrelation im Parameterraum

Diagramm 4: Gleiche Symbole kennzeichnen zueinandergehörige Levels

Diagramm 5: Gleiche Symbole kennzeichnen zueinandergehörige Levels

Diagramm 6: Gleiche Symbole kennzeichnen zueinandergehörige Levels

Diagramm 7: Gleiche Symbole kennzeichnen zueinandergehörige Levels

Diagramm 8: Gleiche Symbole kennzeichnen zueinandergehörige Levels

Diagramm 9: Gleiche Symbole kennzeichnen zueinandergehörige Levels

Diagramm 10: Gleiche Symbole kennzeichnen zueinandergehörige Levels

Diagramm 11: Gleiche Symbole kennzeichnen zueinandergehörige Levels

Diagramm 12: Gleiche Symbole kennzeichnen zueinandergehörige Levels

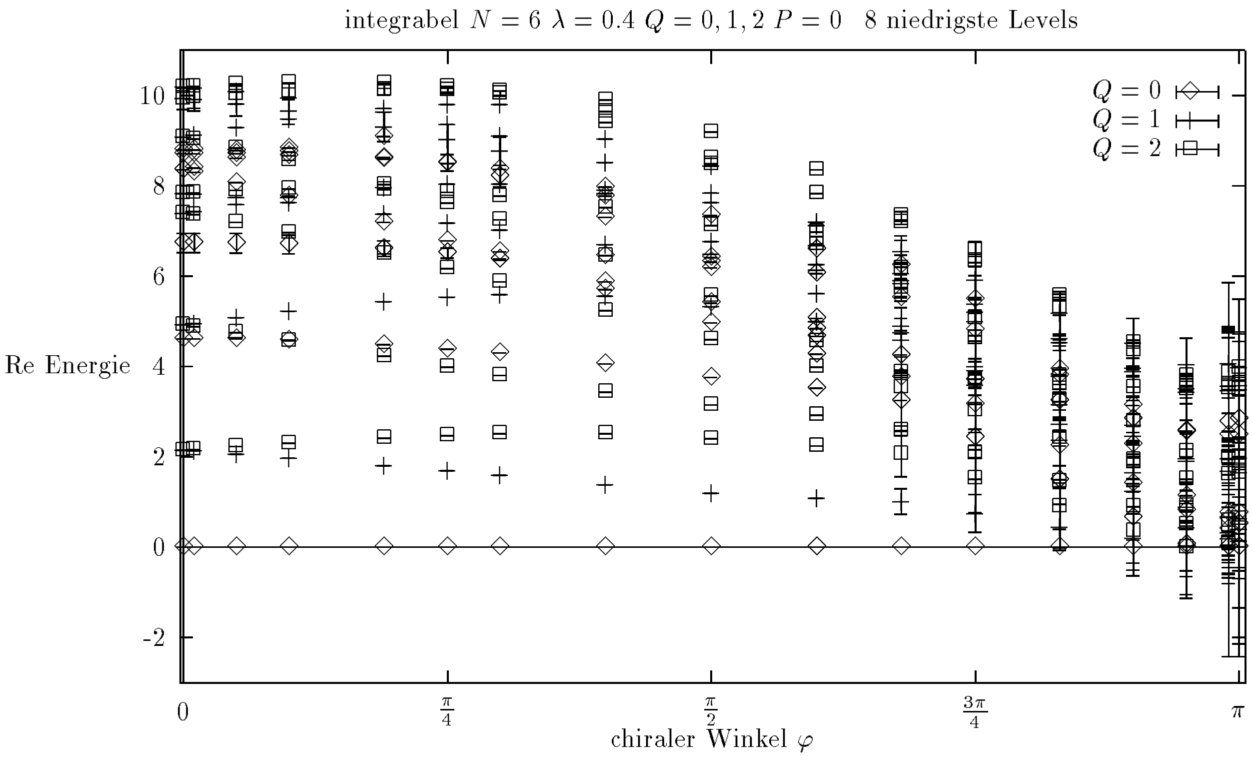

Diagramm 13: Verlauf der Levels bei 6 Sites; Fehlerbalken bedeuten Im–Teil

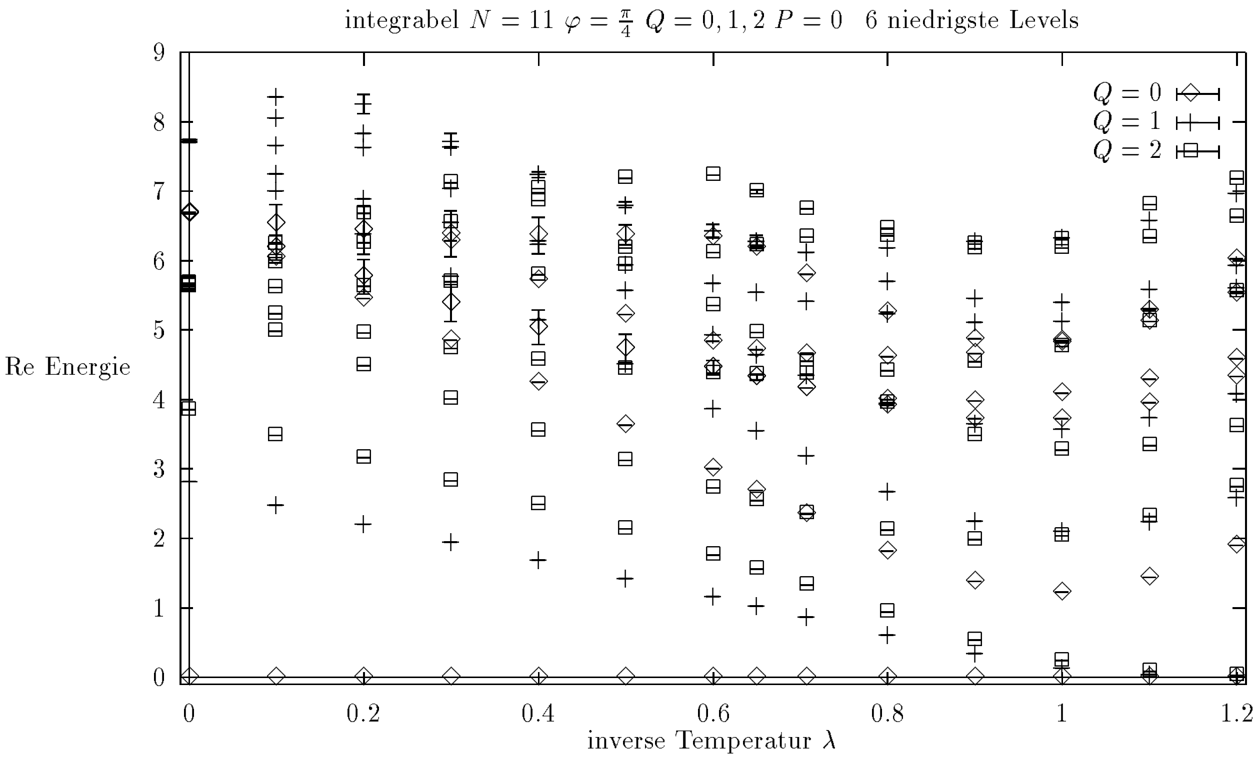

Diagramm 14: Verlauf der Levels bei 11 Sites; Fehlerbalken bedeuten Im–Teil

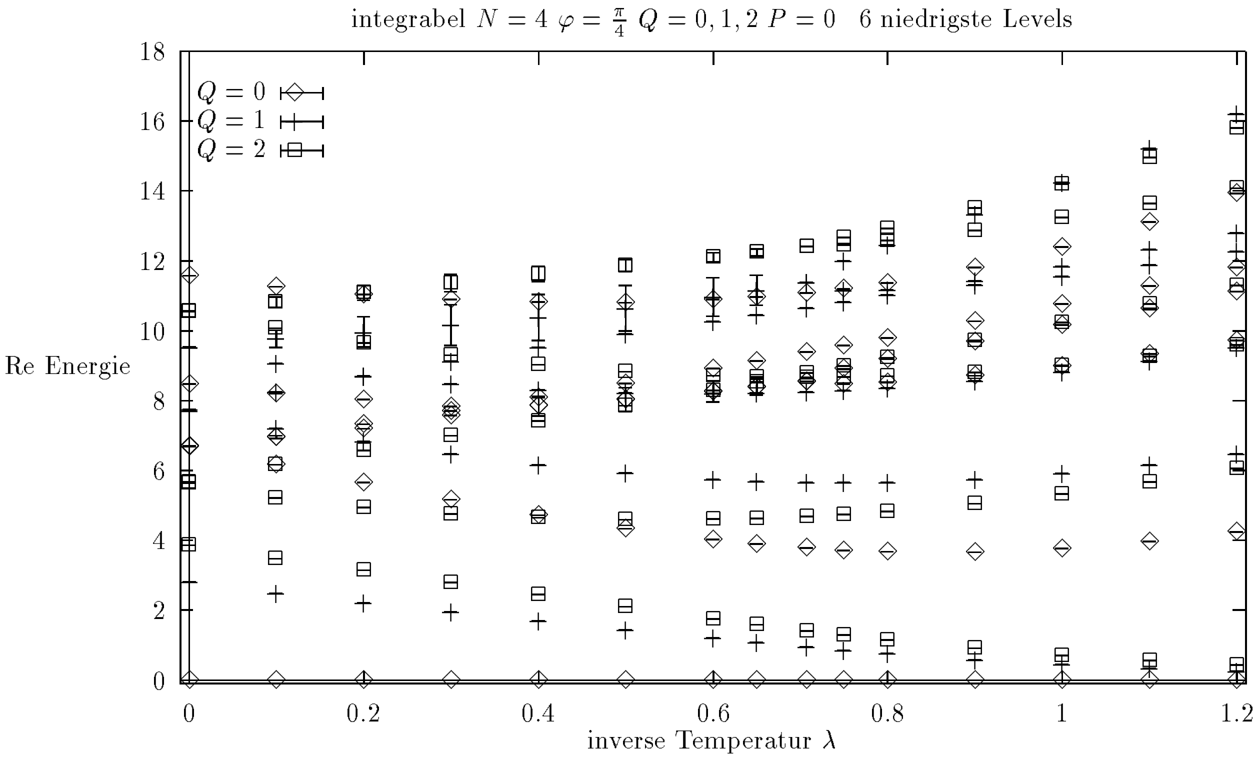

Diagramm 15: Verlauf der Levels bei 4 Sites; Fehlerbalken bedeuten Im–Teil

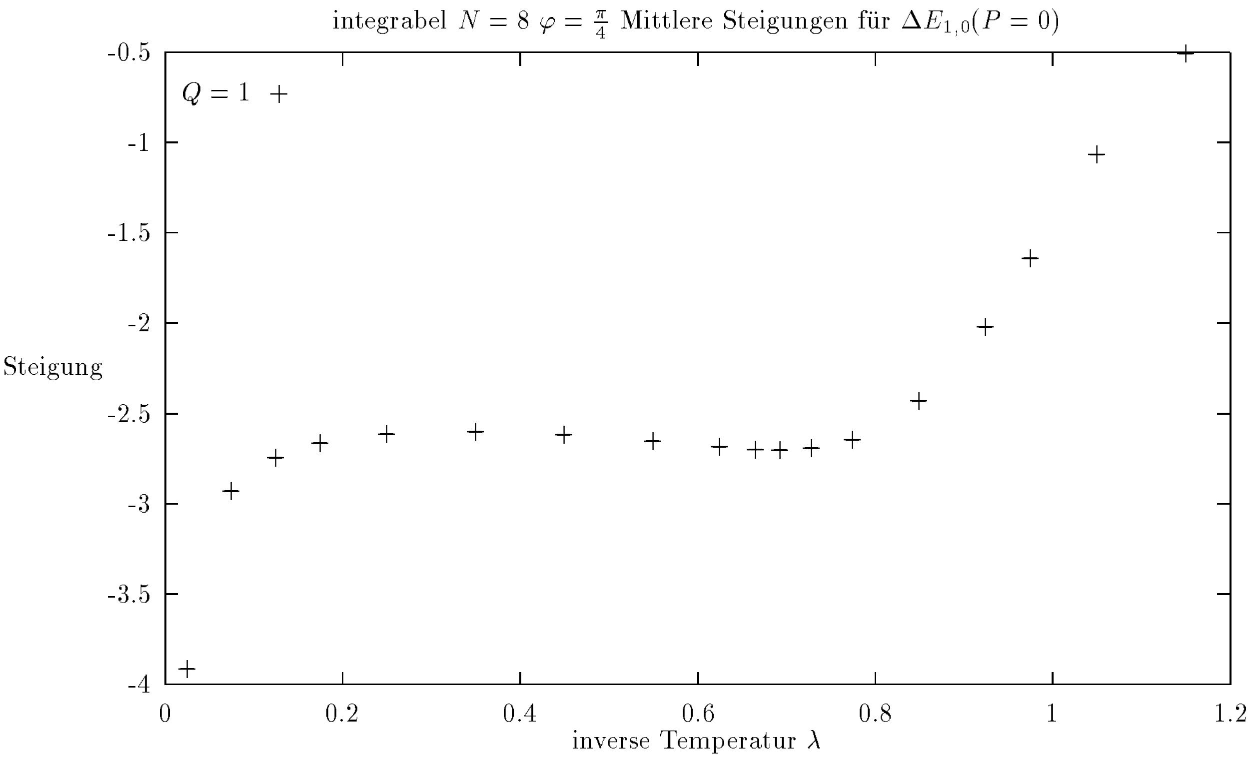

Diagramm 16: Verlauf des niedrigsten Levels bei 8 Sites im Hochtemperaturbereich für $Q = 1$

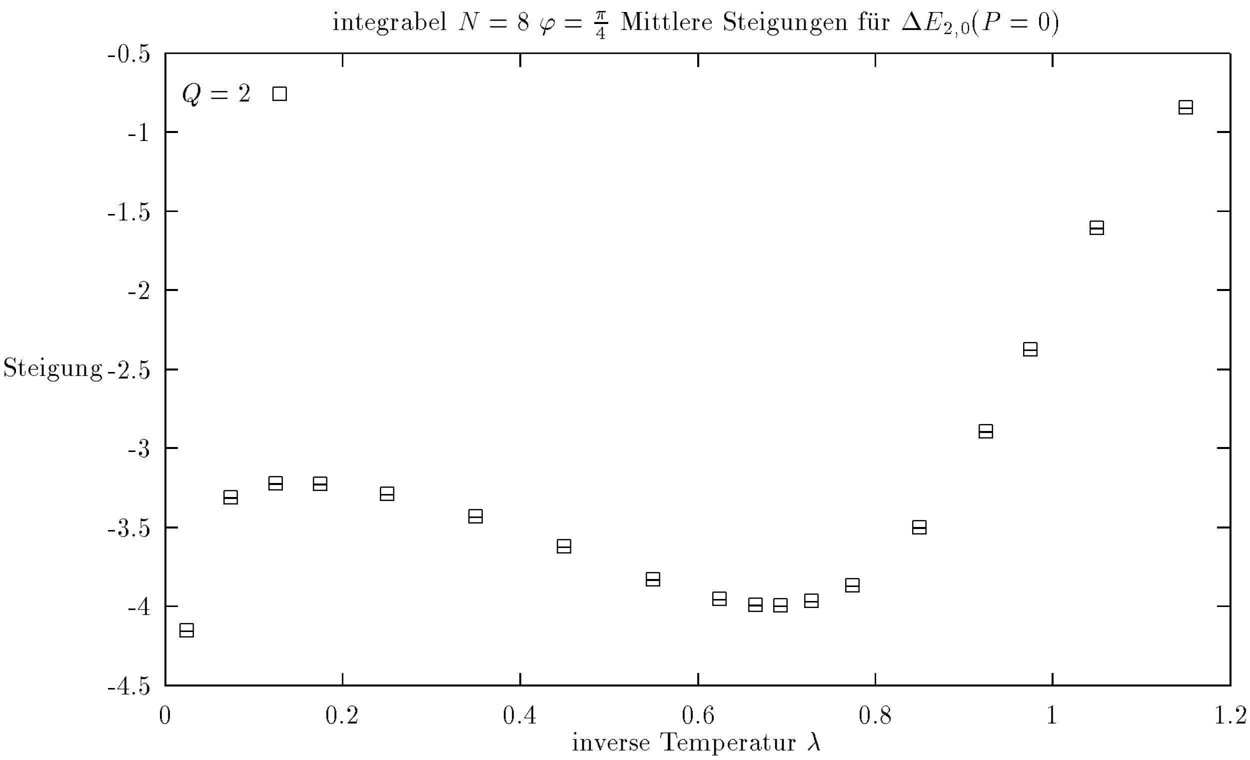

Diagramm 17: Verlauf des niedrigsten Levels bei 8 Sites im Hochtemperaturbereich für $Q = 2$

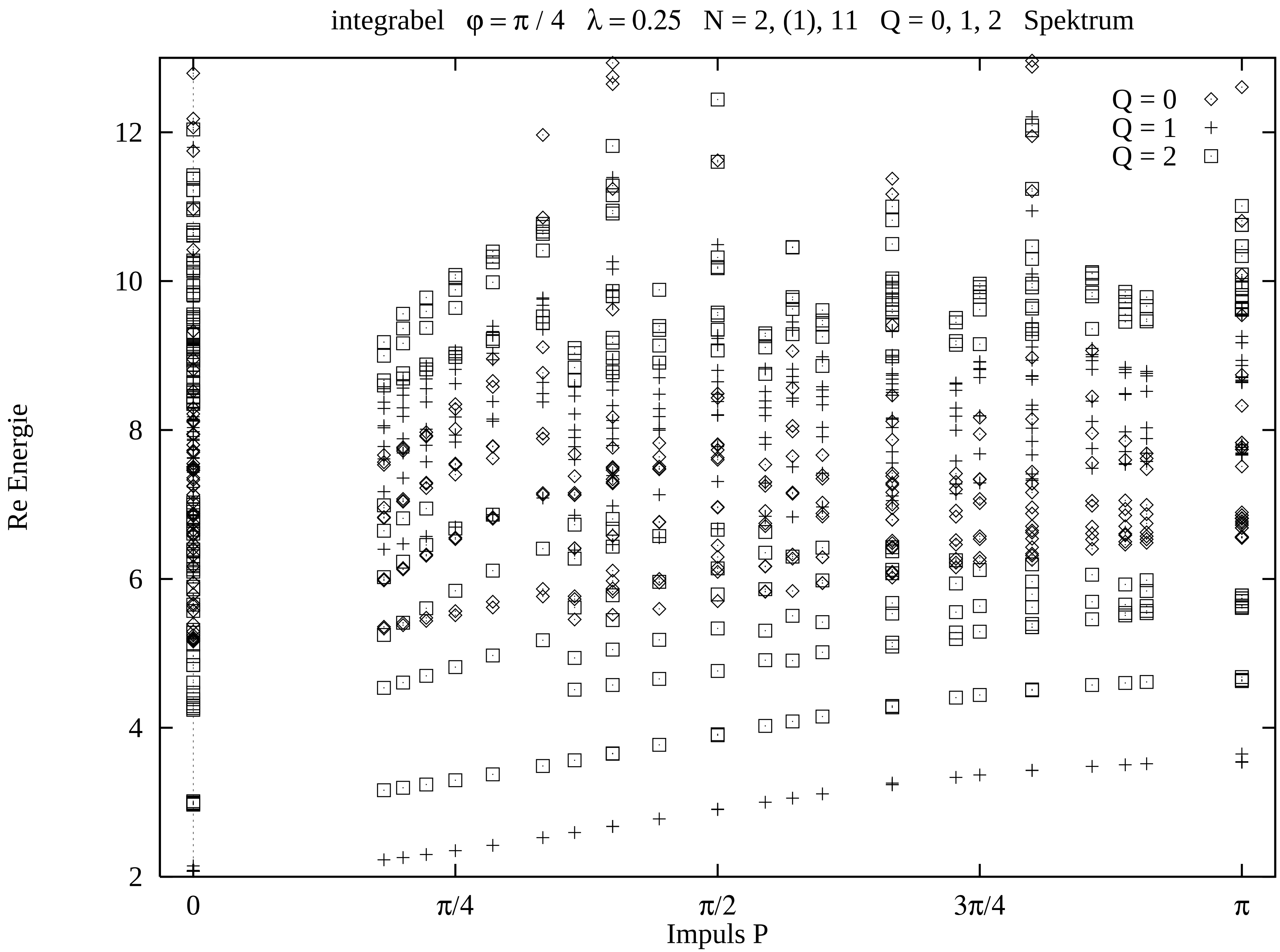

Diagramm 18: Niedrigliegendes Spektrum aller Ladungssektoren; nur Re–Teil dargestellt

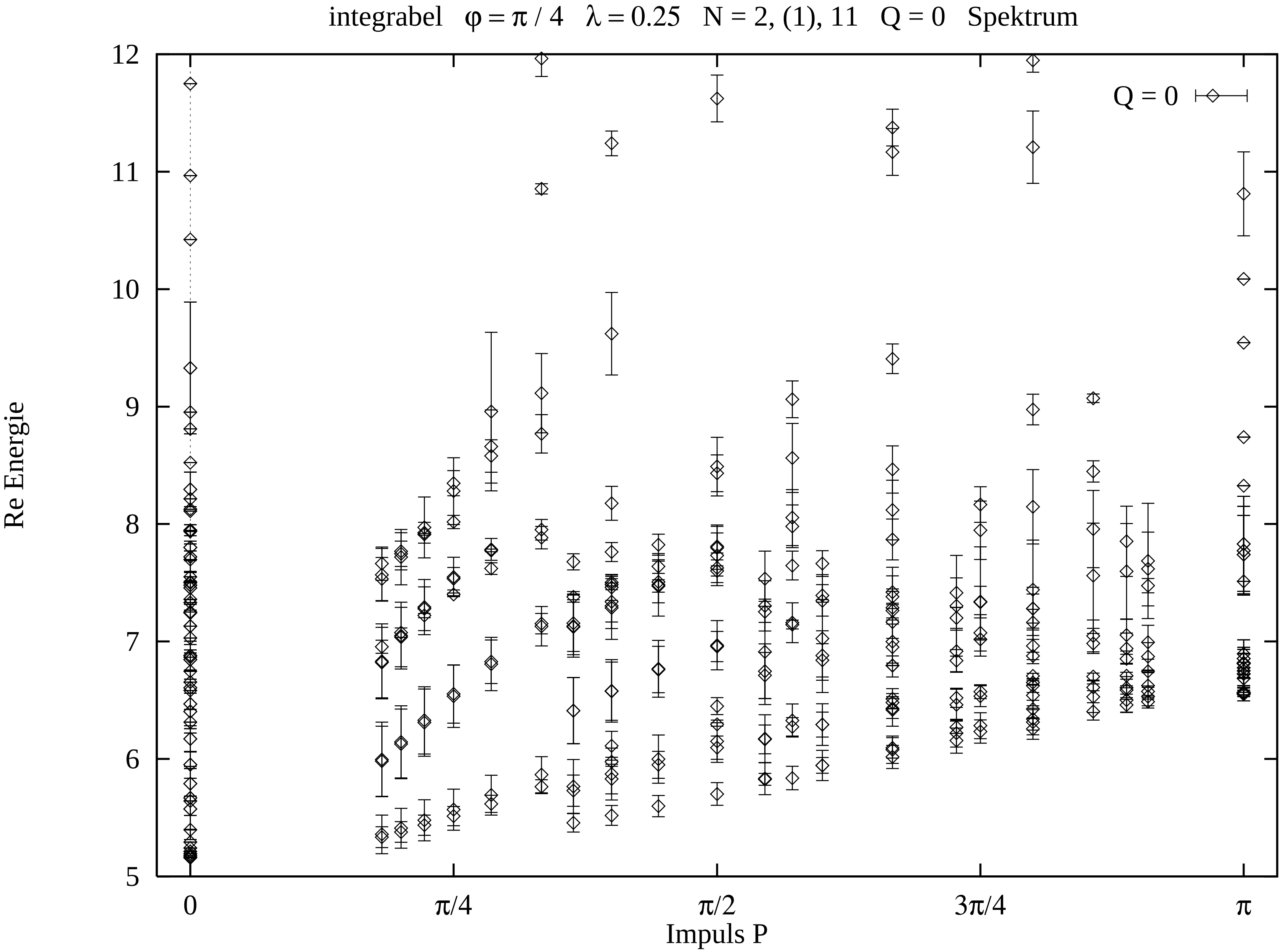

Diagramm 19: Niedrigliegendes Spektrum des $Q = 0$–Sektors; Im–Teile als Fehlerbalken

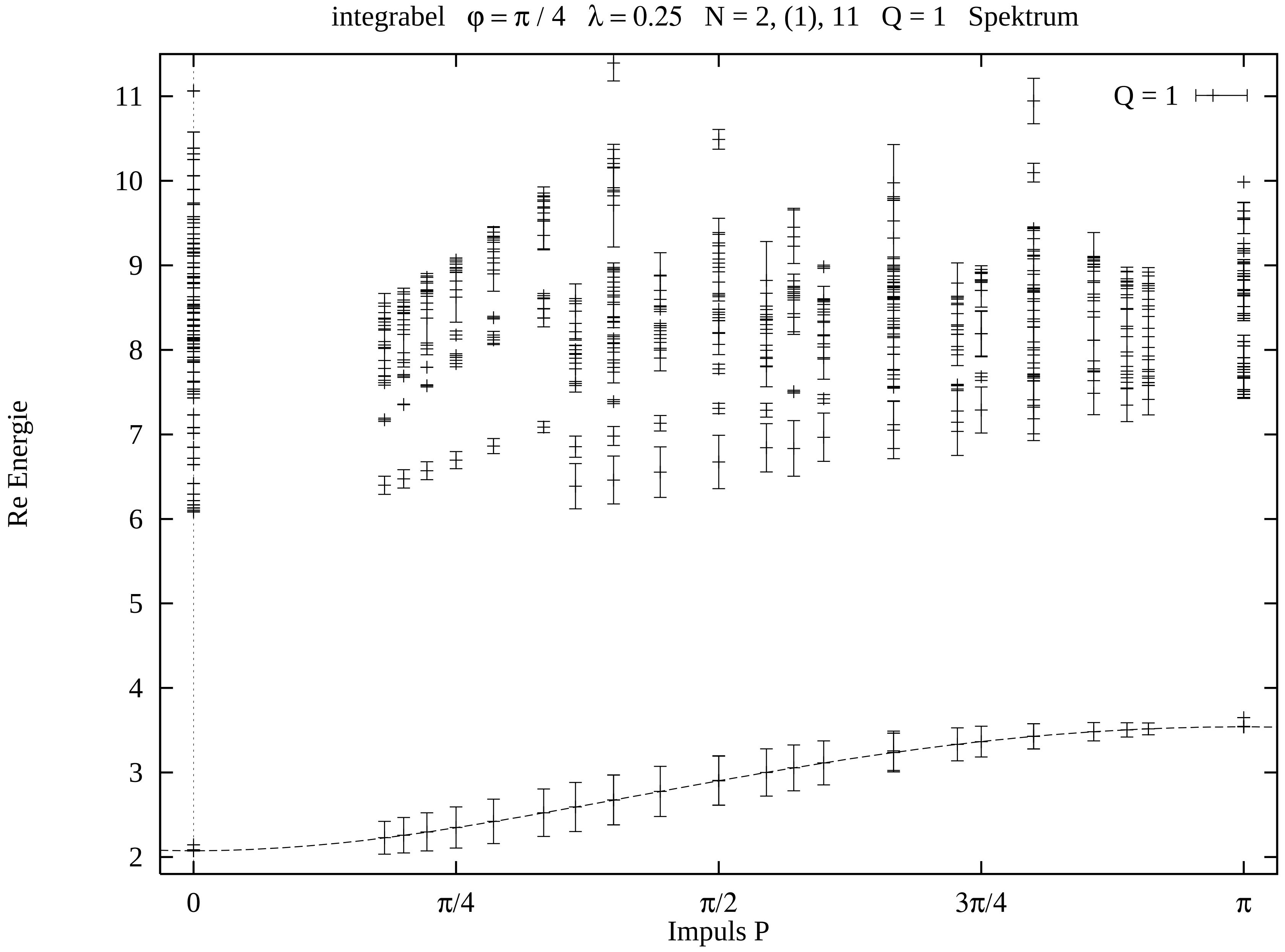

Diagramm 20: Niedrigliegendes Spektrum des $Q = 1$–Sektors; Im–Teile als Fehlerbalken

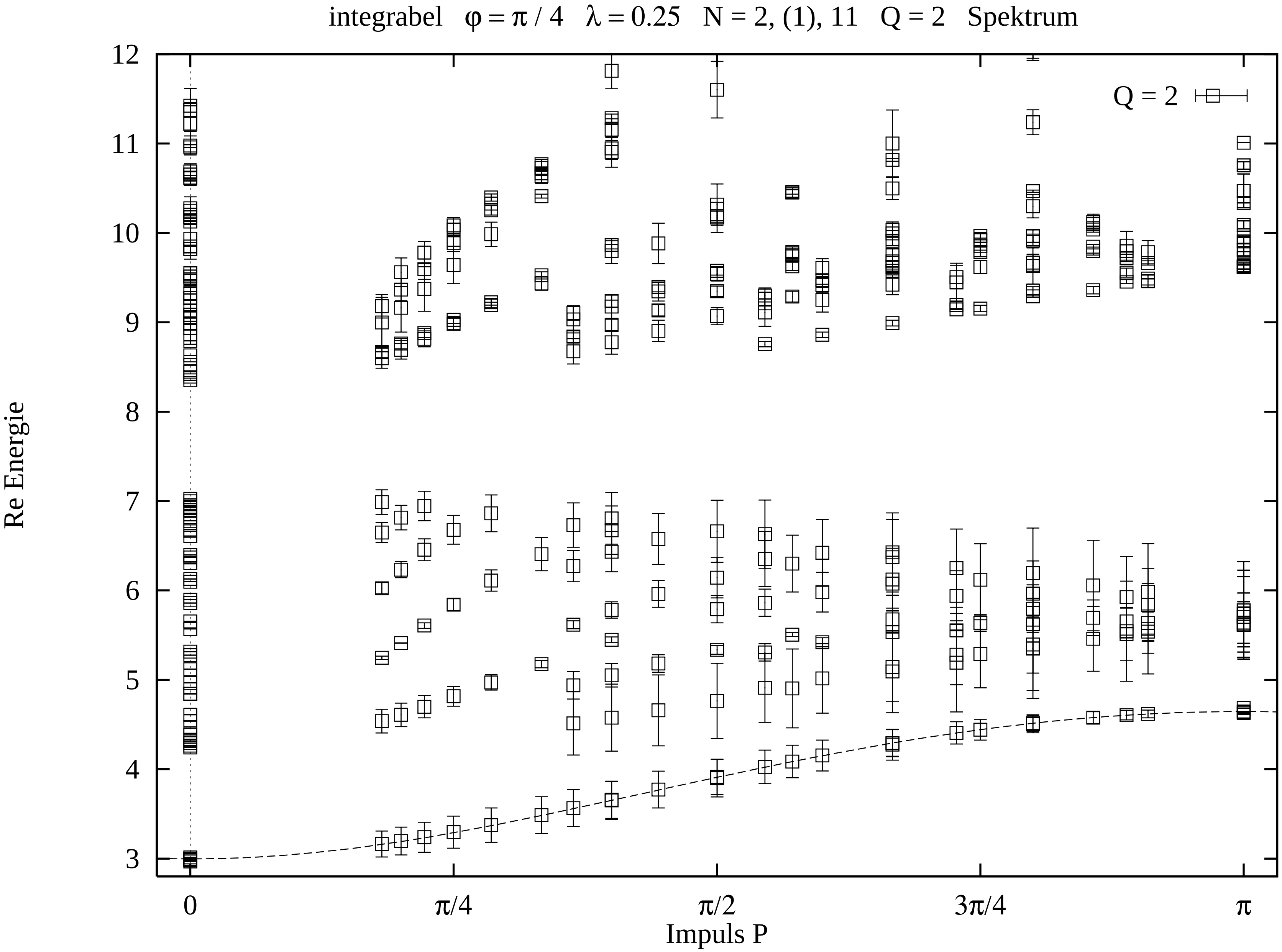

Diagramm 21: Niedrigliegendes Spektrum des $Q = 2$–Sektors; Im–Teile als Fehlerbalken

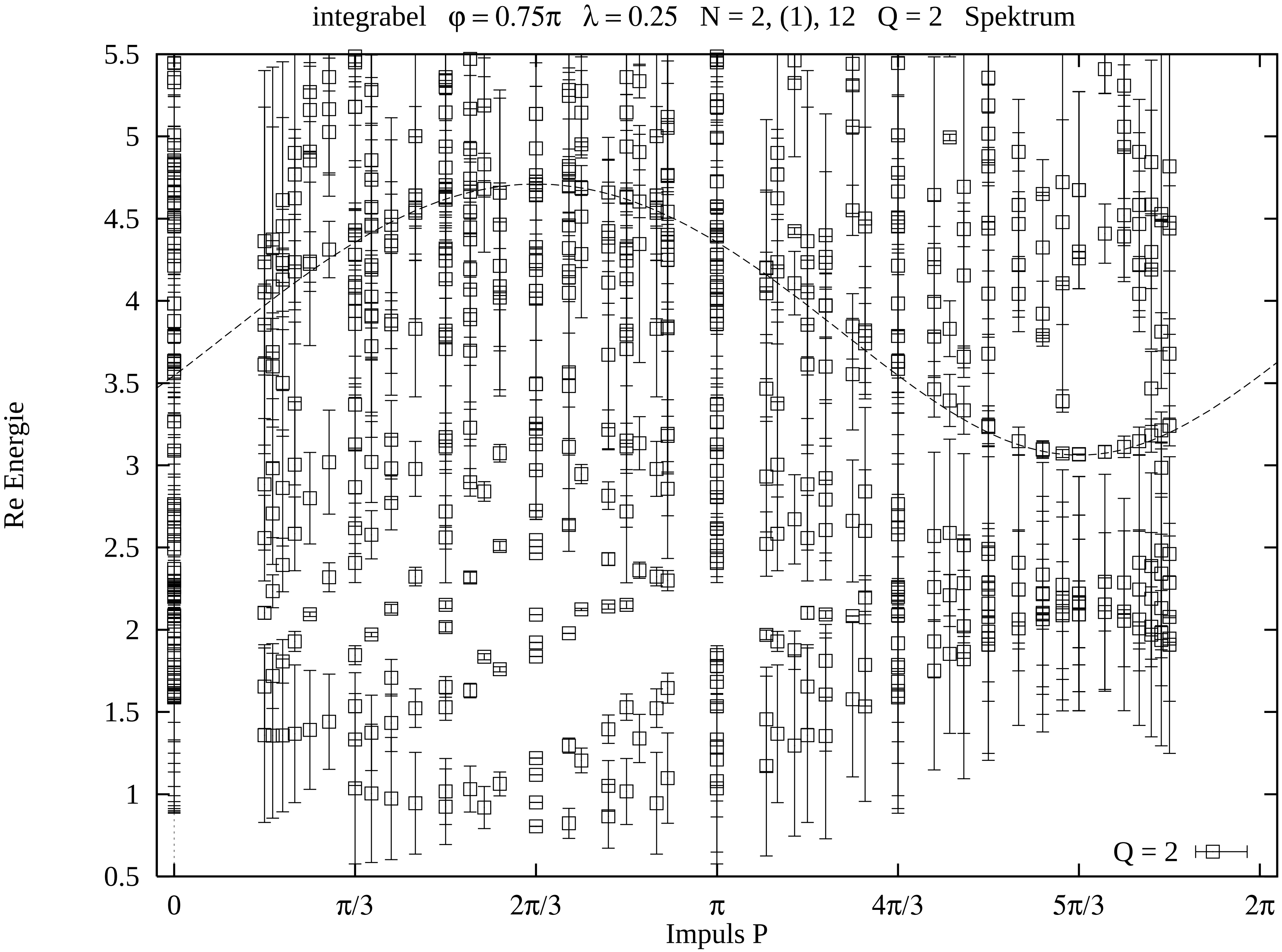

Diagramm 22: m_2–Teilchen im Kontinuumsspektrum; Im–Teile als Fehlerbalken

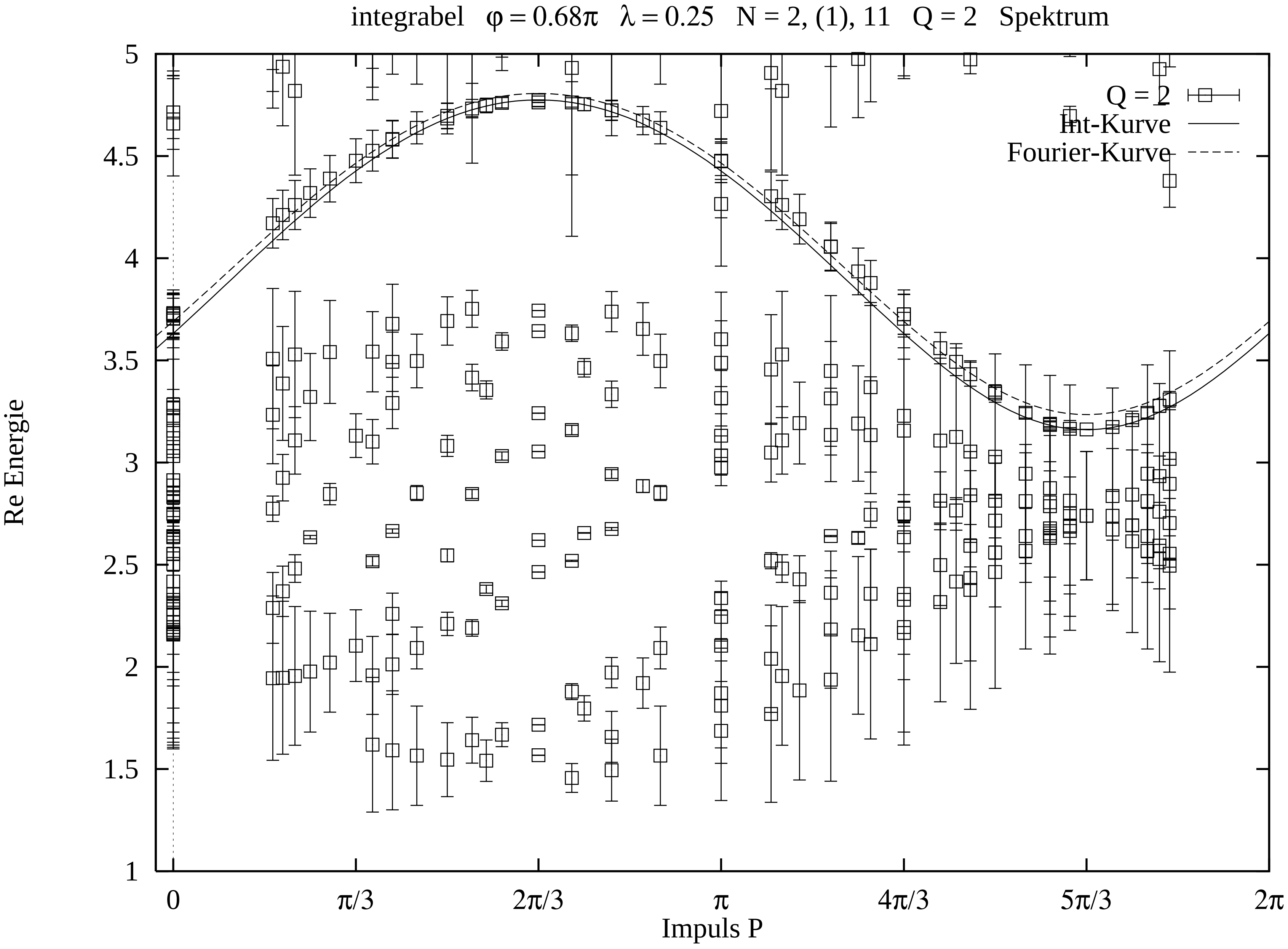

Diagramm 23: m_2–Teilchen zwischen den Streubändern; Im–Teile als Fehlerbalken

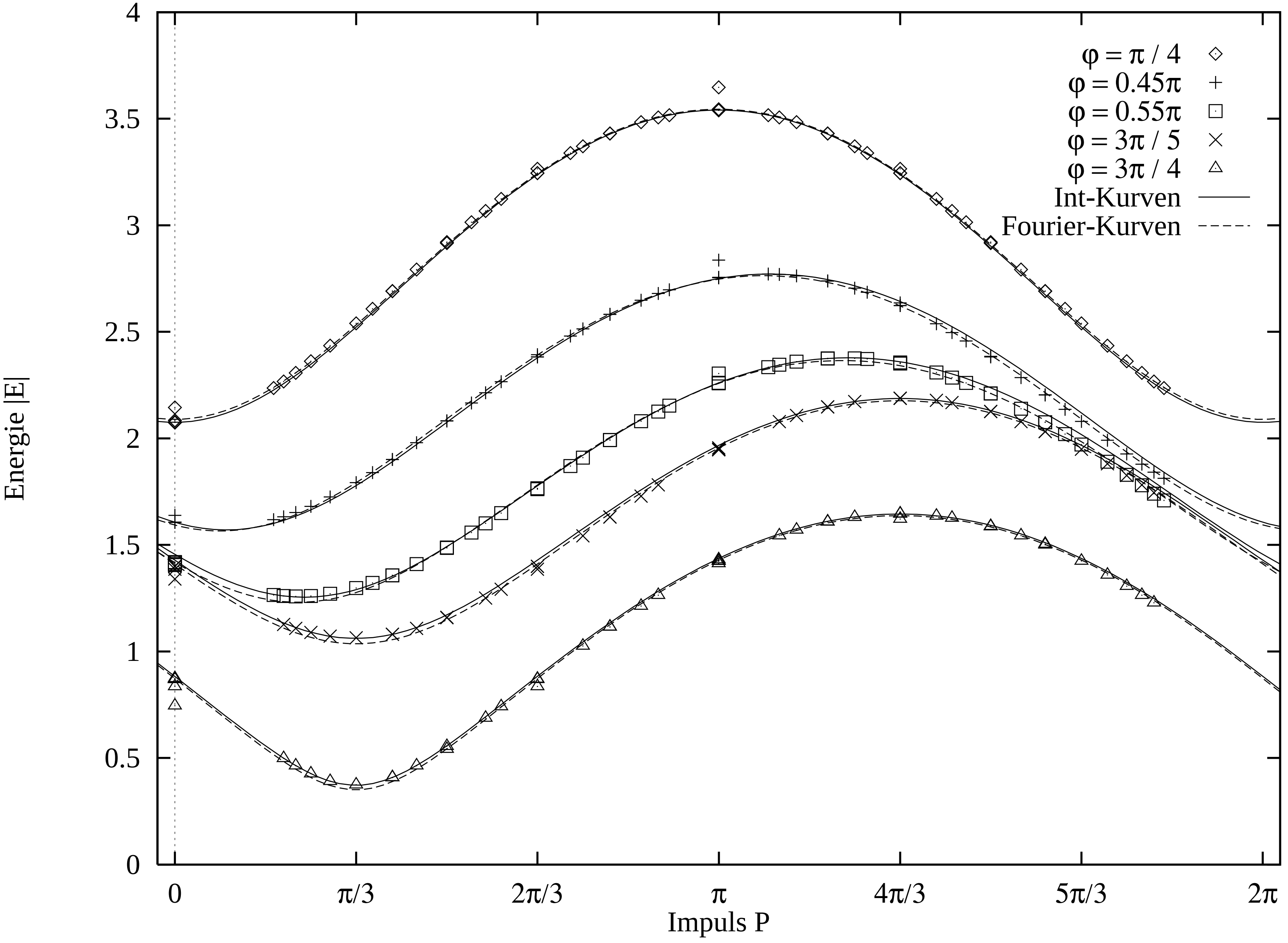

Diagramm 24: Dispersionskurven für festes $\lambda = \frac{1}{4}^{64}$ bei verschiedenen φ–Werten mit Vergleichskurven

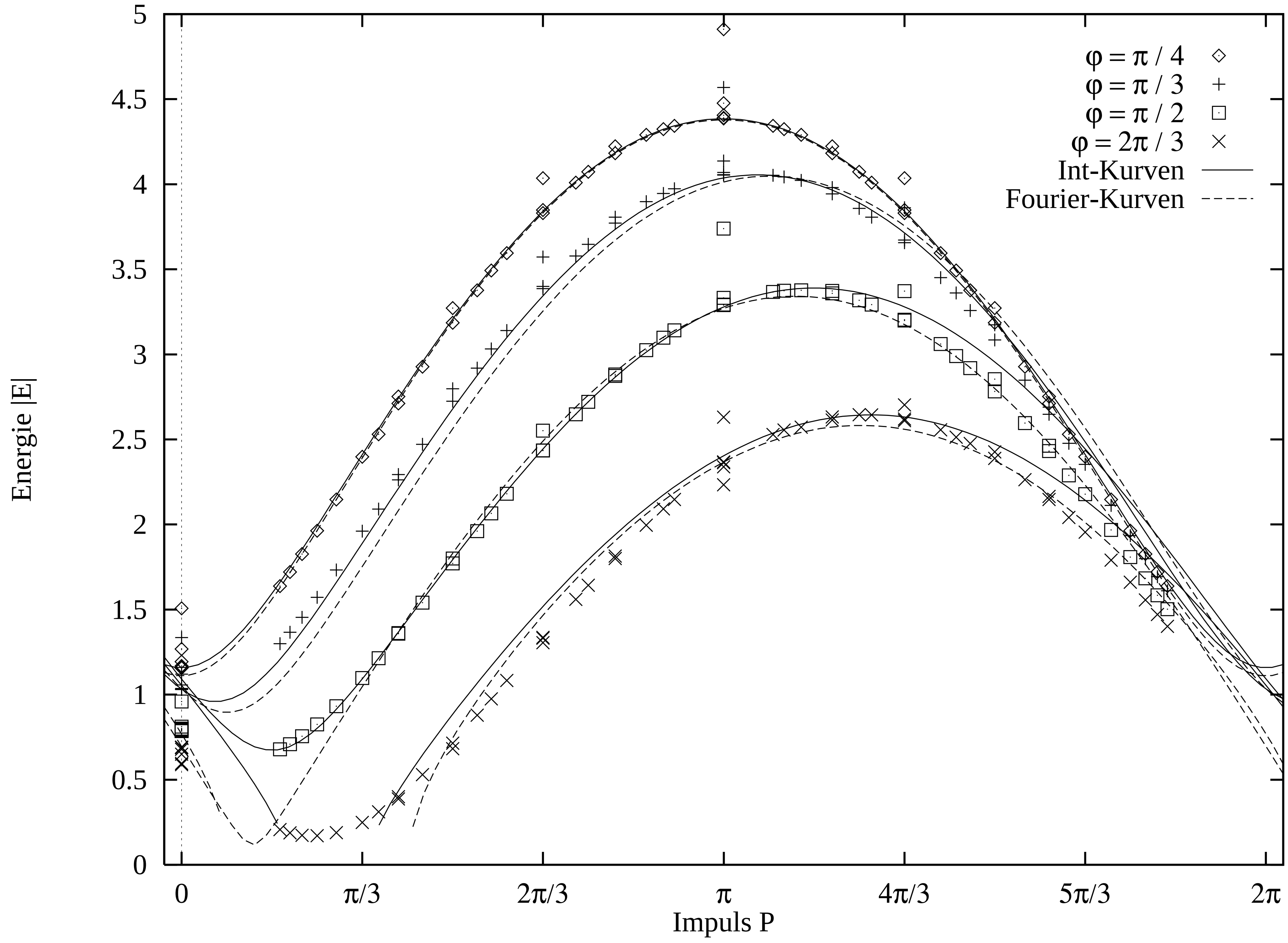

Diagramm 25: Dispersionskurven für festes $\lambda = \frac{3}{5}^{65}$ bei verschiedenen φ–Werten mit Vergleichskurven

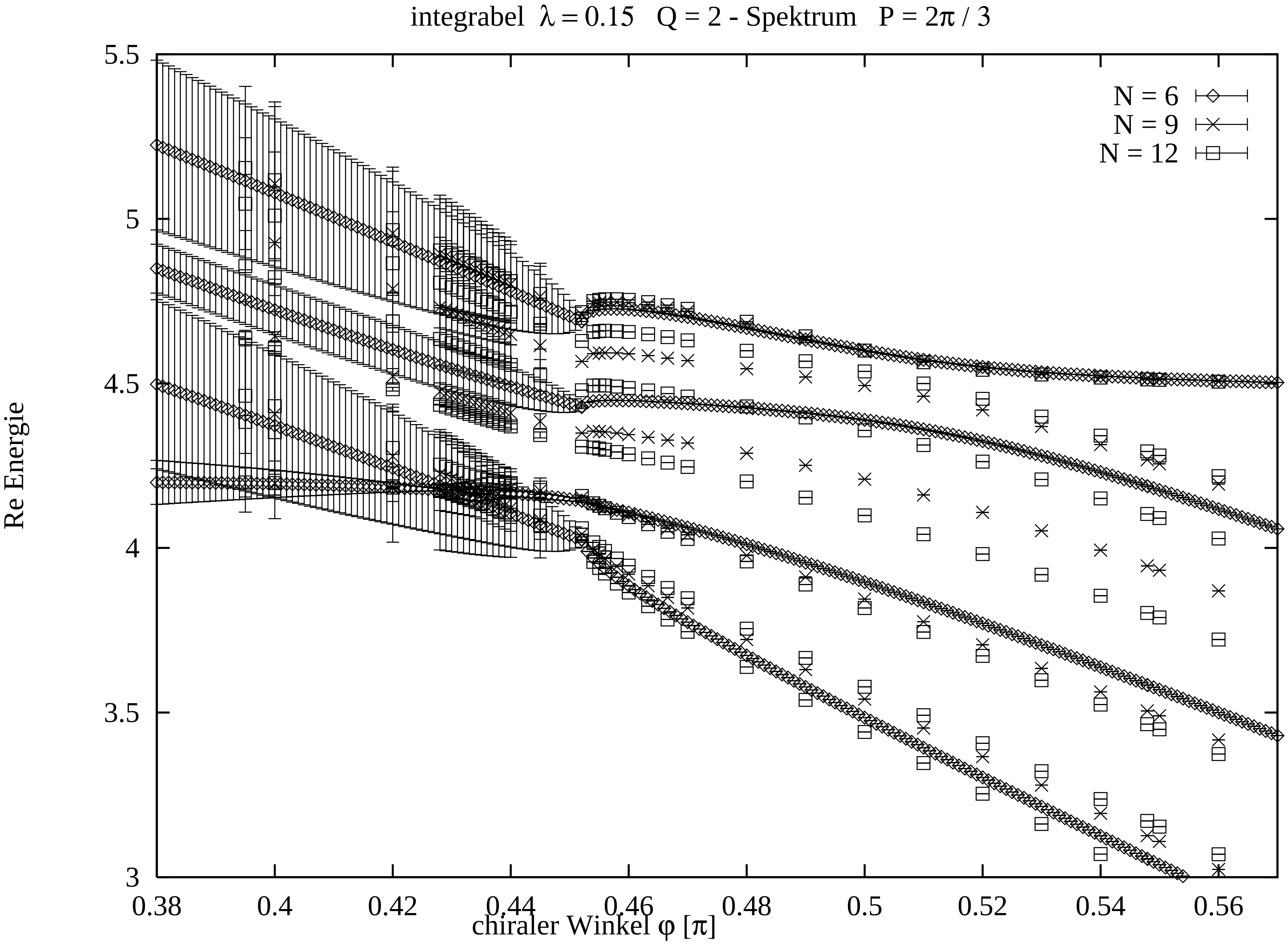

Diagramm 26: Stabile und instabile Existenzbereiche des m_2–Teilchens

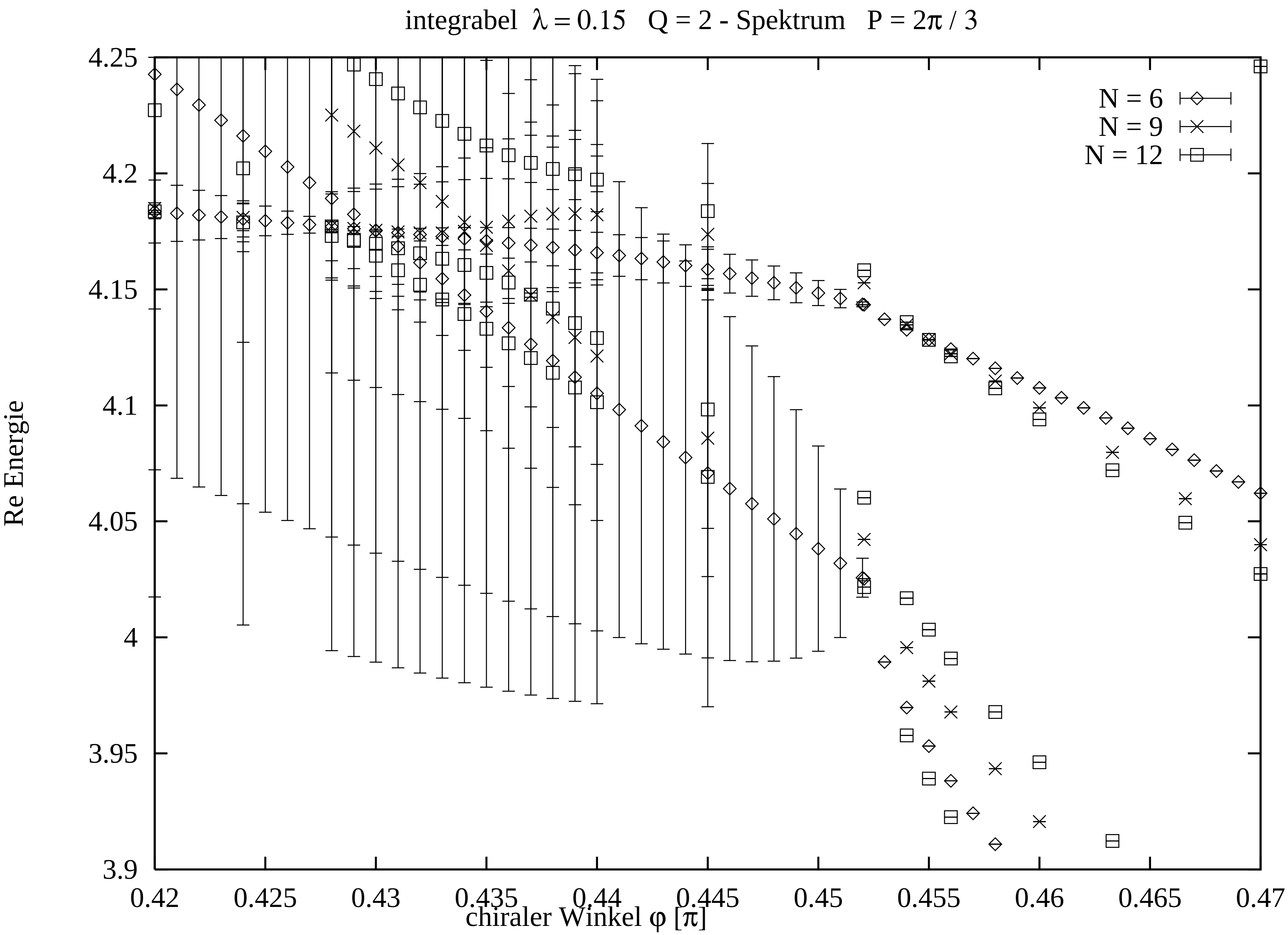

Diagramm 27: Stabile und instabile Existenzbereiche des m_2–Teilchens

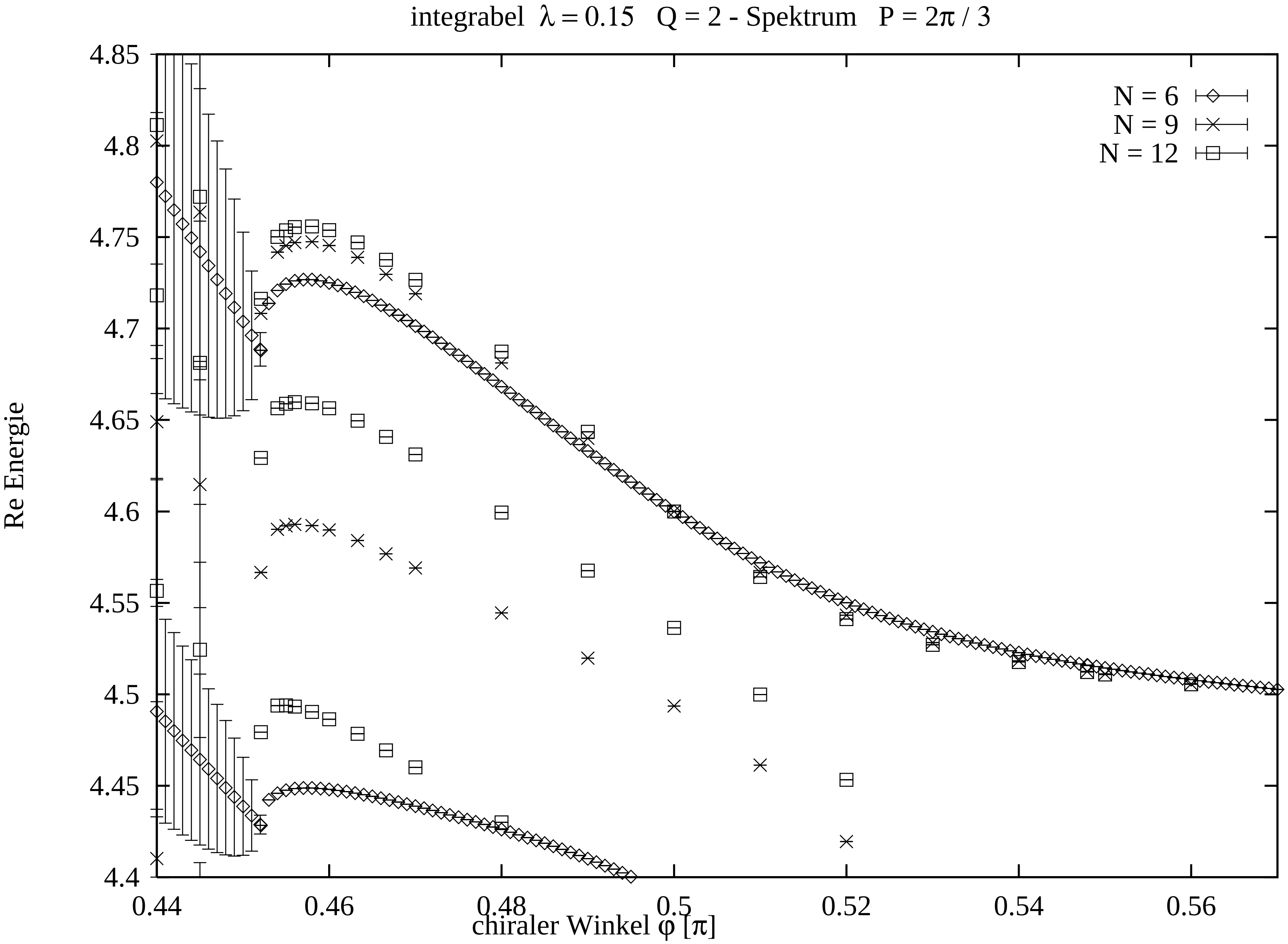

Diagramm 28: Stabile und instabile Existenzbereiche des m_2–Teilchens

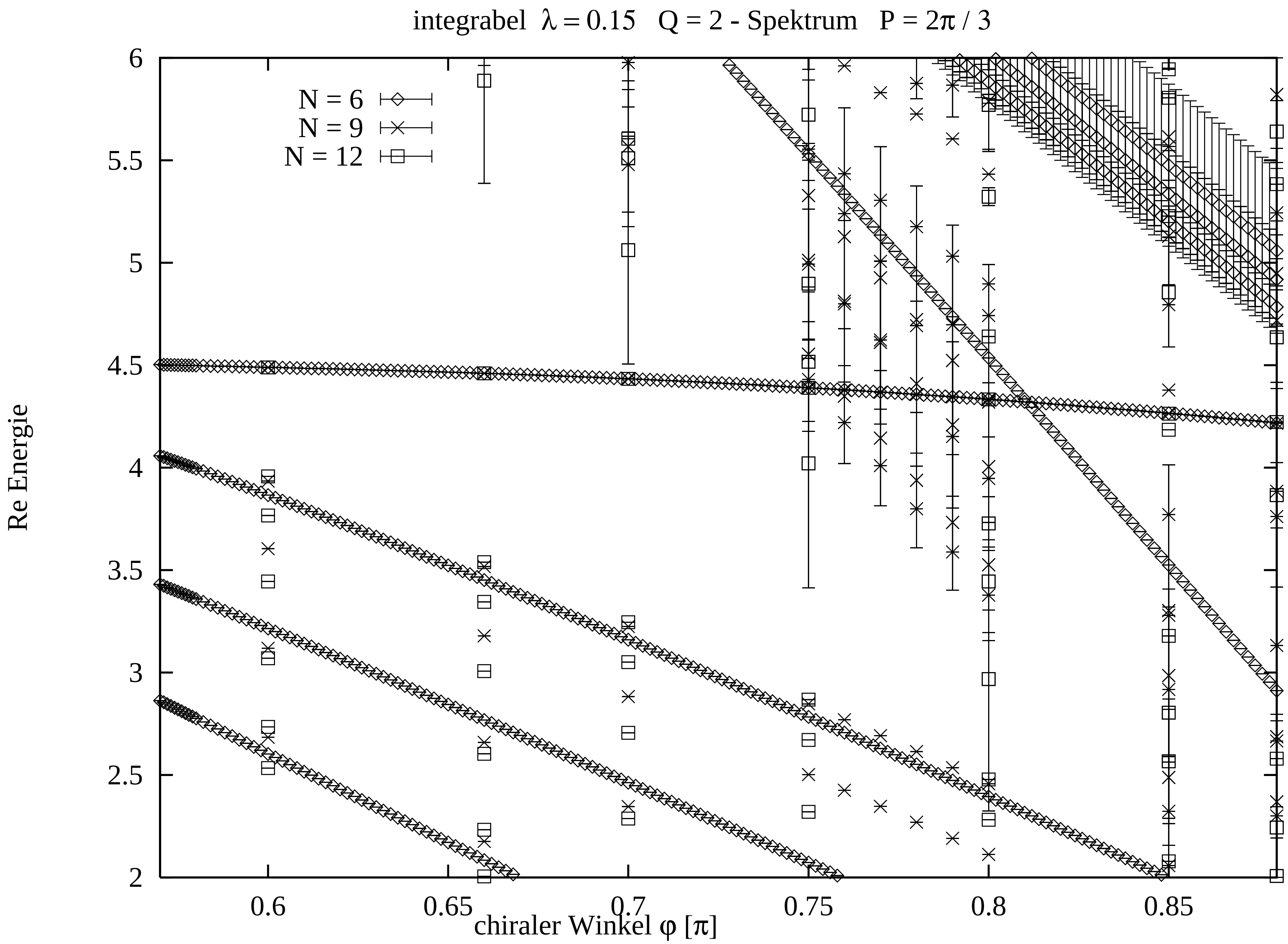

Diagramm 29: Stabile Existenzbereiche des m_2–Teilchens

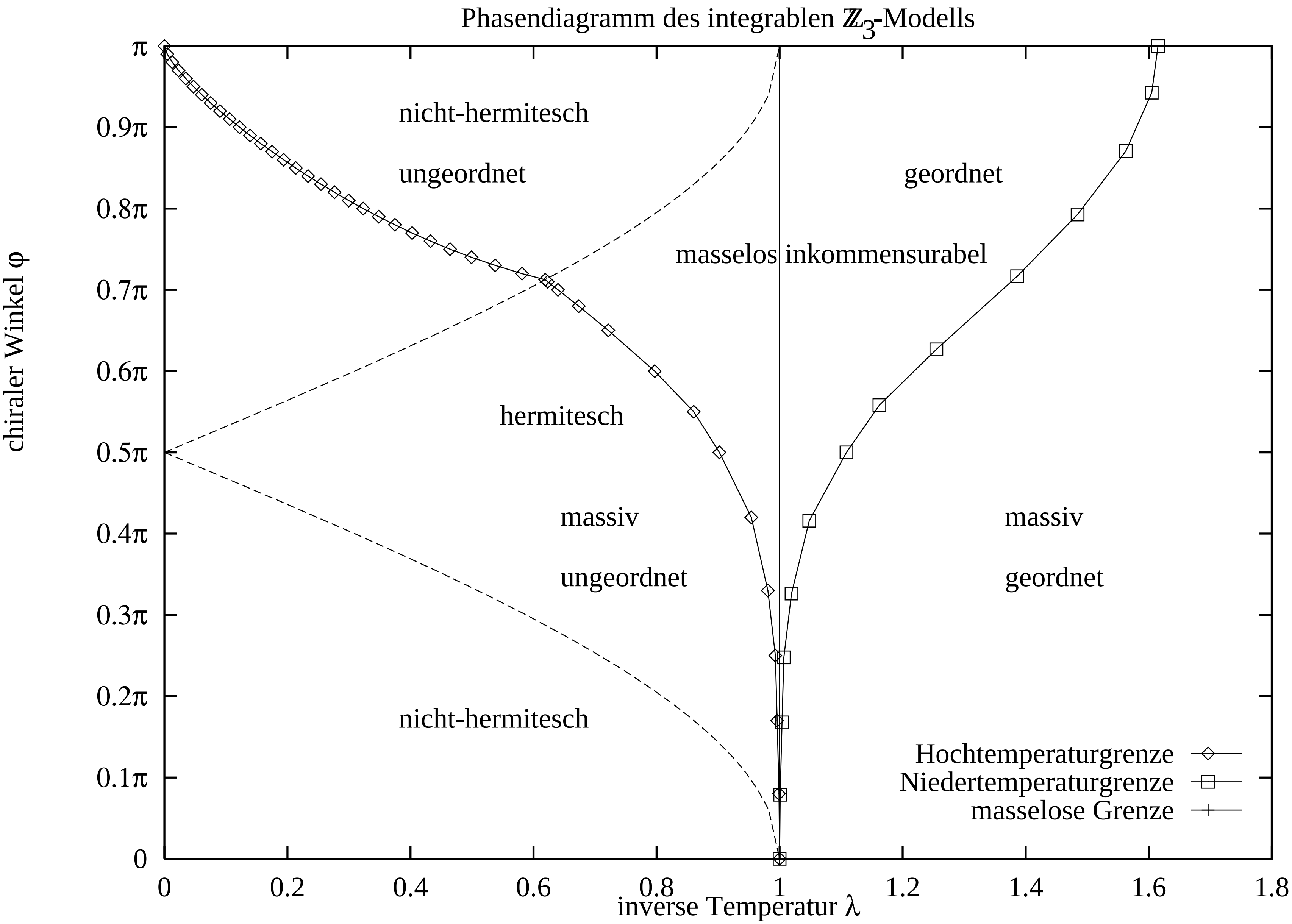

Diagramm 30: Das Phasendiagramm des integrablen $\mathbb{Z}_3$-Modells mit den vier verschiedenen Phasen

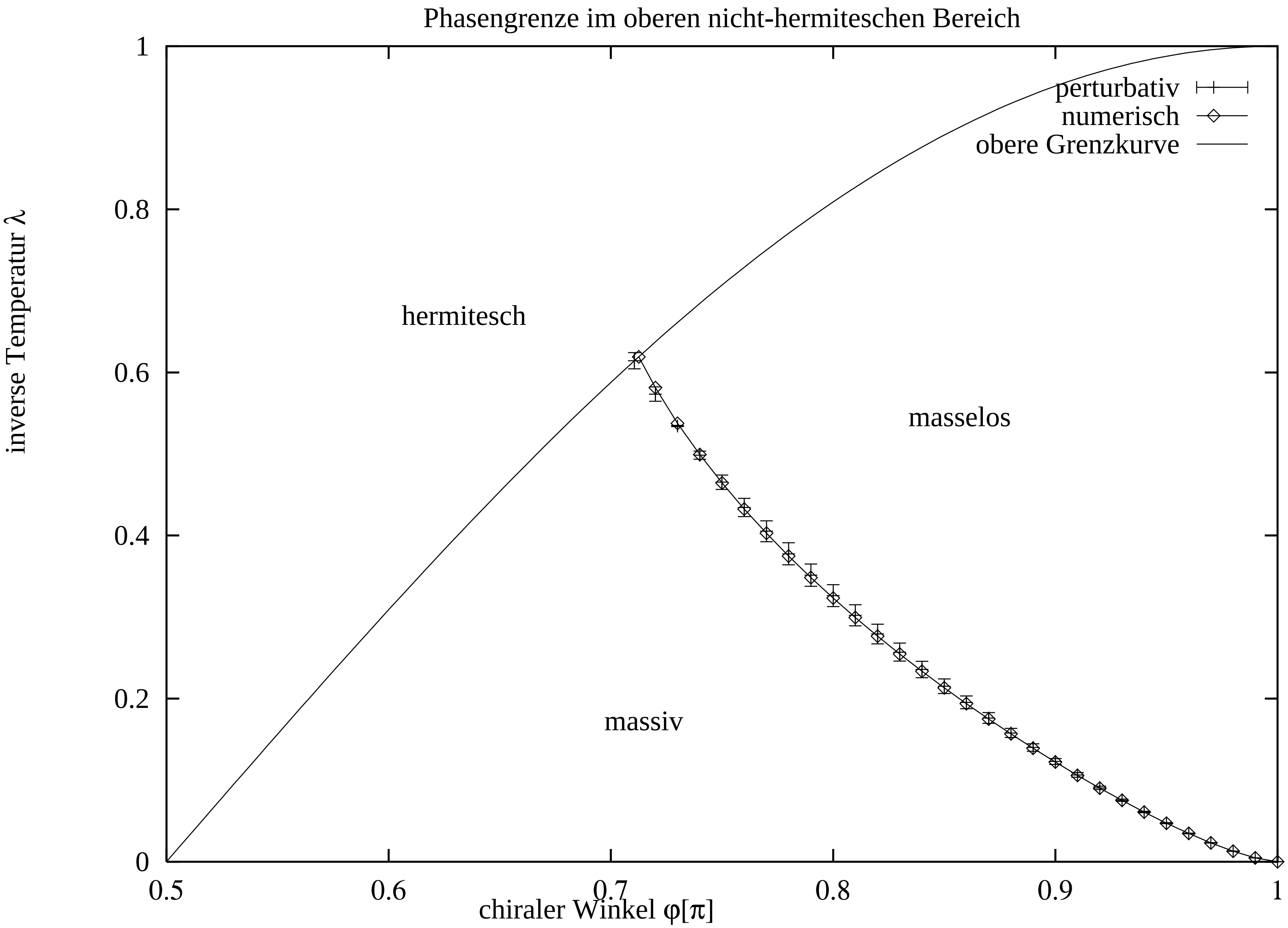

Diagramm 31: Ergebnisse von numerischer und perturbativer Rechnung im Vergleich

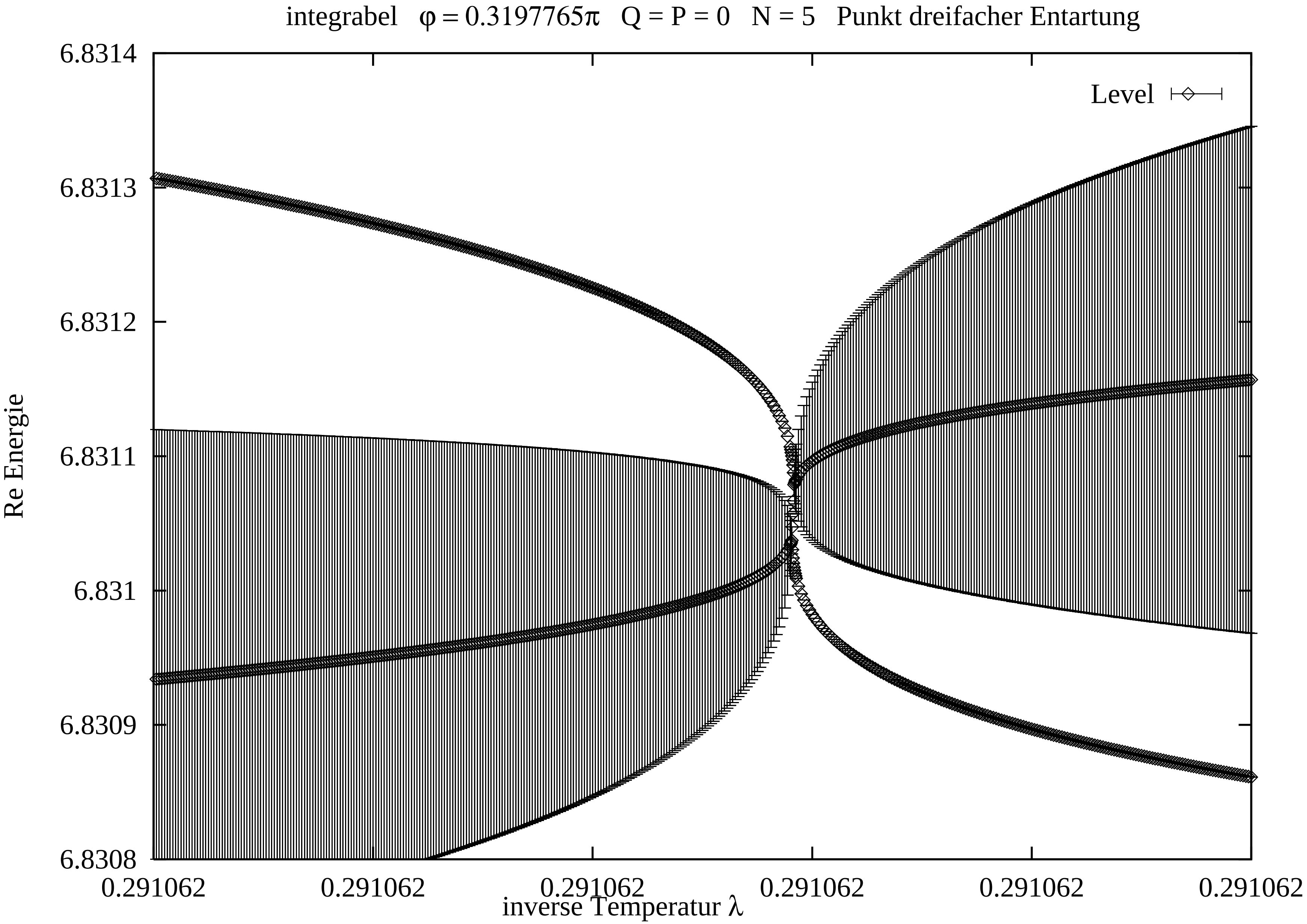

Diagramm 32: Zusammenfallen von Verzweigungspunkten des komplexen Levelpaares und Berührpunkt des reellen Levels

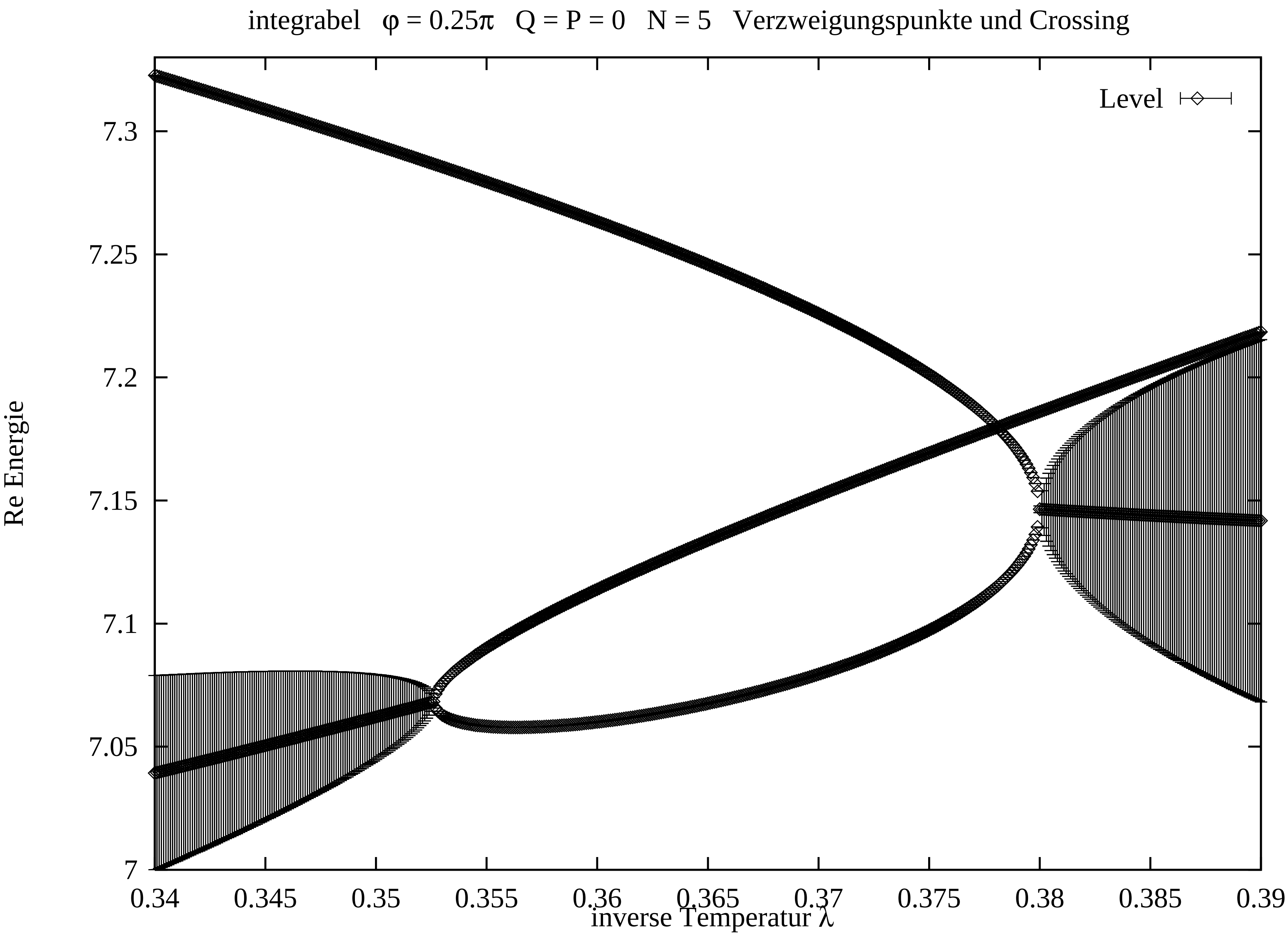

Diagramm 33: Verübergehende Auflösung des konjugiert–komplexen Paares und echtes Crossing

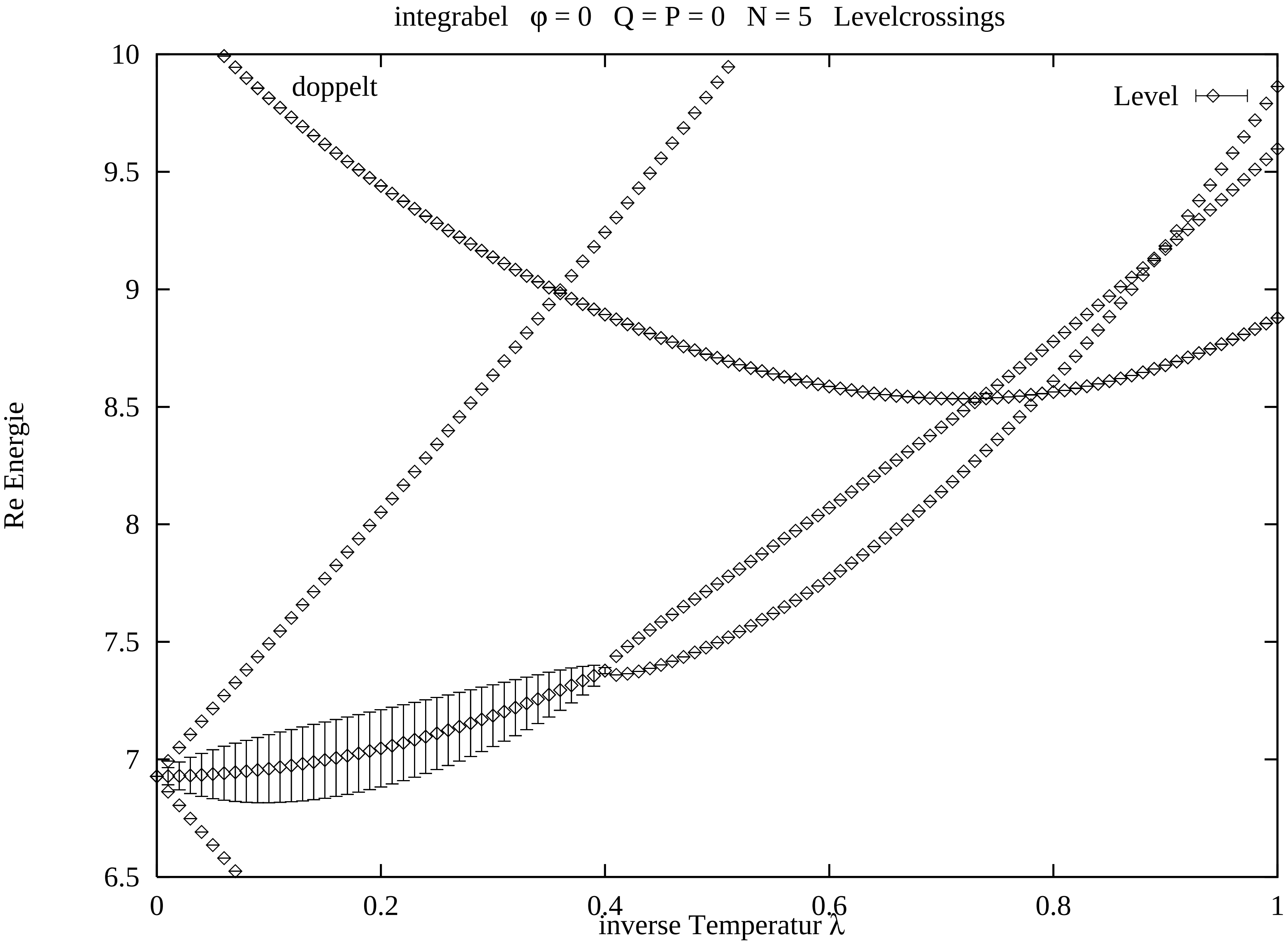

Diagramm 34: Echte Levelcrossings mit *dreifacher* Entartung (der obere *gebogene* Level ist *generisch* doppelt)

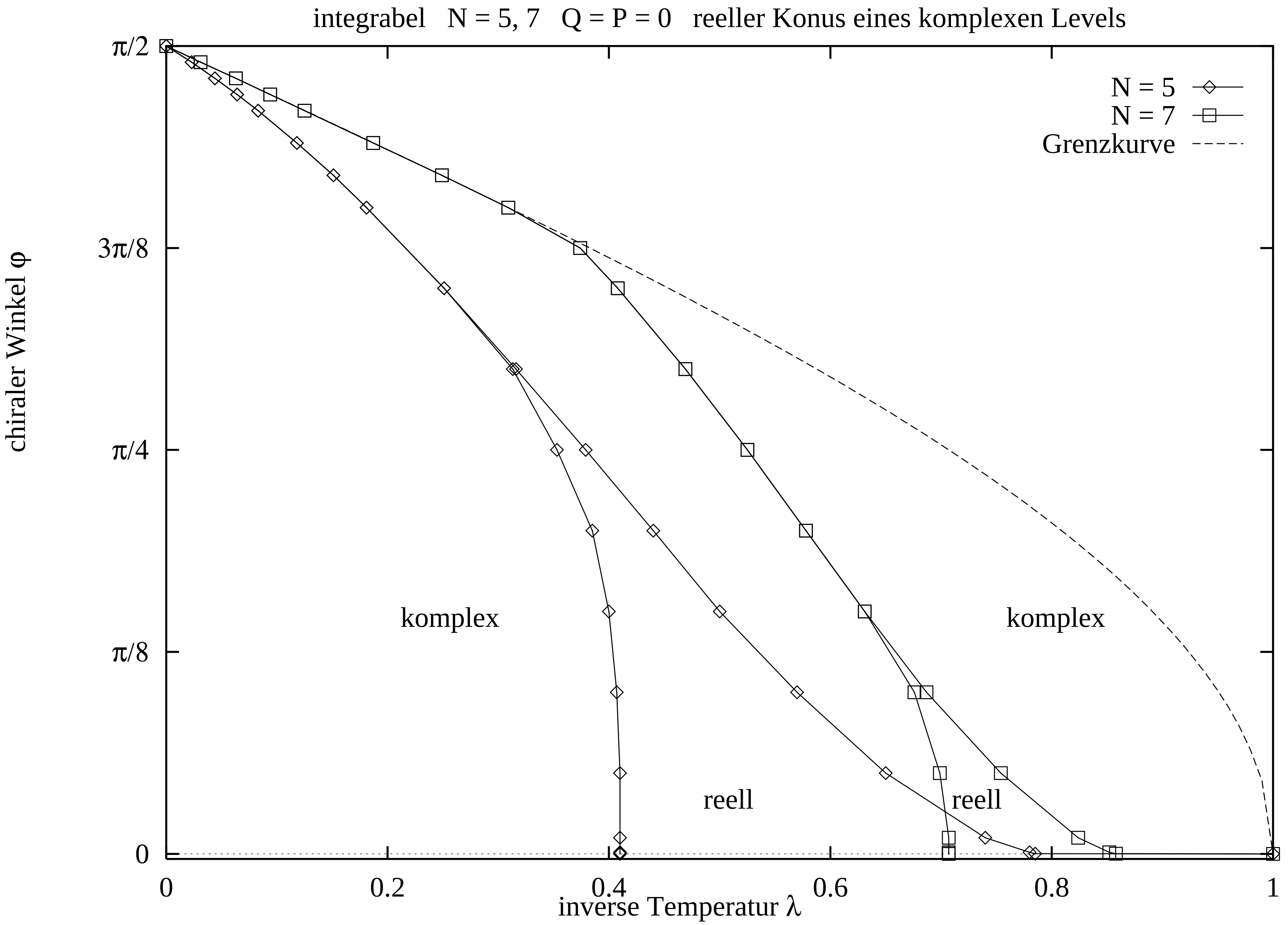

Diagramm 35: Die Fläche des reellen Konus wird mit wachsender Kettenlänge kleiner

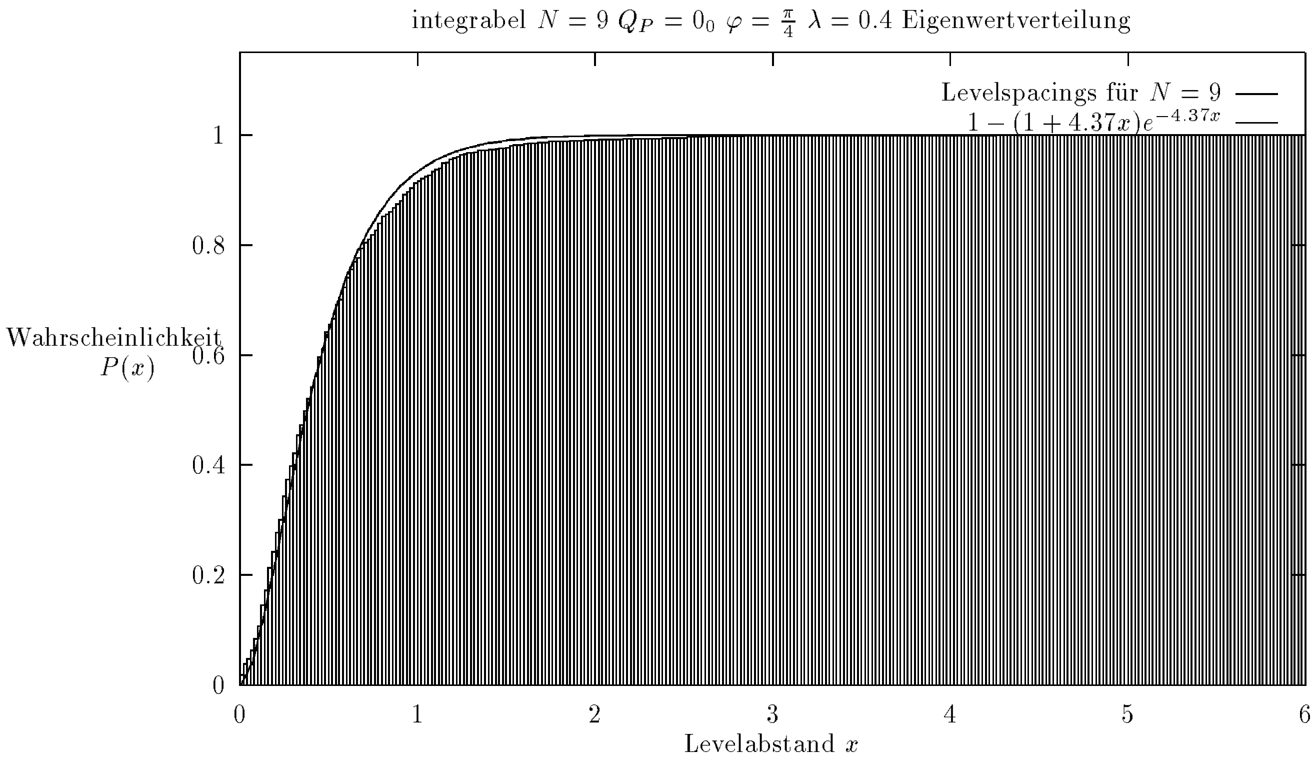

Diagramm 36: Eigenwertverteilung für eine nicht–hermitesche Matrix des integrablen $\mathbb{Z}_3$–Modells

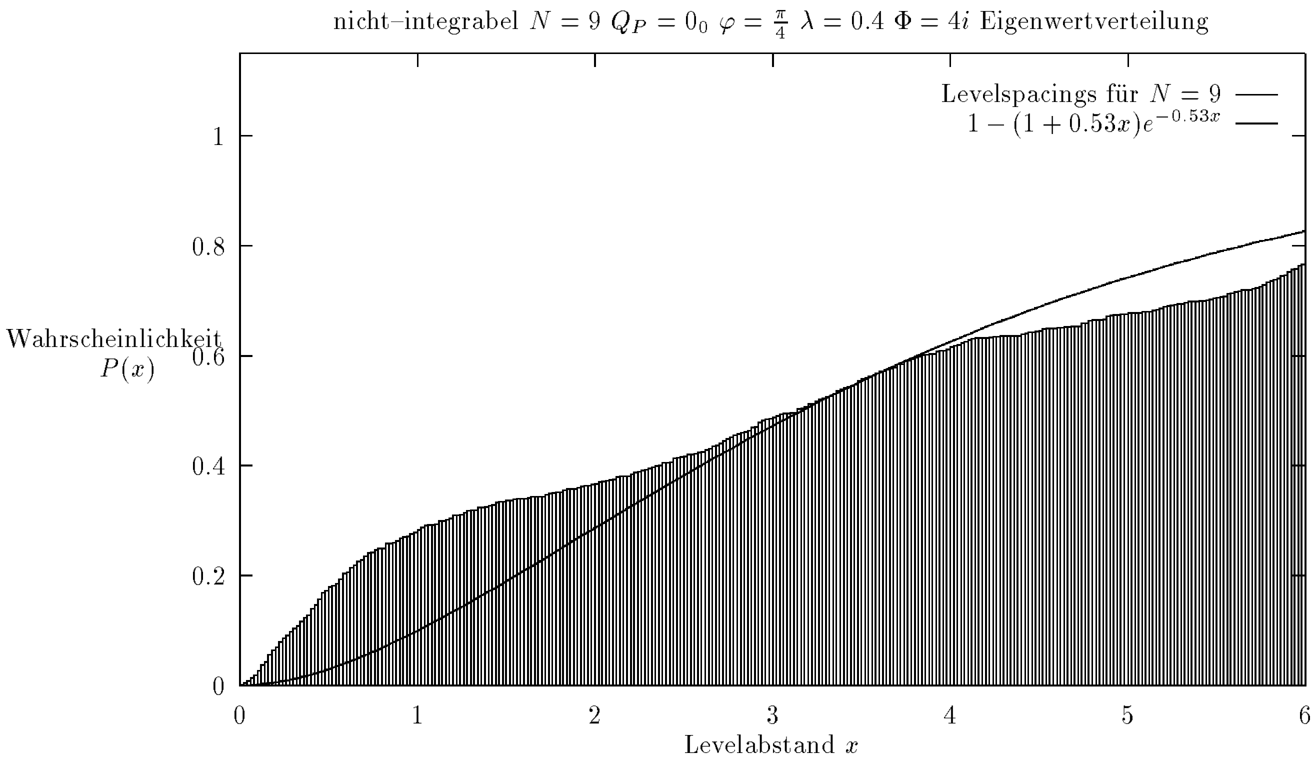

Diagramm 37: Eigenwertverteilung für eine nicht–hermitesche Matrix des nicht–integrablen $\mathbb{Z}_3$–Modells

C Mathematischer Anhang

C.1 Nicht–Normalität des Hamilton–Operators

Satz 2 *[81]*
Eine $(M \times M)$–Matrix A ist genau dann normal, wenn es eine unitäre Matrix U gibt mit

$$U^{-1}AU = U^H AU = \begin{pmatrix} \mu_1 & & \\ & \ddots & \\ & & \mu_M \end{pmatrix}.$$

Normale Matrizen sind diagonalisierbar und besitzen M linear unabhängige zueinander orthogonale Eigenvektoren $x_j, j = 1,(1),M$, $Ax_j = \mu_j x_j$, nämlich die Spalten der Matrix $U = [x_1, \ldots, x_M]$.

Satz 3 *[36]*
Jeder lineare Operator $\mathcal{A}$ kann in der Form

$$\mathcal{A} = \mathcal{A}_1 + i\mathcal{A}_2$$

dargestellt werden; dabei sind $\mathcal{A}_1$ und $\mathcal{A}_2$ hermitesche (die "hermiteschen Komponenten" des Operators $\mathcal{A}$) Operatoren. Sie sind durch Vorgabe von $\mathcal{A}$ eindeutig bestimmt.
Der Operator $\mathcal{A}$ ist genau dann normal, wenn seine hermiteschen Komponenten $\mathcal{A}_1$ und $\mathcal{A}_2$ kommutieren :

$$\mathcal{A} \text{ normal} \quad \Longleftrightarrow \quad [\mathcal{A}_1, \mathcal{A}_2] = \mathbf{0}$$

Die hermiteschen Komponenten sind dabei wie folgt definiert :

$$\mathcal{A}_1 = \frac{1}{2}(\mathcal{A} + \mathcal{A}^*) \qquad \mathcal{A}_2 = \frac{1}{2i}(\mathcal{A} - \mathcal{A}^*)$$

Der Hamilton–Operator (16) ist darstellbar in der Form (mit $\mathcal{D}_j$ aus (21))

$$\mathcal{H} = -\frac{2}{\sqrt{3}} \sum_{j=1}^{N} \left(\frac{1}{2} (\mathcal{D}_j + \mathcal{D}_{j+1}) + \lambda \left(\mathcal{H}_j^{WW} \right) \right) \tag{69}$$

wobei $\sigma_{N+1} := \sigma_1$ ist.

Um den Kommutator $[\mathcal{H}_{j,1}, \mathcal{H}_{j,2}]$ auszurechnen, genügt es, einen Summanden zu betrachten.

$$\begin{aligned}
\mathcal{H}_{j,1} &= -\frac{2}{\sqrt{3}}\frac{1}{2}\left(\mathcal{D}_j + \mathcal{D}_{j+1} + \lambda\left(\mathcal{H}_j^{WW} + \mathcal{H}_j^{WW\,\dagger}\right)\right) \\
&= -\frac{1}{\sqrt{3}}\left(\mathcal{D}_j + \mathcal{D}_{j+1} + \lambda\left(\left(e^{-i\frac{x}{3}}e^{\frac{y}{3}}\Gamma_j\Gamma_{j+1}^\dagger + e^{i\frac{x}{3}}e^{-\frac{y}{3}}\Gamma_j^\dagger\Gamma_{j+1}\right) + \left(e^{i\frac{x}{3}}e^{\frac{y}{3}}\Gamma_j^\dagger\Gamma_{j+1} + e^{-i\frac{x}{3}}e^{-\frac{y}{3}}\Gamma_j\Gamma_{j+1}^\dagger\right)\right)\right) \\
&= -\frac{1}{\sqrt{3}}\left(\mathcal{D}_j + \mathcal{D}_{j+1} + \lambda\left(\Gamma_j\Gamma_{j+1}^\dagger e^{-i\frac{x}{3}}\left(e^{\frac{y}{3}} + e^{-\frac{y}{3}}\right) + \Gamma_j^\dagger\Gamma_{j+1}e^{i\frac{x}{3}}\left(e^{-\frac{y}{3}} + e^{\frac{y}{3}}\right)\right)\right) \\
&= -\frac{1}{\sqrt{3}}\left(\mathcal{D}_j + \mathcal{D}_{j+1} + 2\left(\underbrace{\frac{e^{\frac{y}{3}} + e^{-\frac{y}{3}}}{2}}_{=\cosh\left(\frac{y}{3}\right)}\right)\lambda\left(e^{-i\frac{x}{3}}\Gamma_j\Gamma_{j+1}^\dagger + e^{i\frac{x}{3}}\Gamma_j^\dagger\Gamma_{j+1}\right)\right)
\end{aligned} \tag{70}$$

$$
\begin{aligned}
\mathcal{H}_{j,2} &= -\frac{2}{\sqrt{3}}\frac{1}{2i}\left(\lambda\left(\mathcal{H}_j^{WW}-\mathcal{H}_j^{WW\dagger}\right)\right)\\
&= -\frac{2\lambda}{\sqrt{3}}\frac{1}{2i}\left(\left(e^{-i\frac{x}{3}}e^{\frac{y}{3}}\Gamma_j\Gamma_{j+1}^\dagger+e^{i\frac{x}{3}}e^{-\frac{y}{3}}\Gamma_j^\dagger\Gamma_{j+1}\right)-\left(e^{i\frac{x}{3}}e^{\frac{y}{3}}\Gamma_j^\dagger\Gamma_{j+1}+e^{-i\frac{x}{3}}e^{-\frac{y}{3}}\Gamma_j\Gamma_{j+1}^\dagger\right)\right)\\
&= -\frac{2\lambda}{\sqrt{3}}\frac{1}{2i}\left(\Gamma_j\Gamma_{j+1}^\dagger e^{-i\frac{x}{3}}\left(e^{\frac{y}{3}}-e^{-\frac{y}{3}}\right)-\Gamma_j^\dagger\Gamma_{j+1}e^{i\frac{x}{3}}\left(e^{\frac{y}{3}}-e^{-\frac{y}{3}}\right)\right)\\
&= -\frac{2\lambda}{\sqrt{3}}\frac{1}{i}\underbrace{\frac{e^{\frac{y}{3}}-e^{-\frac{y}{3}}}{2}}_{=\sinh\left(\frac{y}{3}\right)}\left(e^{-i\frac{x}{3}}\Gamma_j\Gamma_{j+1}^\dagger-e^{i\frac{x}{3}}\Gamma_j^\dagger\Gamma_{j+1}\right) \qquad (71)
\end{aligned}
$$

Man beachte an dieser Stelle :
falls $\mathcal{H}$ *hermitesch* (d. h. $\mathrm{Im}\Phi = y = 0$) ist, so ist $\mathcal{H}_{j,2}\equiv\mathbf{0}$ und der folgende Kommutator verschwindet trivial.
Sei im Folgenden $y\neq 0 \quad\Rightarrow\quad \sinh\neq 0\,(<\cosh)$.

$$
\begin{aligned}
[\mathcal{H}_{j,1},\mathcal{H}_{j,2}] &= \frac{4}{3}\left[\frac{1}{2}\left(\mathcal{D}_j+\mathcal{D}_{j+1}+\lambda\left(\mathcal{H}_j^{WW}+\mathcal{H}_j^{WW\dagger}\right)\right),\frac{\lambda}{2i}\left(\mathcal{H}_j^{WW}-\mathcal{H}_j^{WW\dagger}\right)\right]\\
&= \frac{4}{3}\left(\frac{\lambda}{4i}\underbrace{\left[\mathcal{D}_j+\mathcal{D}_{j+1},\mathcal{H}_j^{WW}-\mathcal{H}_j^{WW\dagger}\right]}_{=:\mathcal{K}_1}+\frac{\lambda^2}{i}\underbrace{\left[\frac{1}{2}\left(\mathcal{H}_j^{WW}+\mathcal{H}_j^{WW\dagger}\right),\frac{1}{2}\left(\mathcal{H}_j^{WW}-\mathcal{H}_j^{WW\dagger}\right)\right]}_{=:\mathcal{K}_2}\right) \qquad (72)
\end{aligned}
$$

Um $\mathcal{K}_1$ und $\mathcal{K}_2$ auszurechnen, nutze man die Algebra (2); aus dieser folgen noch ein paar nützliche Identitäten :

$$\omega^\dagger=\overline{\omega}=\omega^{-1},\qquad \omega^3=1$$

$$\Gamma_j\sigma_j^\dagger=\left(\sigma_j\Gamma_j^\dagger\right)^\dagger=\left(\sigma_j\Gamma_j^2\right)^\dagger=\left(\Gamma_j^2\sigma_j\omega^2\right)^\dagger=\overline{\omega}^2\sigma_j^\dagger\Gamma_j=\omega\sigma_j^\dagger\Gamma_j$$

Durch Vergleich von (72) mit (70) und (71) ergibt sich somit :

$$\frac{\mathcal{K}_2}{\sinh\left(\frac{y}{3}\right)\cosh\left(\frac{y}{3}\right)} = \left[e^{-i\frac{x}{3}}\Gamma_j\Gamma_{j+1}^\dagger+e^{i\frac{x}{3}}\Gamma_j^\dagger\Gamma_{j+1},e^{-i\frac{x}{3}}\Gamma_j\Gamma_{j+1}^\dagger-e^{i\frac{x}{3}}\Gamma_j^\dagger\Gamma_{j+1}\right]=\mathbf{0} \qquad (73)$$

$$\frac{\mathcal{K}_1}{2\sinh\left(\frac{y}{3}\right)}=\left[\mathcal{D}_j,e^{-i\frac{x}{3}}\Gamma_j\Gamma_{j+1}^\dagger-e^{i\frac{x}{3}}\Gamma_j^\dagger\Gamma_{j+1}\right]+\left[\mathcal{D}_{j+1},e^{-i\frac{x}{3}}\Gamma_j\Gamma_{j+1}^\dagger-e^{i\frac{x}{3}}\Gamma_j^\dagger\Gamma_{j+1}\right]=:\mathcal{X}_1+\mathcal{X}_2$$

$$
\begin{aligned}
\mathcal{X}_1 &= \left[e^{-i\frac{\varphi}{3}}\sigma_j+e^{i\frac{\varphi}{3}}\sigma_j^\dagger,e^{-i\frac{x}{3}}\Gamma_j\Gamma_{j+1}^\dagger-e^{i\frac{x}{3}}\Gamma_j^\dagger\Gamma_{j+1}\right]\\
&= +e^{-i\frac{\varphi}{3}}e^{-i\frac{x}{3}}\sigma_j\Gamma_j\Gamma_{j+1}^\dagger-e^{i\frac{\varphi}{3}}e^{i\frac{x}{3}}\sigma_j^\dagger\Gamma_j^\dagger\Gamma_{j+1}+e^{i\frac{\varphi}{3}}e^{-i\frac{x}{3}}\sigma_j^\dagger\Gamma_j\Gamma_{j+1}^\dagger-e^{-i\frac{\varphi}{3}}e^{i\frac{x}{3}}\sigma_j\Gamma_j^\dagger\Gamma_{j+1}\\
&\quad -e^{-i\frac{\varphi}{3}}e^{-i\frac{x}{3}}\Gamma_j\Gamma_{j+1}^\dagger\sigma_j+e^{i\frac{\varphi}{3}}e^{i\frac{x}{3}}\Gamma_j^\dagger\Gamma_{j+1}\sigma_j^\dagger-e^{i\frac{\varphi}{3}}e^{-i\frac{x}{3}}\Gamma_j\Gamma_{j+1}^\dagger\sigma_j^\dagger+e^{-i\frac{\varphi}{3}}e^{i\frac{x}{3}}\Gamma_j^\dagger\Gamma_{j+1}\sigma_j\\
&= +e^{-i\frac{\varphi}{3}}e^{-i\frac{x}{3}}\left(1-\overline{\omega}\right)\sigma_j\Gamma_j\Gamma_{j+1}^\dagger+e^{i\frac{\varphi}{3}}e^{-i\frac{x}{3}}\left(1-\omega\right)\sigma_j^\dagger\Gamma_j\Gamma_{j+1}^\dagger\\
&\quad +e^{i\frac{\varphi}{3}}e^{i\frac{x}{3}}\left(\overline{\omega}-1\right)\sigma_j^\dagger\Gamma_j^\dagger\Gamma_{j+1}+e^{-i\frac{\varphi}{3}}e^{i\frac{x}{3}}\left(\omega-1\right)\sigma_j\Gamma_j^\dagger\Gamma_{j+1}\\
&= +e^{-i\frac{x}{3}}\left(e^{-i\frac{\varphi}{3}}\left(1-\overline{\omega}\right)\sigma_j+e^{i\frac{\varphi}{3}}\left(1-\omega\right)\sigma_j^\dagger\right)\Gamma_j\Gamma_{j+1}^\dagger\\
&\quad -e^{i\frac{x}{3}}\left(e^{-i\frac{\varphi}{3}}\left(1-\omega\right)\sigma_j+e^{i\frac{\varphi}{3}}\left(1-\overline{\omega}\right)\sigma_j^\dagger\right)\Gamma_j^\dagger\Gamma_{j+1} \qquad (74)
\end{aligned}
$$

Und analog

$$
\begin{aligned}
\mathcal{X}_2 &= +e^{-i\frac{x}{3}}\left(e^{-i\frac{\varphi}{3}}\left(1-\omega\right)\sigma_{j+1}+e^{i\frac{\varphi}{3}}\left(1-\overline{\omega}\right)\sigma_{j+1}^\dagger\right)\Gamma_{j+1}^\dagger\Gamma_j\\
&\quad -e^{i\frac{x}{3}}\left(e^{-i\frac{\varphi}{3}}\left(1-\overline{\omega}\right)\sigma_{j+1}+e^{i\frac{\varphi}{3}}\left(1-\omega\right)\sigma_{j+1}^\dagger\right)\Gamma_{j+1}\Gamma_j^\dagger \qquad (75)
\end{aligned}
$$

Es ist nun das Tensorprodukt der (3×3)–Matrizen für die Gitterpunkte j und $j+1$ zu bilden, was zu einer (9×9)–Matrix führt. In dieser müßten *alle* Einträge *identisch* verschwinden, damit der Kommutator $\mathcal{K}_1 = \mathbf{0}$ ist.

Man hat die folgenden Operatorprodukte $(k = j, j+1)$:

$$\sigma_k \Gamma_k = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ \omega & 0 & 0 \\ 0 & \overline{\omega} & 0 \end{pmatrix}_k , \qquad \sigma_k^\dagger \Gamma_k = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ \overline{\omega} & 0 & 0 \\ 0 & \omega & 0 \end{pmatrix}_k \tag{76}$$

$$\sigma_k \Gamma_k^\dagger = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \omega \\ \overline{\omega} & 0 & 0 \end{pmatrix}_k , \qquad \sigma_k^\dagger \Gamma_k^\dagger = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \overline{\omega} \\ \omega & 0 & 0 \end{pmatrix}_k \tag{77}$$

Man betrachte z. B. dasjenige Element $T_{(1,3),(1,2)}$ der (9×9)–Matrix, welches entsteht aus den Matrizen für $k = j$ mit nicht–verschwindenden Einträgen an der Stelle $(1,3) =$ (Zeile, Spalte) (76) und $k = j+1$ mit nicht–verschwindenden Einträgen an der Stelle $(1,2)$ (77); dieses ist $(\omega + \overline{\omega} = 2\cos\left(\frac{2\pi}{3}\right) = -1)$:

$$\begin{aligned} T_{(1,3),(1,2)} &= e^{-i\frac{x}{3}} \left(e^{-i\frac{\varphi}{3}} (1-\omega) + e^{i\frac{\varphi}{3}} (1-\overline{\omega}) \right) + e^{-i\frac{x}{3}} \left(e^{-i\frac{\varphi}{3}} (1-\overline{\omega}) + e^{i\frac{\varphi}{3}} (1-\omega) \right) \\ &= e^{-i\frac{x}{3}} \left(e^{-i\frac{\varphi}{3}} (2-(\omega+\overline{\omega})) + e^{i\frac{\varphi}{3}} (2-(\omega+\overline{\omega})) \right) \\ &= 6e^{-i\frac{x}{3}} \cos\left(\frac{\varphi}{3}\right) \stackrel{!}{=} 0 \end{aligned} \tag{78}$$

Für reelles φ aus dem Intervall $[0, 6\pi[$ (siehe Periodizität des Spektrums von $\mathcal{H}$ (2.5.2)) wird diese Forderung nur von $\varphi = \frac{3}{2}\pi, \frac{9}{2}\pi$ erfüllt, jedoch sind dies Werte, für die $\mathcal{H}$ nicht nicht–hermitesch werden kann, wenn die Parameter der Integrabilitätsbedingung (19) genügen sollen, weil sie Spiegelabbildungen der superintegrablen Linie darstellen (s. Periodizität des Spektrums, insbesondere Formel (40)).

Wählt man φ komplex, so gilt Analoges und zusätzlich, daß cos und sin linear unabhängige Funktionen sind, also nicht für gleiche Werte verschwinden.

Somit ist der Kommutator also stets ungleich $\mathbf{0}$ und entsprechender Hamilton–Operator in *jedem* Fall nicht–normal.

Weil $\mathcal{H}$ nicht hermitesch ist, ist er auch *nicht selbst*adjungiert (d. h. hermitesch konjugierter und adjungierter Operator sind ungleich); letzteres ist *äquivalent* dazu, daß $\mathcal{H}$ *kein voll*ständiges ((im Standardskalarprodukt) orthonormierbares) System von *Eigen*funktionen besitzt. Sehr wohl kann es damit aber ein vollständiges System von *Lösungen* zum Operator $\mathcal{H}$ geben, die nicht (*alle*) Eigenfunktionen von $\mathcal{H}$ sein müssen (*Dia*gonalisierbarkeit; schiefe Basis, siehe C.2). Daher brauchen diese Lösungen auch *nicht* (alle) (auf 1) normierbar zu sein.

C.2 Diagonalisierbarkeit des Hamilton–Operators mittels biunitärer Transformationen — Normalisierbarkeit

Durch geeignete Veränderung der Metrik (und damit des Skalarproduktes) könnte der Hamiltonoperator (16) zu einem normalen Operator umgeschrieben werden — allerdings würde die Metrik dann vom Parameter λ abhängen, wenn man sie im hermiteschen Teil des Parameterraumes invariant lassen möchte, denn auf der hermitesch–nicht–hermiteschen Grenzkurve ($\lambda = |\cos(\varphi)|$) müßte diese sich (mindestens) stetig ändern; damit würde sich im nicht–hermiteschen Teil aber auch die Algebra (2) verändern und somit die zu beschreibende Physik — dies soll nicht betrachtet werden [37] [54].

Da $\mathcal{H}$ nicht–normal ist, bleibt zu klären, ob $\mathcal{H}$ *dia*gonalisierbar ist, wenn auch nicht mit *einem unitären* Operator.

$\mathcal{H}$ ist ein *linearer* Operator; damit ist die Situation analog zur *Matrizen*theorie.

Jede Matrix A läßt sich mittels einer *nicht–singulären* (nicht notwendig unitären) Matrix T auf Jordan–Chevalley–Normalform bringen : $\hat{A} = T^{-1}AT$. Im Falle, daß A nicht–normal ist, gilt : ist $\hat{A}$ eine *Dia*gonalmatrix, so ist A (noch) normalisierbar, d. h. es existiert ein *vollständiges* System von Eigenvektoren (die *nicht* orthogonalisierbar sind) (unabhängig von der Dimension der Matrix A), sonst ist A nicht normalisierbar und es existiert kein vollständiges System von Eigenvektoren (aber Hauptvektoren von höherer als 1. Stufe).

Hier sind die Matrizen der Q_P–Sektoren zu betrachten; hat eine solche Matrix keinen mehrfach entarteten Eigenwert, so ist die Jordan–Chevalley–Normalform eine Diagonalmatrix (denn alle Jordan–Kästchen haben die Größe 1) und es gibt ein vollständiges System von Eigenvektoren. Im Falle einer — generischen (CP–Symmetrie (s. 2.6)) oder zufälligen (Energieniveaukreuzungen im gleichen Q_P–Sektor (s. 4)) — Entartung ist keine *definitive* Aussage möglich, denn durch folgendes Beispiel wird ein Stetigkeitsargument widerlegt : man betrachte die nicht–normale Matrizenschar

$$A_t := \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & t \end{pmatrix}, t \in \mathbb{R}$$

A_t besitzt die Eigenwerte $1, t$. Für alle $t \neq 1$ ist A_t diagonalisierbar, während A_1 schon auf Jordan–Chevalley–Normalform ist.

Da der nicht–hermitesche Hamiltonoperator $\mathcal{H}$ ein physikalisches System darstellt und auch im hermiteschen Bereich die CP–Symmetrie ($\varphi = 0, \lambda \geq 1$) sowie Energieniveaukreuzungen im gleichen Q_P–Sektor (und dort ein vollständiges System von Eigenvektoren existiert) vorkommen, kann davon ausgegangen werden, daß auf solchen 1–dimensionalen Untermannigfaltigkeiten des 4–dimensionalen (nicht–hermiteschen) Parameterraumes, die somit das Maß Null aufweisen, dies ebenso im nicht–hermiteschen Bereich der Fall ist.

$\mathcal{H}$ kann allerdings *biunitär dia*gonalisiert werden (dies bedeutet, daß dann das Transformationsverhalten links und rechts verschieden ist).

Theorem 2 (biunitäre Transformation) *[50][51]*
Sei $[A_1, \ldots, A_N]$ eine Menge komplexer $(m \times m)$–Matrizen. Dann existieren unitäre Matrizen U, V derart, daß $U^\dagger A_i V$ für alle $i = 1, (1), N$ diagonal ist genau dann, wenn die Mengen $S_1 := \{A_i^\dagger A_j\}_{i,j=1,(1),N}$ und $S_2 := \{A_i A_j^\dagger\}_{i,j=1,(1),N}$ abelsch sind.

Der Beweis in [50] ist unabhängig von der Entartung der Eigenwerte der A_i; auch können die A_i singulär sein; er ist auf unendlichdimensionale Matrizen erweiterbar. Jedoch ist keine Aussage möglich, ob A_i ein vollständiges System von Eigenvektoren hat.

Weil $\mathcal{H}$ blockdiagonalisierbar ist (auf Grund der Ladungserhaltung und Translationsinvarianz, s. 2.1), reduziert sich die Anwendung des Theorems erheblich : es ist zu prüfen, ob $\mathcal{S}_1 = \mathcal{H}^\dagger\mathcal{H}$ und $\mathcal{S}_2 = \mathcal{H}\mathcal{H}^\dagger$ abelsch sind, d. h. hier, ob sie normal sind.

Wenn dies zutrifft, so wäre insbesondere gezeigt, daß auch der Hamiltonoperator des *un*endlichen Systems (biunitär) diagonalisierbar ist. Betont sei an dieser Stelle, daß die Einträge des Diagonaloperators $\mathcal{U}^\dagger\mathcal{H}\mathcal{V}$ die *Massen*eigenwerte von $\mathcal{H}$ sind und nicht — wie im Standardmodell (Kobayashi–Maskawa–Matrix [29]) — nur die *Eich*eigenwerte !

Da hermitesche Konjugation eine Involution ist, gilt :

$$(\mathcal{H}\mathcal{H}^\dagger)^\dagger = \mathcal{H}^{\dagger\dagger}\mathcal{H}^\dagger = \mathcal{H}\mathcal{H}^\dagger \qquad \text{und} \qquad (\mathcal{H}^\dagger\mathcal{H})^\dagger = \mathcal{H}^\dagger\mathcal{H}^{\dagger\dagger} = \mathcal{H}^\dagger\mathcal{H}$$

Beide Produkte sind also *hermitesche* Operatoren, $\mathcal{S}_1$ und $\mathcal{S}_2$ aus obigem Theorem sind folglich abelsch und $\mathcal{H}$ ist biunitär diagonalisierbar. Dies läßt sich auch im Detail zeigen.

$$
\begin{aligned}
\mathcal{H}\mathcal{H}^\dagger &= \frac{4}{3}\sum_{j=1}^{N}\left(e^{-i\frac{\varphi}{3}}\sigma_j + e^{i\frac{\varphi}{3}}\sigma_j^\dagger + \lambda\left(e^{-i\frac{x}{3}}e^{\frac{y}{3}}\Gamma_j\Gamma_{j+1}^\dagger + e^{i\frac{x}{3}}e^{-\frac{y}{3}}\Gamma_j^\dagger\Gamma_{j+1}\right)\right) \\
&\quad \sum_{k=1}^{N}\left(e^{i\frac{\varphi}{3}}\sigma_k^\dagger + e^{-i\frac{\varphi}{3}}\sigma_k + \lambda\left(e^{i\frac{x}{3}}e^{\frac{y}{3}}\Gamma_k^\dagger\Gamma_{k+1} + e^{-i\frac{x}{3}}e^{-\frac{y}{3}}\Gamma_k\Gamma_{k+1}^\dagger\right)\right) \\
&= \frac{4}{3}\sum_{j=1}^{N}\sum_{k=1}^{N}\Big(\sigma_j\sigma_k^\dagger + e^{-i\frac{2}{3}\varphi}\sigma_j\sigma_k + e^{i\frac{2}{3}\varphi}\sigma_j^\dagger\sigma_k^\dagger + \sigma_j^\dagger\sigma_k \\
&\quad + \lambda\Big(e^{-i\frac{x}{3}}e^{\frac{y}{3}}e^{i\frac{\varphi}{3}}\Gamma_j\Gamma_{j+1}^\dagger\sigma_k^\dagger + e^{-i\frac{x}{3}}e^{\frac{y}{3}}e^{-i\frac{\varphi}{3}}\Gamma_j\Gamma_{j+1}^\dagger\sigma_k + e^{i\frac{x}{3}}e^{-\frac{y}{3}}e^{i\frac{\varphi}{3}}\Gamma_j^\dagger\Gamma_{j+1}\sigma_k^\dagger + e^{i\frac{x}{3}}e^{-\frac{y}{3}}e^{-i\frac{\varphi}{3}}\Gamma_j^\dagger\Gamma_{j+1}\sigma_k \\
&\qquad + e^{i\frac{x}{3}}e^{\frac{y}{3}}e^{-i\frac{\varphi}{3}}\sigma_j\Gamma_k^\dagger\Gamma_{k+1} + e^{i\frac{x}{3}}e^{\frac{y}{3}}e^{i\frac{\varphi}{3}}\sigma_j^\dagger\Gamma_k^\dagger\Gamma_{k+1} + e^{-i\frac{x}{3}}e^{-\frac{y}{3}}e^{-i\frac{\varphi}{3}}\sigma_j\Gamma_k\Gamma_{k+1}^\dagger + e^{-i\frac{x}{3}}e^{-\frac{y}{3}}e^{i\frac{\varphi}{3}}\sigma_j^\dagger\Gamma_k\Gamma_{k+1}^\dagger\Big) \\
&\quad + \lambda^2\left(e^{\frac{2}{3}y}\Gamma_j\Gamma_{j+1}^\dagger\Gamma_k^\dagger\Gamma_{k+1} + e^{-i\frac{2}{3}x}\Gamma_j\Gamma_{j+1}^\dagger\Gamma_k\Gamma_{k+1}^\dagger + e^{i\frac{2}{3}x}\Gamma_j^\dagger\Gamma_{j+1}\Gamma_k^\dagger\Gamma_{k+1} + e^{-\frac{2}{3}y}\Gamma_j^\dagger\Gamma_{j+1}\Gamma_k\Gamma_{k+1}^\dagger\right)\Big) \\
&= \frac{4}{3}\sum_{j=1}^{N}\sum_{k=1}^{N}\left(\mathcal{D}_{j,k} + \lambda\mathcal{V}_{j,k} + \lambda^2\mathcal{W}_{j,k}\right) \qquad (79)
\end{aligned}
$$

Es gilt für jede Komponente von $\mathcal{H}\mathcal{H}^\dagger$: $\mathcal{D}_{j,k} = \mathcal{D}_{j,k}^\dagger$ und $\mathcal{W}_{j,k} = \mathcal{W}_{j,k}^\dagger$
Für $\mathcal{V}_{j,k}$ beachte man :
$k := j : \mathcal{V}_{j,j} = \mathcal{V}_{j,j}^\dagger$
$k \neq j : \sum_{j=1}^{N}\sum_{k=1}^{N}\mathcal{V}_{j,k} = \sum_{j=1}^{N}\sum_{k=1}^{N}\mathcal{V}_{j,k}^\dagger$

denn : man beachte die Algebra (2) und führe für σ und Γ *getrennte* Indexverschiebungen durch.

$\Rightarrow$: $\mathcal{H}\mathcal{H}^\dagger$ ist ein *hermitescher* Operator, insbesondere normal.

Auch $\mathcal{H}^\dagger\mathcal{H}$ ist ein hermitescher Operator (da lediglich die Reihenfolge der σ– und Γ–Matrizen invertiert ist, ist dies mit gleicher Argumentation wie vor klar).

C.3 Beispiele zum Arnoldi–Verfahren

Es werden die Ritz–Werte für die (extremalen) Eigenwerte *allgemeiner* nicht–hermitescher Matrizen A der Dimension M mit dem Arnoldi–Verfahren numerisch auf vier verschiedene Möglichkeiten bestimmt (Verwendung von doppelt– bzw. vierfach–genauen Variablen; mit bzw. ohne Nachorthogonalisierung), um zu zeigen, daß Nachorthogonalisierung *nötig* und vierfache Genauigkeit *wünschenswert* ist.

Hinsichtlich der zu bestimmenden Anzahl der *verschiedenen* Matrixelelmente der Unterraummatrix der Dimension $m(\leq M)$, gilt für das in 2.3 erwähnte Arnoldi–Verfahren (vollbesetzte Hessenberg–Matrix) :

$$\frac{m(m+1)}{2} + (m-1) = \frac{m^2}{2} + \frac{3}{2}m - 1$$

Beim Lanczos–Verfahren (symmetrische Tridiagonalmatrix) sind dies lediglich

$$m + (m-1) = 2m - 1$$

Daraus folgt durch Quotientenbildung

$$\frac{m^2 + 3m - 2}{2(2m-1)} \approx \frac{m}{4} + \frac{3}{4}$$

d. h., ist $m \approx 100$, so sind ca. 25 mal so viele Matrixelemente mit *hoher* Genauigkeit zu bestimmen; die Rundungsfehlerakkumulation erzwingt damit eine Nachorthogonalisierung.

Um die Ritz–Werte mit den wahren Eigenwerten von A vergleichen zu können, müssen diese exakt bekannt sein. Daher werden als Beispielmatrizen jene gewählt, die auf Schur–Normalform sind (s. Satz 1); bei diesen lassen sich die Eigenwerte sofort ablesen; diese Matrizen sind algebraisch sehr einfach, numerisch jedoch stellen sie höchste Ansprüche (sofern nicht alle Nebendiagonalelemente Null sind).

Im Folgenden seien die Eigenwerte μ_j derart gewählt, daß sie in der in 2.3 erwähnten Konvergenzellipse, die die Null nicht enthält, liegen (ggfl. Shiftung).

Zunächst seien die Eigenwerte nicht entartet und A sei asymmetrisch "vollbesetzt" (obere Dreiecksmatrix), aber *ausbalanciert*, d. h.

$$\min_{1 \leq i \leq M} |a_{ii}| \geq \max_{\substack{1 \leq i,j \leq M \\ i \neq j}} |a_{ij}|$$

Bei kleiner Dimension ($m = M \approx 10$) sind alle vier Möglichkeiten gleichwertig; bei $m = M = 100$ zeigt sich schon, daß auf Nachorthogonalisierung nicht verzichtet werden kann : die Eigenwerte, die weiter innen in der Eigenwertellipse (der komplexen Zahlenebene) liegen, werden ohne Nachorthogonalisierung nicht richtig approximiert (und sind abhängig vom Startvektor; dies kann bei Nachorthogonalisierung nur eintreten, falls die Matrix A nicht ausbalanciert ist); bei Verwendung der vierfachen Genauigkeit sind die extremalen Eigenwerte noch von akzeptabler Genauigkeit (8 signifikante Stellen), während die Ritz–Werte bei doppelter Genauigkeit mit den Eigenwerten von A nichts mehr gemeinsam haben. Dies zeigt auch : je größer die Dimension M der Matrix A ist, desto besser ist die vierfache gegenüber der doppelten Genauigkeit.

Die Notwendigkeit der Nachorthogonalisierung ist auch abhängig vom Besetzungsgrad der Matrix A : je dichter, desto erforderlicher. Bei großen Matrizen ($M \gtrapprox 500$), bei denen nur die extremalen Eigenwerte bestimmt werden sollen, ist die Besetzungsdichte proportional zur Unterraumdimension m, d. h., wählt man m zu klein, geht zu viel Information "verloren".

Die höhere Genauigkeit erfordert bei gleicher Anzahl von Iterationen einen größeren Zeitaufwand; jedoch erspart diese gerade viele Iterationen (keine Startvektorabhängigkeit), was sich positiv bemerkbar macht, falls die Eigenwerte von hoher Exaktheit sein sollen.

Ist die Matrix A *nicht* ausbalanciert, so ist sie *unbedingt* (!) vor der Projektion auf den Unterraum auszubalancieren; wird erst die Hessenberg–Matrix ausbalanciert, so sind selbst bei Verwendung von vierfacher Genauigkeit und (maximaler) Nachorthogonalisierung die richtigen Eigenwerte nicht mehr mit genügender Exaktheit zu erhalten.

Seien jetzt Eigenwerte von A auch von höherer algebraischer Vielfachheit als 1, vorerst nur schwach entartet (z. B. 3–fach). Vorstehendes gilt nun in verstärktem Maße; Nachorthogonalisierung ist selbst bei kleinen Matrizen unverzichtbar. Steigt der Entartungsgrad der (extremalen) Eigenwerte und/oder die Dimension von A weiter an, so tritt die Überlegenheit der vierfachen gegenüber der doppelten Genauigkeit klar zu Tage. Bei sehr hohem Entartungsgrad spielt die Ausbalancierung eine extrem dominante Rolle.

In Bezug auf die Hamilton–Matrizen der Q_P–Sektoren ist folgendes festzuhalten : die Matrizen sind extrem dünn besetzt, ausbalanciert (ein Shift bezieht sich nur auf die Diagonalelemente und vergrößert sogar den Betrag der extremalen Eigenwerte mit großem negativem Re–Teil (unteres Spektrum), so daß das Verfahren dadurch beschleunigt wird) und haben keine (hoch) entarteten Eigenwerte. Erst durch alle drei Tatsachen ist es überhaupt möglich, die extremalen Eigenwerte solch riesiger Matrizen *zuverlässig* zu bestimmen. Wegen der sehr schwachen Besetzung erweist sich die vierfache Genauigkeit erst ab ca. $N = 10$ Sites der doppelten (leicht) überlegen; auf Nachorthogonalisierung jedoch kann auch hier nicht verzichtet werden (dies liegt an der Bestimmung der vielen Unterraummatrixelemente).

C.4 Klein–Gordon–Gleichung auf dem Gitter

Die relativistische Klein–Gordon–Wellengleichung für ein freies Teilchen mit Masse m lautet in der kontinuierlichen Raum–Zeit (Transformation in ein System, in dem $\hbar = 1 = c$ sind) :

$$\left(\Box + m^2\right)\psi(\boldsymbol{x},t) = 0 \qquad \text{mit} \quad \Box := \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \triangle \tag{80}$$

mit der relativistischen Energie–Impuls–Beziehung

$$E^2 = m^2 + \boldsymbol{p}^2 \tag{81}$$

Lösungen zu (80), die (81) erfüllen, sind (Pakete) ebene(r) Wellen

$$\psi(\boldsymbol{x},t) = Ae^{i(\boldsymbol{px}-Et)}$$

Um eine relativistische Feldtheorie auf dem Gitter zu formulieren, ist eine *Diskretisierung* der Ableitung (= Diffenzenquotient) erforderlich. In *zwei* Dimensionen gibt es jeweils eine Raum– und Zeitrichtung; da ψ *symmetrisch* in x und t ist, genügt es, die Rechnung für eine Richtung auszuführen, hier in der Raumdimension.

$$\psi = Ae^{-iEt}\tilde{\psi} \qquad \text{mit} \quad \tilde{\psi} = e^{ipx}$$

Daraus folgt nach (80)

$$\left(m^2 - \triangle\right)\tilde{\psi} = E^2\tilde{\psi} \tag{82}$$

Die Gitterkonstante sei a; der Impuls kann Œ auf $0 \leq p < 2\pi$ (1. Brillouin–Zone) eingeschränkt werden.

Die Diskretisierung der Ableitung wird nun in *symmetrisierter* Form definiert :

Definition 1
Sei $f(x)$ eine $C^2(\mathbb{R})$–Funktion.

$$\frac{\partial f(x)}{\partial x} \rightarrow \frac{f\left(x+\frac{a}{2}\right) - f\left(x-\frac{a}{2}\right)}{a} \tag{83}$$

Dann folgt für die Ersetzung der zweiten Ableitung

$$\frac{\partial^2 f(x)}{\partial x^2} \rightarrow \frac{1}{a^2}\left(f(x+a) - 2f(x) + f(x-a)\right) \tag{84}$$

Auf dem Gitter sind die Eigenfunktionen bis auf einen Faktor *periodisch* (N Gitterpunkte) :

$$f(x+a) = f(x)\alpha \qquad \wedge \qquad \alpha^N = 1 \tag{85}$$

Damit (ebene Wellen sollen Eigenfunktionen des Laplace–Operators sein) setze : $f(x) := e^{ipax}$

$$\begin{aligned} -\triangle e^{ipax} &= -e^{ipax}\frac{1}{a^2}\left(e^{ipa} - 2 + e^{-ipa}\right) = \tilde{\psi}\frac{1}{a^2}\underbrace{e^{ipa}}_{\text{Phase}}2\left(1-\cos(pa)\right) = \tilde{\psi}\frac{1}{a^2}e^{ipa}4\sin^2\left(\frac{pa}{2}\right) \\ &= \underbrace{\tilde{\psi}\, e^{ipa}\left(\frac{2}{a}\sin\left(\frac{pa}{2}\right)\right)^2}_{=:I} \end{aligned} \tag{86}$$

Der Phasenfaktor in (86) ist α und genügt der in (85) gestellten Bedingung

$$e^{ipaN} \stackrel{!}{=} 1 \quad \Rightarrow \quad paN = 2\pi m \quad Œ\, m := 1 \qquad \Rightarrow \quad p = \frac{2\pi}{N}\frac{1}{a}$$

Setzt man $a := 1$, so erhält man die Formel für den Impuls P.

Zu zeigen ist noch, daß I in (86) bei Grenzwertbildung ($a \downarrow 0$) in p^2 übergeht. Dazu wendet man auf den Ausdruck I die Regel von de l' Hôspital an :

$$\begin{aligned}
\lim_{a\downarrow 0} I &= \lim_{a\downarrow 0} 4\frac{e^{ipa}\sin^2\left(\frac{pa}{2}\right)}{a^2} \\
&= \lim_{a\downarrow 0} 4\frac{e^{ipa}\left(2\sin\left(\frac{pa}{2}\right)\cos\left(\frac{pa}{2}\right)\frac{p}{2} - \sin^2\left(\frac{pa}{2}\right)ip\right)}{2a} \\
&= \lim_{a\downarrow 0} 2p\frac{e^{ipa}\left(\cos^2\left(\frac{pa}{2}\right)\frac{p}{2} - \sin^2\left(\frac{pa}{2}\right)\frac{p}{a} - \sin\left(\frac{pa}{2}\right)\cos\left(\frac{pa}{2}\right)ip - i\sin^2\left(\frac{pa}{2}\right)ip - 2\sin\left(\frac{pa}{2}\right)\cos\left(\frac{pa}{2}\right)i\frac{p}{2}\right)}{1} \\
&= p^2
\end{aligned} \tag{87}$$

C.5 Korollar des Fundamentalsatzes der Algebra

Satz 4 (Fundamentalsatz der Algebra) *[75]*
Jedes nicht–konstante komplexe Polynom hat mindestens eine komplexe Nullstelle.

Da sich Nullstellen stets als Linearfaktoren abspalten lassen, ist dieser Satz äquivalent zum

Satz 5 (Faktorisierungssatz)
Jedes Polynom $p(z) = \sum_{k=0}^{n} a_k z^k \in \mathbb{C}[z]$ vom Grad n (d. h. $a_n \neq 0$) ist eindeutig (bis auf die Reihenfolge der Faktoren) darstellbar als Produkt

$$p(z) = a_n \prod_{l=1}^{r} (z - c_l)^{m_l}, \tag{88}$$

wobei $c_1, \ldots, c_r \in \mathbb{C}$ paarweise verschieden, $m_1, \ldots, m_r \in \mathbb{N}$, $n = \sum_{l=1}^{r} m_l$.

Für reelle Polynome $p(z) \in \mathbb{R}[z]$ folgt hieraus, da dann wegen $\overline{p(z)} = p(\overline{z})$ mit c auch stets $\overline{c}$ eine Nullstelle ist und $(z-c)(z-\overline{c}) \in \mathbb{R}[z]$ gilt :

Korollar 2 (Korollar des Fundamentalsatzes der Algebra)
Jedes reelle Polynom $p(z)$ vom Grade $n \geq 1, n \in \mathbb{N}$, ist eindeutig darstellbar als Produkt reeller Linearfaktoren und reeller quadratischer Polynome.

Literaturverzeichnis

[1] G. Albertini, B. M. McCoy und J. H. H. Perk; *Eigenvalue Spectrum of the Superintegrable Chiral Potts Model*, Advanced Studies in Pure Mathematics **19** (1989) 1

[2] G. Albertini, B. M. McCoy, J. H. H. Perk und S. Tang; *Excitation Spectrum and Order Parameter for the Integrabel N–State Potts Model*, Nucl. Phys. **B 314** (1989) 741

[3] G. Albertini, B. M. McCoy und J. H. H. Perk; *Commensurate–Incommensurate Transition in the Ground State of the Superintegrable Chiral Potts Model*, Phys. Lett. **A 135** (1989) 159

[4] G. Albertini, B. M. McCoy und J. H. H. Perk; *Level Crossing Transitions and the Massless Phases of the Superintegrable Chiral Potts Chain*, Phys. Lett. **A 139** (1989) 204

[5] F. C. Alcaraz und A. L. Santos; *Conservation Laws for $\mathbb{Z}_n$–Symmetric Quantum Spin Models and their Exact Ground State Energies*, Nucl. Phys. **B 275** (1986) 436

[6] F. C. Alcaraz; *Discrete Mass Spectrum of $\mathbb{Z}(N)$ Spin Systems Pertubated by a Thermal Field*, J. Phys. **A 23** (1990) L1105

[7] H. Au–Yang und J. H. H. Perk; *Onsager's Star–Triangle Equation : Master Key to Integrability*, Advanced Studies in Pure Mathematics **19** (1989) 57

[8] H. Au–Yang, B. M. McCoy, J. H. H. Perk, Sh. Tang und M. L. Yan; *Commuting Transfer Matrices in the Chiral Potts Models : Solutions of Star–Triangle Equations with Genus* > 1, Phys. Lett. **A 123** (1987) 219

[9] H. Au–Yang, B. M. McCoy, J. H. H. Perk und Sh. Tang; *Solvable Models in Statistical Mechanics and Riemann Surfaces of Genus greater than One*, in : *Algebraic Analysis*, vol. 1, eds. M. Kashiwara und T. Kawai, Academic Press (1988) 29

[10] R. J. Baxter; *Superintegrable Chiral Potts Model : Thermodynamics Properties, an "Inverse" Model, and a Simple Associated Hamiltonian*, J. Stat. Phys. **57** (1989) 1

[11] R. J. Baxter, J. H. H. Perk und H. Au–Yang; *New Solutions of the Star–Triangle Relations for the Chiral Potts Model*, Phys. Lett. **A 128** (1988) 138

[12] R. J. Baxter; *The Superintegrable Potts Model*, Phys. Lett. **A 133** (1988) 185

[13] J. M. Van den Broeck und L. W. Schwartz; *A One–Parameter Family of Sequence Transformations*, SIAM J. Math. Anal. Vol. **10**, No. 3 (1979) 658

[14] R. Bulirsch und J. Stoer; *Fehlerabschätzungen und Extrapolation mit rationalen Funktionen bei Verfahren vom Richardson–Typus*, Numerische Mathematik **6** (1964) 413

[15] A. Bunse und A. Bunse–Gerstner, *Numerische Lineare Algebra*, Teubner Studienbücher Mathematik (1985) 262

[16] J. L. Cardy; *Conformal Invariance and Statistical Mechanics*, in : Les Houches 1988, Session XLIX; *Fields, Strings and Critical Phenomena*, E. Brézin und J. Zinn–Justin, eds., (1989) 169

[17] M. Carmeli; *Statistical Theory and Random Matrices*, Pure and Applied Mathematics, A Series of Monographs and Textbooks **74**, eds. Earl J. Taft, E. Hewitt, S. Kobayashi, Library of Congress Cataloging in Publication Data (1983)

[18] P. Centen, M. Marcu und V. Rittenberg; *Non–Universality in $\mathbb{Z}_3$–Symmetric Spin Systems*, Nucl. Phys. **B 205** (1982) 585

[19] P. Christe und M. Henkel; *Introduction to Conformal Invariance and Its Application to Critical Phenomena*, New Series m : Monographs, Lecture Notes in Physics m 16, Springer–Verlag (1992) 107

[20] W. Daniel, W. B. Gragg, L. Kaufman und G. W. Stewart; *Reorthogonalization and Stable Algorithms for Updating the Gram–Schmidt QR Factorization* in Mathematics of Computation, Volume **30**, Number 136 (1976) 772

[21] S. Dasmahapatra, R. Kedem und B. M. McCoy; *Spectrum and Completeness of the Three–State Superintegrable Chiral Potts Model*, Nucl. Phys. **B 396** (1993) 506

[22] B. Davies; *Onsager's Algebra and Superintegrability*, J. Phys. A : Math. Gen. **23** (1990) 2245

[23] B. Davies; *Onsager's Algebra and the Dolan–Grady Condition in the Non–Self–Dual Case*, J. Math. Phys. **32** (1991) 2945

[24] L. Dolan und M. Grady; *Conserved Charges from Self–Duality*, Phys. Rev. **D 25** (1982) 1587

[25] F. J. Dyson; *Statistical Theory of the Energy Levels of Complex Systems. I*, J. Math. Phys. **3** (1962) 140

[26] F. J. Dyson; *Statistical Theory of the Energy Levels of Complex Systems. II*, J. Math. Phys. **3** (1962) 157

[27] F. J. Dyson; *Statistical Theory of the Energy Levels of Complex Systems. III*, J. Math. Phys. **3** (1962) 166

[28] F. J. Dyson; *The Threefold Way. Algebraic Structure of Symmetry Groups and Ensembles in Quantum Mechanics*, J. Math. Phys. **3** (1962) 1199

[29] G. Ecker, W. Grimus und H. Neufeld; *A Standard Form for Generalised CP Transformations*, J. Phys. **A 20** (1987) L807

[30] T. E. Einstein; *Proceedings of the 10-th John Hopkins Workshop*, ed. K. Dietz und V. Rittenberg, World Scientific (1987) 17

[31] H. U. Everts und H. Röder; *Transfer Matrix Study of the Chiral Clock Model in the Hamiltonian Limit*, J. Phys. **A 22** (1989) 2475

[32] V. A. Fateev und A. B. Zamolodchikov; *Conformal Quantum Field Theory Models in Two Dimensions Having $\mathbb{Z}_3$ Symmetry*, Nucl. Phys. **B 280** (1987) 644

[33] V. A. Fateev und S. L. Lykyanov; *The Models of Two–Dimensional Conformal Quantum Field Theory with $\mathbb{Z}_n$ Symmetry*, Int. Jour. Mod. Phys. **A 3** (1988) 507

[34] G. Frobenius; *Über Matrizen aus nicht negativen Elementen*, S. B. Deutsche Akad. Wiss., Math.-Nat. Kl., Berliner Berichte (1912) 456

[35] F. R. Gantmacher; *Matrix Theory*, Chelsea Publ. Co. vol. **2** (1959)

[36] F. R. Gantmacher; *Matrizentheorie*, Springer–Verlag (1986) 274

[37] G. von Gehlen; private Kommunikation

[38] G. von Gehlen und V. Rittenberg; *Finite–Size Effects in the Three–State Quantum Asymmetric Clock Model*, Nucl. Phys. **B 230 [FS 10]** (1984) 455

[39] G. von Gehlen und V. Rittenberg; *$\mathbb{Z}_n$–Symmetric Quantum Chains with an Infinite Set of Conserved Charges and $\mathbb{Z}_n$ Zero Modes*, Nucl. Phys. **B 257 [FS 14]** (1985) 351

[40] G. von Gehlen, V. Rittenberg und H. Ruegg; *Conformal Invariance and Finite One–Dimensional Quantum Chains*, J. Phys. **A 19** (1985) 107

[41] G. von Gehlen und V. Rittenberg; *Operator Content of the Three–State Potts Quantum Chain*, J. Phys. **A 19** (1986) L625

[42] G. von Gehlen und V. Rittenberg; *The Ashkin–Teller Quantum Chain and Conformal Invariance*, J. Phys. **A 20** (1987) 227

[43] G. von Gehlen; *Critical and Off–Critical Conformal Analysis of the Ising Quantum Chain in an Imaginary Field*, J. Phys. **A 24** (1991) 5371

[44] G. von Gehlen; *Phase Diagram and Two–Particle Structure of the $\mathbb{Z}_3$–Chiral Potts Model*, Proceedings of International Symposium on Advanced Topics of Quantum Physics, eds. J. Q. Liang, M. L. Wang, S. N. Qiao, D. C. Su, Sciences Press Beijing (1992) 248

[45] G. von Gehlen und A. Honecker; *Multi–Particle Structure in the $\mathbb{Z}_n$–Chiral Potts Models*, J. Phys. **A 26** (1993) 1275

[46] G. von Gehlen; *Non–hermitian Tricriticality in the Blume–Capel Model with imaginary Field*, preprint, BONN–HE–94–03

[47] G. von Gehlen und T. W. Krallmann; *Phase Structure of the $\mathbb{Z}_3$–Chiral Potts Model*, nicht publiziert

[48] J. Ginibre; *Statistical Ensembles of Complex, Quaternion, and Real Matrices*, J. Math. Phys. **6** (1965) 440

[49] P. Ginsparg; *Applied Conformal Field Theory*, in : Les Houches 1988, Session XLIX; *Fields, Strings and Critical Phenomena*, E. Brézin und J. Zinn–Justin, eds., (1989) 1

[50] W. Grimus und G. Ecker; *On the Simultaneous Diagonalisability of Matrices*, J. Phys. **A 19** (1986) 3917

[51] W. Grimus und G. Ecker; *Basis Transformations in Generation Space and a Criterion for the Existence of Standard Forms for Unitarily Congruent Matrices*, J. Phys. **A 21** (1988) 2825

[52] N. S. Han und A. Honecker; *Low–Temperature Expansions and Correlation Functions of the $\mathbb{Z}_3$–Chiral Potts Model*, J. Phys. **A 27** (1994) 9

[53] M. Henkel und G. Schütz; *Finite–Lattice Extrapolation Algorithms*, J. Phys. **A 21** (1988) 2617

[54] A. Honecker; private Kommunikation

[55] A. Honecker und G. von Gehlen; *Excitation Spectrum and Correlation Functions of the $\mathbb{Z}_3$–Chiral Potts Quantum Spin Chain*, preprint, BONN–TH–94–20, hep–th/9409170

[56] A. Honecker; *A Perturbative Approach to the Chiral Potts Model*, preprint, BONN–TH–94–21, hep–th/9409122

[57] S. Howes, L. P. Kadanoff und M. Den Nijs; *Quantum Model for Commensurate–Incommensurate Transitions*, Nucl. Phys. **B 215** (1983) 169

[58] D. A. Huse; *Simple Three–States Model with Infinitely many Phases*, Phys. Rev. **B 24** (1981) 5180

[59] J. B. Kogut; *An Introduction to Lattice Gauge Theory and Spin Systems*; Rev. Mod. Phys. **51** (1979) 659

[60] W. John, B. Milek, H. Schanz und P. Šeba; *Statistical Properties of Resonances in Quantum Irregular Scattering*, Phys. Rev. Lett. **67** (1991) 1949

[61] M. Lüscher und U. Wolff; *How to Calculate the Elastic Scattering Matrix in Two–Dimensional Quantum Field Theories by Numerical Simulation*, Nucl. Phys. **B 339** (1990) 222

[62] M. Marcu, A. Regev und V. Rittenberg; *The Global Symmetries of Spin Systems Defined on Abelian Groups*, J. Math. Phys. **22** (1981) 2740

[63] B. M. McCoy und S. Roan; *Excitation Spectrum and Phase Structure of the Chiral Potts Model*, Phys. Lett. **A 150** (1990) 347

[64] M. L. Mehta; *On the Statistical Properties of the Level–Spacings in Nuclear Spectra*, Nucl. Phys. **18** (1960) 395

[65] M. L. Mehta und M. Gaudin; *On the Density of Eigenvalues of a Random Matrix*, Nucl. Phys. **18** (1960) 420

[66] M. L. Mehta; *Random Matrices and the Statistical Theory of Energy Levels*, Academic Press (1967)

[67] J. von Neumann und E. Wigner; *On the Behavior of Eigenvalues in Adiabatic Processes*, Phys. Z. **30** (1929) 467

[68] L. Onsager; *Crystal Statistics I. A Two–Dimensional Model with an Order–Disorder Transition*, Phys. Rev. **65** (1944) 117

[69] S. Ostlund; *Incommensurate and Commensurate Phases in Asymmetric Clock Models*, Phys. Rev. **B 24** (1981) 398

[70] C. C. Paige; *Accuracy and Effectiveness of the Lanczos Algorithm for the Symmetric Eigenproblem*, Linear Algebra and Its Applications **34** (1980) 235

[71] J. H. H. Perk; *Star Triangle–Equations, Quantum Lax Pairs, and higher Genus Curves*, in : *Theta Functions Bowdoin* 1987, Proc. Symposia in Pure Mathematics **49** (Am. Math. Soc., Providence, RI, 1989)

[72] O. Perron; *Zur Theorie der Matrices*, Math. Ann. **64** (1907) 248

[73] D. Poilblanc, T. Ziman, J. Bellissard, F. Mila und G. Montambaux; *Poisson vs. GOE Statistics in Integrable and Non–Integrable Quantum Hamiltonians*, Europhys. Lett. **22** (1993) 537

[74] C. E. Porter; *Statistical Theories of Spectra. Fluctuations, Perspectives in Physics*, Academic Press (1965)

[75] R. Remmert; *Funktionentheorie 1*, Springer–Verlag (1990) 208

[76] L. Ryder; *Quantum Field Theory*, Cambridge University Press (1987) 401

[77] Y. Saad; *Variations on Arnoldi's Method for Computing Eigenelements of Large Unsymmetric Matrices*, Linear Algebra and Its Applications **34** (1980) 269

[78] Y. Saad; *Krylov Subspace Methods for Solving Large Unsymmetric Linear Systems*, Mathematics of Computation Volume **37**, Number 155 (1981) 105

[79] I. R. Sagdeev und A. B. Zamolodchikov; *Numerical Check of the Exact Mass Spectrum of the Scaling Limit of $T = T_c$ Ising Model with Magnetic Field*, Mod. Phys. Lett. **B 3** (1989) 1375

[80] H. R. Schwarz; *Numerische Mathematik*, Teubner–Verlag (1988) 319 Phys. Rev. **B 24** (1981) 5180

[81] J. Stoer und R. Bulirsch; *Numerische Mathematik 2*, Springer–Verlag (1990) 15

[82] T. Vescan, V. Rittenberg und G. von Gehlen; *Anisotropic Phase Transition in the Asymmetric Three–State Clock Model*, J. Phys. **A 19** (1986) 1957

[83] A. B. Zamolodchikov; *Infinite Additional Symmtries in Two–Dimensional Conformal Quantum Field Theory*, Theor. Math. Phys. **65** (1986) 1205

[84] A. B. Zamolodchikov; *Integrals of Motion in Scaling 3–State Potts Model Field Theory*, Int. J. Mod. Phys. **A 3** (1988) 743