

# Quantenspinsysteme mit nicht-diagonalen Randbedingungen

---

Thesis  
zur Erlangung des akademischen Grades  
Master of Science (M.Sc.)  
im Studiengang Physik  
der Bergischen Universität Wuppertal



vorgelegt von  
Dennis Wagner  
1221220

Erstprüfer: Prof. Dr. Andreas Klümper  
Zweitprüfer: PD Dr. Michael Karbach

Wuppertal, den 29.09.2017

# Inhaltsverzeichnis

<b>1</b>	<b>Einleitung</b>	<b>3</b>
<b>2</b>	<b>Beschreibung der behandelten Modelle</b>	<b>4</b>
2.1	Baxter T-Q-Gleichung und „Off-Diagonal Bethe-Ansatz“ . . . . .	4
2.2	XXX-Kette mit periodischen Randbedingungen . . . . .	5
2.3	XXX-Kette mit parallelen Randfeldern . . . . .	7
2.4	XXX-Kette mit nicht-diagonalen Randbedingungen . . . . .	8
2.4.1	Herleitung der Bestimmungsgleichungen für die Eigenwerte der Transfermatrix . . . . .	8
2.4.2	Definition einer inhomogenen T-Q-Gleichung . . . . .	10
2.4.3	Alternative Definition einer inhomogenen T-Q-Gleichung . . . . .	12
<b>3</b>	<b>Mathematische Grundlagen</b>	<b>14</b>
3.1	Fourier-Transformation . . . . .	14
3.2	Faltung und Faltungstheorem . . . . .	14
3.3	Diskrete Fourier-Transformation . . . . .	14
3.4	Residuensatz und Umlaufzahl . . . . .	15
<b>4</b>	<b>XXX-Kette mit periodischen Randbedingungen</b>	<b>16</b>
4.1	Koordinaten-Bethe-Ansatz (N=4) . . . . .	16
4.2	Bethe-Ansatz für die inhomogene T-Q-Gleichung (N=4) . . . . .	17
4.3	Fusionsrelation . . . . .	17
4.4	Nicht-lineare Integralgleichungen (N=4) . . . . .	21
4.5	Lösung der nicht-linearen Integralgleichungen für den Grundzustand (N=4)	23
4.6	Lösung der Integralgleichungen für beliebige Kettenlängen . . . . .	25
4.7	Grundzustandsenergie für beliebige Kettenlängen . . . . .	27
<b>5</b>	<b>XXX-Kette mit nicht-diagonalen Randbedingungen</b>	<b>30</b>
5.1	Versuch zur Bestimmung nicht-linearer Integralgleichungen . . . . .	30
5.2	Versuch zur Bestimmung einer einfacheren inhomogenen T-Q-Gleichung . .	32
5.3	Bestimmung nicht-linearer Integralgleichungen . . . . .	34
<b>6</b>	<b>Fazit</b>	<b>41</b>
<b>7</b>	<b>Literatur</b>	<b>42</b>
<b>8</b>	<b>Anhang</b>	<b>43</b>

# 1 Einleitung

Exakt lösbar Quantenmodelle spielen eine wichtige Rolle in weiten Teilen der Physik. Sie alle gehorchen der Yang-Baxter-Gleichung. Zur Lösung dieser Modelle wurden verschiedene Methoden entwickelt. Drei davon sehr erfolgreiche sind der Koordinaten-Bethe-Ansatz, der algebraische Bethe-Ansatz und die von R.J. Baxter entwickelte T-Q-Methode.

Exakt lösbar Modelle der Festkörperphysik sind unter anderem die Heisenberg-Spin-1/2-Ketten. Diese lassen sich danach unterscheiden, ob sie die  $U(1)$ -Symmetrie erfüllen oder nicht. Zur ersten Kategorie gehört zum Beispiel die XXX-Kette mit periodischen Randbedingungen. Zur zweiten Kategorie dagegen gehören die XXX- und die XXZ-Kette mit nicht-diagonalen Randbedingungen ([1]). Die meisten Spin-Ketten, die die  $U(1)$ -Symmetrie besitzen, können mit Hilfe des Bethe-Ansatzes gelöst werden. Außerdem kann für diese Modelle Baxters-T-Q-Relation mit polynomialem  $Q$  aufgestellt werden. Der Grund dafür ist, dass ein Referenz-Zustand gefunden werden kann. Dieser kann für Modelle, die die  $U(1)$ -Symmetrie nicht besitzen, meist nicht gefunden werden.

Die von den Autoren des Buches [2] entwickelte Methode, mit dem Namen „Off-Diagonal Bethe Ansatz“, ermöglicht es exakte Lösungen der Modelle ohne  $U(1)$ -Symmetrie zu berechnen. Dazu wird in dem genannten Buch die Methode der T-Q-Relation erweitert. Es wird gezeigt, wie eine inhomogene T-Q-Gleichung mit polynomialem  $Q$  und die zugehörigen Bethe-Ansatz-Gleichungen für entsprechende Modelle aufgestellt werden können. Um dies zu erreichen, werden zwei von den Eigenzuständen unabhängige Eigenschaften der Monodromiematrix genutzt: die Spur (Transfermatrix) und die Determinante (Quantendeterminante). In dieser Arbeit wird die entsprechende Herleitung für die XXX-Kette mit periodischen und nicht-diagonalen Randbedingungen kurz wiedergegeben. Für ein genaueres Studium des „Off-Diagonal Bethe Ansatz“ sei jedoch ausdrücklich auf [2] verwiesen.

Das Ziel der vorliegenden Arbeit ist es, die im oben genannten Buch erläuterten inhomogenen T-Q-Gleichungen und die entsprechenden Lösungen der Bethe-Ansatz-Gleichungen für kleine Kettenlängen zu nutzen, um nicht lineare Integralgleichungen aufstellen und die Grundzustandsenergie für beliebige Kettenlängen bestimmen zu können. Dies wird zunächst für die XXX-Kette mit periodischen Randbedingungen versucht, da die Lösung dieses Modells bekannt ist und somit mit dem in dieser Arbeit erlangten Ergebnis verglichen werden kann. Außerdem stellt die XXX-Kette mit periodischen Randbedingungen einen guten Einstieg in die Thematik dar.

Im zweiten Teil wird versucht ein ähnliches Vorgehen für die XXX-Kette mit nicht-diagonalen (offenen) Randbedingungen aufzustellen, die durch beliebige Magnetfelder am Rand der Kette realisiert werden. Dies ist der eigentlich interessante Fall, da in diesem Modell die  $U(1)$ -Symmetrie gebrochen ist und das Vorgehen über den „Off-Diagonal Bethe Ansatz“ somit erforderlich ist.

## 2 Beschreibung der behandelten Modelle

Zu Beginn wird Baxters T-Q-Gleichung kurz wiedergegeben. Anschließend werden die behandelten Spin-1/2-Ketten mit den entsprechenden Randbedingungen und die im Verlauf dieser Arbeit verwendeten inhomogenen T-Q-Gleichungen erläutert. Die Kettenlänge der Spin-Ketten wird mit  $N$  bezeichnet.

### 2.1 Baxter T-Q-Gleichung und „Off-Diagonal Bethe-Ansatz“

Die von R.J. Baxter für das Sechs- und Acht-Vertex-Modell vorgeschlagene T-Q-Relation besagt, dass die Eigenwerte der Transfermatrix  $T$  immer durch folgende Gleichung beschrieben werden können ([3]):

$$T(u) = a(u) \frac{Q(u - \eta)}{Q(u)} + d(u) \frac{Q(u + \eta)}{Q(u)} \quad (1)$$

In der Literatur, wie zum Beispiel in [2], wird die Transfermatrix meist mit  $T$  und die Eigenwerte der Transfermatrix mit  $\Lambda$  bezeichnet. In der vorliegenden Arbeit wird auf diese Unterscheidung verzichtet. Mit  $T(u)$  wird hier sowohl die Relation für die Eigenwerte der Transfermatrix, als auch im Verlaufe der Arbeit die Transfermatrix selber, bezeichnet. Der Parameter  $\eta$  wird als „crossing parameter“ bezeichnet und im Folgenden gleich 1 gewählt. Für integrable Modelle, die einen geeigneten Referenz-Zustand besitzen, können Funktionen  $a(u)$ ,  $d(u)$  und  $Q(u)$  gefunden werden, sodass die T-Q-Gleichung (1) erfüllt ist. Dabei kann insbesondere die Funktion  $Q(u)$  als Polynom ausgedrückt werden.

$$Q(u) = \prod_{l=1}^M f(u - \mu_l) \quad (2)$$

Die Parameter  $\{\mu_j : j = 1, \dots, M\}$  werden Bethe-Wurzeln genannt. Bei eindimensionalen Spin-Ketten bezeichnet, ausgehend vom Referenz-Zustand komplett ausgerichteter Spins,  $M$  die Anzahl der im Vergleich zum Referenz-Zustand umgeklappten Spins des jeweiligen Zustands.

Die Regularität von  $T(u)$  erfordert, dass die Nullstellen von  $Q(u)$  auch Nullstellen des Zählers in Gleichung (1) sind, was gleichbedeutend damit ist, dass die sogenannte Bethe-Ansatz-Gleichung erfüllt ist.

$$T(\mu_j)Q(\mu_j) = a(\mu_j)Q(\mu_j - 1) + d(\mu_j)Q(\mu_j + 1) = 0 \quad \forall j = 1, \dots, M \quad (3)$$

Für Modelle, die die  $U(1)$ -Symmetrie nicht besitzen und für die deshalb kein offensichtlicher Referenz-Zustand gefunden werden kann, kann dennoch eine Funktionalgleichung ähnlich wie in Gleichung (1) für das Spektrum gefunden werden. Dazu wird der so genannte „Off-Diagonal Bethe-Ansatz“ ([2]) genutzt. Die Eigenzustände können dann aus den Eigenwerten berechnet werden (siehe [2], Kapitel 4 und 5). Die Idee des „Off-Diagonal Bethe-Ansatz“ fußt auf der allgemeinen Form der Eigenwerte, die durch ein Polynom vom Grad  $N$  beschrieben werden.

$$T(u) = T_0 \prod_{l=1}^N f(u - u_l) \quad (4)$$

Die Werte  $\{u_j : j = 1, \dots, N\}$  können durch  $N$  zu bestimmende Gleichungen für  $T(u)$  berechnet werden. Die Konstante  $T_0$  kann aus der Asymptotik von  $T(u)$  abgeleitet werden. Beim „Off-Diagonal Bethe-Ansatz“ wird zur Bestimmung dieser Gleichungen die Transfermatrix und die Quantendeterminante genutzt, zwei von der gewählten Basis und den Eigenzuständen unabhängige Größen. Auf diese Weise lässt sich für Modelle, die keine  $U(1)$ -Symmetrie aufweisen, eine leicht kompliziertere Form von Gleichung (1), die sogenannte inhomogene T-Q-Gleichung, aufstellen. Diese hat im Gegensatz zu Gleichung (1) noch einen dritten Summanden. Der große Vorteil dieser Gleichung ist allerdings, dass darin ein polynomiales  $Q(u)$  vorkommt (siehe Kapitel (2.4)). Dies wird im Verlauf dieser Arbeit von besonderer Bedeutung sein.

## 2.2 XXX-Kette mit periodischen Randbedingungen

Für die XXX-Kette (Antiferromagnet) mit periodischen Randbedingungen

$$H = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^N \sigma_j \cdot \sigma_{j+1} \quad (5)$$

wird die Herleitung der Transfermatrix wiedergegeben (siehe [2]). Die allgemeine R-Matrix

$$R_{i,j}(u) = u + P_{i,j} = u + \frac{1}{2}(1 + \sigma_j \cdot \sigma_i) = \begin{pmatrix} u+1 & & & \\ & u & 1 & \\ & 1 & u & \\ & & & u+1 \end{pmatrix} \quad (6)$$

mit  $\eta = 1$ ,  $\sigma_j = (\sigma_j^x, \sigma_j^y, \sigma_j^z)$  und dem Permutationsoperator  $P_{i,j}$  erfüllt folgende Relationen, wie leicht gezeigt werden kann:

- Anfangsbedingung:  $R_{1,2}(0) = P_{1,2}$
- Unitaritätsrelation:  $R_{1,2}(u)R_{2,1}(-u) = (-u^2 + 1)$
- „Crossing“-Relation:  $R_{1,2}(u) = -\sigma_1^y R_{1,2}^{t_1}(-u-1)\sigma_1^y$
- PT-Symmetrie:  $R_{1,2}(u) = R_{2,1}(u) = R_{1,2}^{t_1 t_2}(-u-1)$
- $Z_2$ -Symmetrie:  $\sigma_1^\alpha \sigma_2^\alpha R_{1,2}(u) = R_{1,2}(u)\sigma_1^\alpha \sigma_2^\alpha$
- Fusionsbedingung:  $R_{1,2}(\pm 1) = \pm 1 + P_{1,2} = \pm 2P_{1,2}^{(\pm)}$

Die Mondromiematrix  $t_0(u)$  und die Transfermatrix  $T(u)$  sind durch folgende Gleichung gegeben:

$$t_0(u) = R_{0,N}(u - \Theta_N) \cdots R_{0,1}(u - \Theta_1) \quad (7)$$

$$T(u) = \text{tr}_0 t_0(u) \quad (8)$$

Dabei sind  $\{\Theta_j : j = 1, \dots, N\}$  ortsabhängige Inhomogenitätsparameter. Der Hamilton-Operator in Gleichung (5) kann nun durch die Transfermatrix ausgedrückt werden.

$$H = \left. \frac{\partial \ln T(u)}{\partial u} \right|_{u=0, \{\Theta_j=0\}} - \frac{N}{2} \quad (9)$$

Wie die Autoren in [2] beweisen, kann jedes, die Eigenwerte der Transfermatrix beschreibende Polynom  $T(u)$ , welches folgende Relationen erfüllt, in einer T-Q-Gleichung wie in Gleichung (1) mit einem Polynom  $Q(u)$  geschrieben werden.

- $T(\Theta_j)T(\Theta_j - 1) = a(\Theta_j)d(\Theta_j - 1)$  für  $j = 1, \dots, N$
- $T(u)$  ist ein Polynom in  $u$  vom Grad  $N$
- $T(u) \xrightarrow{u \rightarrow \pm\infty} 2u^N$

Diese Parametrisierung der Eigenwerte der Transfermatrix ist jedoch nicht eindeutig. Deshalb kann nicht nur eine homogene T-Q-Gleichung (1), sondern auch eine inhomogene T-Q-Gleichung mit einem dritten Summanden gefunden werden. Es kann gezeigt werden, dass die folgende inhomogene T-Q-Gleichung auch die obigen Bedingungen erfüllt:

$$T(u) = e^{i\phi} a(u) \frac{Q(u-1)}{Q(u)} + e^{-i\phi} d(u) \frac{Q(u+1)}{Q(u)} + 2(1 - \cos \phi) \frac{a(u)d(u)}{Q(u)} \quad (10)$$

$$d(u) = \prod_{l=1}^N (u - \Theta_l) \quad a(u) = \prod_{l=1}^N (u - \Theta_l + 1) \quad Q(u) = \prod_{l=1}^N (u - \mu_l) \quad (11)$$

Der Parameter  $\Phi \in \mathbb{C}$  steht für die Inhomogenität der T-Q-Relation und kann beliebig gewählt werden. Für  $\Phi \rightarrow 0$  geht die inhomogene T-Q-Gleichung (10) in die homogene T-Q-Gleichung (1) über. Die Bethe-Ansatz-Gleichung ist durch folgende Gleichung gegeben:

$$e^{i\phi}a(\mu_j)Q(\mu_j-1)+e^{-i\phi}d(\mu_j)Q(\mu_j+1)+2(1-\cos\phi)a(\mu_j)d(\mu_j)=0 \quad \forall j=1,\dots,N \quad (12)$$

Der systematische Unterschied im Vergleich zur Bethe-Ansatz-Gleichung für die homogene T-Q-Gleichung (3) liegt darin, dass  $Q(u)$  im inhomogenen Fall immer von Ordnung  $N$  ist, während es für den homogenen Fall von Ordnung  $M \leq \frac{N}{2}$  ist. Dies zeigt, dass für die XXX-Kette mit periodischen Randbedingungen die Vorgehensweise über eine inhomogene T-Q-Gleichung komplizierter ist und keinen Vorteil bietet. Dieser wird sich erst für die nicht-diagonalen Randbedingungen zeigen.

Es gelten folgende Auswahlregeln für die Bethe-Wurzeln bei der XXX-Kette mit periodischen Randbedingungen, die aus dem Koordinaten-Bethe-Ansatz folgen (siehe [2] Kapitel 2.1.2):

$$\mu_j \neq \mu_l \text{ für } j \neq l \quad \mu_j \neq 0, -1 \quad \forall j=1,\dots,N \quad (13)$$

Die Energie kann hier auch wieder über die Transfermatrix berechnet werden.

$$E = \left. \frac{\partial \ln T(u)}{\partial u} \right|_{u=0, \{\Theta_j=0\}} - \frac{N}{2} = - \sum_{j=1}^N \frac{1}{\lambda_j^2 + 1/4} + \frac{N}{2} \quad (14)$$

Dabei ist  $\lambda_j = -i\mu_j - \frac{1}{2}$ . Der dritte Term der inhomogenen T-Q-Gleichung (10) ist für Gleichung (14) irrelevant, wie leicht nachgerechnet werden kann.

### 2.3 XXX-Kette mit parallelen Randfeldern

Zur Überprüfung der Ergebnisse für die XXX-Kette mit beliebigen Randfeldern wird in Kapitel 5.2 die XXX-Kette mit parallelen Randfeldern  $\mathbf{h}_1$  und  $\mathbf{h}_N$  betrachtet.

$$H = \sum_{j=1}^{N-1} \sigma_j \sigma_{j+1} + h_1 \cdot \sigma_1^z + h_N \cdot \sigma_N^z \quad (15)$$

Da dieses System die U(1)-Symmetrie erfüllt, kann die homogene T-Q-Gleichung (1) angegeben werden. Diese ist mit den folgenden Funktionen erfüllt (siehe [2] Kapitel 2.2.1).

$$\begin{aligned}
a(u) &= \frac{2u+2}{2u+1}(u+p)(u+q)(u+1)^{2N} \\
d(u) &= \frac{2u}{2u+1}(u-p+1)(u-q+1)u^{2N} = a(-u-1) \\
Q(u) &= \prod_{l=1}^N (u-\lambda_l)(u+\lambda_l+1)
\end{aligned} \tag{16}$$

Dabei ist  $p = \frac{1}{h_1}$ ,  $q = \frac{1}{h_N^z}$ ,  $\lambda_l = i\mu_l - \frac{1}{2}$ . Die Eigenwerte des Hamilton-Operators sind hier gegeben durch:

$$E = \frac{1}{2pq} \left. \frac{\partial \ln T(u)}{\partial u} \right|_{u=0} - N = - \sum_{j=1}^N \frac{2}{\mu_j^2 + 1/4} + N - 1 + \frac{1}{p} + \frac{1}{q} \tag{17}$$

Für dieses Modell kann natürlich auch eine inhomogene T-Q-Gleichung angegeben werden. Allerdings wird hier nur die Lösung für kleine Kettenlängen benötigt, um später die Lösung für nicht-diagonale Randbedingungen (siehe Kapitel 5.2) bei kleinem Parameter  $\xi$  vergleichen zu können. Deshalb wird für dieses Modell nur die homogene T-Q-Gleichung genutzt. Die Bethe-Wurzeln werden aus Gleichung (3) berechnet.

## 2.4 XXX-Kette mit nicht-diagonalen Randbedingungen

Die XXX-Kette mit beliebigen Randfeldern ist eines der Modelle, für die der „Off-Diagonal Bethe-Ansatz“ erfunden wurde, da durch die Randfelder die U(1)-Symmetrie verletzt wird. Im ersten Teil dieses Kapitels wird die Herleitung der Bestimmungsgleichungen für die Eigenwerte der Transfermatrix wiedergegeben ([2]). Anschließend werden zwei mögliche Lösungen der Bestimmungsgleichungen beschrieben.

### 2.4.1 Herleitung der Bestimmungsgleichungen für die Eigenwerte der Transfermatrix

Der Hamilton-Operator der XXX-Kette mit nicht-diagonalen Randbedingungen ist durch folgende Gleichung gegeben:

$$H = \sum_{j=1}^{N-1} J(\sigma_j^x \sigma_{j+1}^x + \sigma_j^y \sigma_{j+1}^y + \sigma_j^z \sigma_{j+1}^z) + \mathbf{h}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_1 + \mathbf{h}_N \cdot \boldsymbol{\sigma}_N \tag{18}$$

Dabei sind  $\mathbf{h}_1$  und  $\mathbf{h}_N$  die Randfelder und die Kopplungskonstante wird  $J = 1$  gewählt. Im Folgenden werden die Parameter  $p = \frac{1}{h_1}$ ,  $q = \frac{1}{h_N^z}$  und  $\xi = h_N^x q$  genutzt. Dieser Hamilton-

Operator erfüllt eine globale  $SU(2)$ -Transformation, die es ermöglicht  $\mathbf{h}_1$  entlang der z-Achse und  $\mathbf{h}_N$  in die x-z-Ebene zu legen.

$$H = \sum_{j=1}^{N-1} \sigma_j \sigma_{j+1} + h_1 \cdot \sigma_1^z + h_N^x \cdot \sigma_N^x + h_N^z \cdot \sigma_N^z \quad (19)$$

Im Folgenden werden die Parameter  $p = \frac{1}{h_1}$ ,  $q = \frac{1}{h_N^z}$  und  $\xi = h_N^x q$  genutzt. Es werden zunächst zwei sogenannte K-Matrizen definiert. Eine genauere Beschreibung dieser K-Matrizen kann [4] entnommen werden.

$$K^-(u) = \begin{pmatrix} p+u & 0 \\ 0 & p-u \end{pmatrix} \quad (20)$$

$$K^+(u) = \begin{pmatrix} q+u+1 & \xi(u+1) \\ \xi(u+1) & q-u-1 \end{pmatrix} \quad (21)$$

Auch hier wird der „Crossing“-Parameter gleich 1 gewählt. Diese beiden K-Matrizen erfüllen mit der R-Matrix aus (6) die folgende, sogenannte „reflection equation“ bzw. „dual reflection equation“, die die Integrabilität garantieren.

$$R_{1,2}(u-v)K_1^-(u)R_{2,1}(u+v)K_2^-(v) = K_2^-(v)R_{1,2}(u+v)K_1^-(u)R_{2,1}(u-v) \quad (22)$$

$$R_{1,2}(-u+v)K_1^+(u)R_{2,1}(-u-v-2)K_2^+(v) = K_2^+(v)R_{1,2}(-u-v-2)K_1^-(u)R_{2,1}(u-v) \quad (23)$$

Nun werden, im Unterschied zu dem Fall der periodischen Randbedingungen, zwei Monodromiematrizen definiert.

$$t_0(u) = R_{0,N}(u - \Theta_N) \cdots R_{0,1}(u - \Theta_1) \quad (24)$$

$$\hat{t}_0(u) = R_{1,0}(u + \Theta_1) \cdots R_{N,0}(u + \Theta_N) \quad (25)$$

Außerdem wird eine „double-row monodromy matrix“ definiert. Dementsprechend werden die Monodromiematrizen in Gleichung (24) und (25) auch als „one-row monodromy matrix“ bezeichnet.

$$\mathcal{T}_0(u) = t_0(u)K_0^-(u)\hat{t}_0(u) \quad (26)$$

Daraus ergibt sich die Transfermatrix, aus deren Definition auch der Grund für den Namen „Off-Diagonal Bethe-Ansatz“ folgt. Die Transfermatrix enthält hier nämlich wegen der K-Matrix  $K^+(u)$  nicht-diagonale Terme.

$$T(u) = \text{tr}_0(K_0^+(u)\mathcal{T}_0(u)) \quad (27)$$

Der Hamilton-Operator kann nun wieder durch die logarithmische Ableitung der Transfermatrix ausgedrückt werden.

$$E = \left. \frac{\partial \ln T(u)}{\partial u} \right|_{u=0, \{\Theta_j=0\}} - N \quad (28)$$

Die Eigenwerte der Transfer-Matrix müssen, wie in [2] gezeigt wird, folgende Bestimmungsgleichungen erfüllen:

- „crossing-relation“ :  $T(-u - 1) = T(u)$
- Anfangsbedingung:  $T(0) = 2pq \prod_{j=1}^N (1 - \Theta_j)(1 + \Theta_j) = T(-1)$
- Asymptotik :  $T(u) \xrightarrow{u \rightarrow \pm\infty} 2u^{2N+2}$
- Relation der Quantendeterminante :  
 $T(\Theta_j)T(\Theta_j - 1) = \frac{\Delta_q(\Theta_j)}{(1-2\Theta_j)(1+2\Theta_j)} = a(\Theta_j)d(\Theta_j - 1)$   
für  $j = 1, \dots, N$

Die im Vergleich zu den Bestimmungsgleichungen für die XXX-Kette mit periodischen Randbedingungen hinzukommende „crossing-relation“ sorgt dafür, dass die Relation für die Quantendeterminante  $2N$ -Gleichungen liefert. Zusammen mit den beiden Gleichungen für die Anfangsbedingung und die Asymptotik kann  $T(u)$  somit vollständig bestimmt werden.

#### 2.4.2 Definition einer inhomogenen T-Q-Gleichung

In [2] wird am Ende von Kapitel 2.2.1 als Lösung der obigen Bestimmungsgleichungen folgende inhomogene T-Q-Gleichung angesetzt:

$$T(u) = a(u) \frac{Q(u-1)}{Q(u)} + d(u) \frac{Q(u+1)}{Q(u)} + 2[1 - (1 + \xi^2)^{\frac{1}{2}}] u(u+1) \frac{\prod_{l=1}^N (u + \Theta_l)(u - \Theta_l)(u + \Theta_l + 1)(u - \Theta_l + 1)}{Q(u)} \quad (29)$$

$$\begin{aligned} a(u) &= \frac{2u+2}{2u+1} (u+p) [(1 + \xi^2)^{\frac{1}{2}} u + q] \prod_{l=1}^N (u + \Theta_l + 1)(u - \Theta_l + 1) \\ d(u) &= \frac{2u}{2u+1} (u-p+1) [(1 + \xi^2)^{\frac{1}{2}} (u+1) - q] \prod_{l=1}^N (u + \Theta_l)(u - \Theta_l) = a(-u-1) \\ Q(u) &= \prod_{l=1}^N (u - \mu_l)(u + \mu_l + 1) \end{aligned} \quad (30)$$

Im Limes  $\Theta_j \rightarrow 0$  ( $\forall j = 1, \dots, N$ ) ergibt sich eine kompaktere Schreibweise der inhomogenen T-Q-Gleichung.

$$\begin{aligned} T(u) &= \frac{2(u+1)^{2N+1}}{2u+1} (u+p) [(1 + \xi^2)^{\frac{1}{2}} u + q] \frac{Q(u-1)}{Q(u)} \\ &+ \frac{2u^{2N+1}}{2u+1} (u-p+1) [(1 + \xi^2)^{\frac{1}{2}} (u+1) - q] \frac{Q(u+1)}{Q(u)} \\ &+ 2[1 - (1 + \xi^2)^{\frac{1}{2}}] \frac{[u(u+1)]^{2N+1}}{Q(u)} \end{aligned} \quad (31)$$

Die Bethe-Wurzeln werden auch hier wieder aus der Bethe-Ansatz-Gleichung bestimmt.

$$a(\mu_j)Q(\mu_j-1) + d(\mu_j)Q(\mu_j+1) + 2[1 - (1 + \xi^2)^{\frac{1}{2}}] [\mu_j(\mu_j+1)]^{2N+1} = 0 \quad \forall j = 1, \dots, N \quad (32)$$

Dabei gelten folgende Auswahlregeln:

$$\mu_j \neq \mu_l \text{ f\"ur } j \neq l \quad \mu_j \neq -\mu_l - 1 \quad \forall j = 1, \dots, N \quad (33)$$

Die Energie kann hier auch wieder aus der logarithmischen Ableitung der Transfermatrix

berechnet werden.

$$E = \frac{\partial \ln T(u)}{\partial u} \Big|_{u=0, \{\Theta_j=0\}} - N = \sum_{j=1}^N \frac{2}{\mu_j(\mu_j + 1)} + N - 1 + \frac{1}{p} + \frac{(1 + \xi^2)^{\frac{1}{2}}}{q} \quad (34)$$

### 2.4.3 Alternative Definition einer inhomogenen T-Q-Gleichung

In [2] wird außerdem zu Beginn von Kapitel 5.1.5 eine alternative inhomogene T-Q-Gleichung definiert.

$$T(u) = a(u) \frac{Q_1(u-1)}{Q_2(u)} + d(u) \frac{Q_2(u+1)}{Q_1(u)} + 2[(-1)^N - (1 + \xi^2)^{\frac{1}{2}}] u(u+1) \cdot \frac{\prod_{l=1}^N (u + \Theta_l)(u - \Theta_l)(u + \Theta_l + 1)(u - \Theta_l + 1)}{Q_1(u)Q_2(u)} \quad (35)$$

Dabei sind die Funktionen  $a(u)$  und  $d(u)$  in Gleichung (30) definiert. Die Funktionen  $Q_1(u)$  und  $Q_2(u)$  haben folgende Form:

$$Q_1(u) = \prod_{l=1}^N (u - \mu_l) \quad Q_2(u) = (-1)^N \prod_{l=1}^N (u + \mu_l + 1) \quad (36)$$

Im Limes  $\Theta_j \rightarrow 0$  ( $\forall j = 1, \dots, N$ ) ergibt sich eine kompaktere Schreibweise der inhomogenen T-Q-Gleichung.

$$T(u) = \frac{2(u+1)^{2N+1}}{2u+1} (u+p)[(1 + \xi^2)^{\frac{1}{2}}u + q] \frac{Q_1(u-1)}{Q_2(u)} + \frac{2u^{2N+1}}{2u+1} (u-p+1)[(1 + \xi^2)^{\frac{1}{2}}(u+1) - q] \frac{Q_2(u+1)}{Q_1(u)} + 2[(-1)^N - (1 + \xi^2)^{\frac{1}{2}}] \frac{[u(u+1)]^{2N+1}}{Q_1(u)Q_2(u)} \quad (37)$$

Die Berechnung der Bethe-Wurzeln über die Bethe-Ansatz-Gleichung

$$d(\mu_j)Q_2(\mu_j+1)Q_2(\mu_j) + 2[(-1)^N - (1 + \xi^2)^{\frac{1}{2}}] [\mu_j(\mu_j+1)]^{2N+1} = 0 \quad \forall j = 1, \dots, N \quad (38)$$

mit den Auswahlregeln aus Gleichung (33) erlaubt die Berechnung der Energiewerte.

$$E = \frac{\partial \ln T(u)}{\partial u} \Big|_{u=0, \{\Theta_j=0\}} - N = - \sum_{j=1}^N \frac{2}{\mu_j + 1} + N - 1 + \frac{1}{p} + \frac{(1 + \xi^2)^{\frac{1}{2}}}{q} \quad (39)$$

### 3 Mathematische Grundlagen

Zunächst werden die in der vorliegenden Arbeit benutzten Konventionen für die häufig auftretende Fourier-Transformation und die Faltung beschrieben. Der Residuensatz wird in Kapitel 5.3 zur Bestimmung der nicht-linearen Integralgleichungen gebraucht.

#### 3.1 Fourier-Transformation

Für die Fourier-Transformation werden die folgenden Gleichungen benutzt, die ohne Vorfaktoren auskommen:

$$\mathcal{F}[h(u)](p) = \int_{-\infty}^{\infty} h(u) \cdot e^{-2\pi i p u} du \quad (40)$$

$$h(u) = \int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{F}[h(u)](p) \cdot e^{2\pi i p u} dp \quad (41)$$

#### 3.2 Faltung und Faltungstheorem

Die Faltung ist durch die folgende Gleichung definiert:

$$(h * f)(u) = \int_{-\infty}^{\infty} h(y) f(u - y) dy \quad (42)$$

Für das Faltungstheorem gilt mit der oben verwendeten Konvention für die Fourier-Transformation auch hier eine ohne Vorfaktoren auskommende Gleichung:

$$\mathcal{F}[(h * f)(u)](p) = \mathcal{F}[h(u)](p) \cdot \mathcal{F}[f(u)](p) \quad (43)$$

#### 3.3 Diskrete Fourier-Transformation

Die MATLAB-Funktionen zur Realisierung der diskreten Fourier-Transformation, die den Algorithmus, der unter dem Namen „fast Fourier transform (FFT)“ bekannt ist, benutzen, sind durch folgende Gleichungen gegeben:

$$X(k) = \sum_{l=1}^n x(l) \cdot e^{\frac{-2\pi i(l-1)(k-1)}{n}} \quad (44)$$

$$x(l) = \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n X(k) \cdot e^{\frac{2\pi i(l-1)(k-1)}{n}} \quad (45)$$

Dabei sind  $x$  und  $X$  Arrays der Länge  $n$ . Die FFT ist besonders schnell, falls  $n$  eine Zweierpotenz ist.

### 3.4 Residuensatz und Umlaufszahl

Der Residuensatz ist ein wichtiger Satz der Funktionentheorie. Die Definition des Satzes wird aus [5] übernommen:

Sei  $G \subset \mathbb{C}$  ein einfach zusammenhängendes Gebiet,  $D \subset G$  diskret,  $\gamma$  ein geschlossener Integrationsweg in  $G$  mit  $|\gamma| \cap D = \emptyset$  und  $f : G \setminus D \rightarrow \mathbb{C}$  holomorph. Dann gilt:

$$\frac{1}{2\pi i} \int_{\gamma} f(\zeta) d\zeta = \sum_{z \in G} n(\gamma, z) \operatorname{res}_z(f) \quad (46)$$

Dabei ist  $n(\gamma, z)$  die Umlaufszahl des Integrationsweges  $\gamma : [a, b] \rightarrow \mathbb{C}$  ( $z \notin |\gamma|$ ) bezüglich des Punktes  $z$ .

$$n(\gamma, z) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\gamma} \frac{d\zeta}{\zeta - z} \quad (47)$$

## 4 XXX-Kette mit periodischen Randbedingungen

In diesem Kapitel wird die XXX-Kette mit periodischen Randbedingungen behandelt. Dazu wird zunächst die Lösung des Koordinaten-Bethe-Ansatzes für die Kettenlänge  $N = 4$  beschrieben. Anschließend wird die Lösung über die inhomogene T-Q-Gleichung (10) bestimmt. Das Ergebnis wird genutzt um mit Hilfe einer Fusionsrelation nicht-lineare Integralgleichungen für  $N = 4$  aufzustellen. Diese Gleichungen ermöglichen dann auch die Bestimmung der Relation für die Eigenwerte der Transfermatrix für beliebige Kettenlängen. Der Eigenwert für die Grundzustandsenergie für beliebige Kettenlängen wird berechnet und mit dem bekannten Ergebnis verglichen.

### 4.1 Koordinaten-Bethe-Ansatz (N=4)

Das Vorgehen zur Lösung der XXX-Kette mit periodischen Randbedingungen mit Hilfe des Koordinaten-Bethe-Ansatzes wird in [6] beschrieben. Hier wird dieses Vorgehen für die Berechnung der Energien bei der Kettenlänge  $N = 4$  skizziert. Ein Vergleich des in [6] zu findenden Hamilton-Operators und Gleichung (5) liefert für die Kopplungskonstante einen Wert von  $J = -2$ . Für den Eigenzustand, bei dem alle Spins in die gleiche Richtung ausgerichtet sind, gilt:

$$E_F = -\frac{JN}{4} = 2 \quad (48)$$

Wird ein Spin umgeklappt, so ergeben sich für diesen Zustand folgende mögliche Energiewerte:

$$E = E_F + J(1 - \cos k) \stackrel{N=4}{=} 0, -2, 0 \quad k = \frac{2\pi m}{N}, \quad m = 1, \dots, N-1 \quad (49)$$

Wird noch ein weiterer Spin umgeklappt, so ergibt sich unter anderem der Zustand mit dem niedrigsten Energiewert.

$$E = E_F + J \sum_{j=1}^{M=2} (1 - \cos k_j) \stackrel{N=4}{=} -4, 0 \quad (50)$$

Die Bethe-Quantenzahlen  $k_j$  sind [6] zu entnehmen. Um sie zu erhalten muss ein Gleichungssystem aus drei Gleichungen gelöst werden. Das Vorgehen zur Lösung dieses Gleichungssystems wird auch in [6] beschrieben. Die Entartung folgt aus der Erhaltung des Gesamtspins  $S_T^z = \sum_{n=1}^N S_n^z$ . Alle Eigenzustände sind  $2S_T + 1$ -fach entartet. Die Resultate werden in Tabelle 1 zusammengefasst.

Tabelle 1: Energie und Entartung der Zustände der periodischen XXX-Kette ( $N = 4$ )

Zustand	Energie	Entartung
$ \uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\rangle$	2	5
$ \uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle$	0	3
$ \uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle$	-2	3
$ \uparrow\downarrow\downarrow\downarrow\rangle$	0	3
$ \uparrow\downarrow\downarrow\downarrow\rangle$	0	1
$ \uparrow\downarrow\downarrow\downarrow\rangle$	-4	1

## 4.2 Bethe-Ansatz für die inhomogene T-Q-Gleichung (N=4)

Nun wird die inhomogene T-Q-Gleichung (10) betrachtet. Um die Bethe-Wurzeln für die Kettenlänge  $N = 4$  berechnen zu können, wird Gleichung (12) numerisch gelöst (siehe Tabelle 6). Dazu werden die Auswahlregeln (13) beachtet, da sich ansonsten viele Resultate ergeben, die keiner physikalischen Lösung entsprechen. Die Energieeigenwerte werden mit Gleichung (14) bestimmt. Diese und der Grad der Entartung stimmen mit Tabelle (1) überein. Die Zustände können entsprechend identifiziert werden. Die Lösungen aus [2] (Tabelle 1.2) sind identisch mit Tabelle 6.

## 4.3 Fusionsrelation

Da eine Bestimmung der Bethe-Wurzeln für große Kettenlängen numerisch sehr aufwendig ist, wird im folgenden eine Fusionsrelation aufgestellt, die die Berechnung der Grundzustandsenergie für große Kettenlängen erlaubt. Dazu werden die folgenden beiden Gleichungen aus [7] (Anfang des Appendix zu Kapitel 13) mit der inhomogenen T-Q-Gleichung (10) in Einklang gebracht ( $j \in \mathbb{N}$ ,  $T_0(u) = \phi(u)$ ,  $T_{-1} \equiv 0$ ):

$$T_1(u) := q(u - 2i)q(u + 2i) \left[ \frac{e^{-\frac{\beta h}{2}} \Phi(u - i)}{q(u - 2i)q(u)} + \frac{e^{\frac{\beta h}{2}} \Phi(u + i)}{q(u)q(u + 2i)} \right] \quad (51)$$

$$T_j(u) := q(u - (j + 1)i)q(u + (j + 1)i) \sum_{l=0}^j \frac{e^{\frac{(2l-j)\beta h}{2}} \Phi(u + (2l - j)i)}{q(u + (2l - j - 1)i)q(u + (2l - j + 1)i)} \quad (52)$$

Dabei beschreibt  $T_1(u)$  die Eigenwerte der Transfermatrix und  $\Phi(u)$  ein Polynom in  $u$ , dessen genaue Form noch bestimmt werden muss. Aus den Gleichungen (51) und (52) wird folgender Zusammenhang bewiesen:

$$T_j(u) T_1(u + (j + 1)i) = \Phi(u + ji) T_{j+1}(u + i) + \Phi(u + (j + 2)i) T_{j-1}(u - i) \quad (53)$$

Die Transfermatrix ist hier im Unterschied zu Gleichung (10) und (11) wie folgt definiert:

$$T(u) = e^{i\phi} a(u) \frac{Q(u - i)}{Q(u)} + e^{-i\phi} d(u) \frac{Q(u + i)}{Q(u)} + 2(1 - \cos \phi) \frac{a(u)d(u)}{Q(u)} \quad (54)$$

$$d(u) = \prod_{l=1}^N (u - i\Theta_l) \quad a(u) = \prod_{l=1}^N (u - i\Theta_l + i) \quad Q(u) = \prod_{l=1}^N (u - i\mu_l) \quad (55)$$

Die Umrechnung zwischen dieser Notation aus [7] und der aus [2] (siehe dazu Gleichung (10)) geschieht über eine neue Definition von Funktionen und eine Drehung des Arguments  $u$  (siehe auch Abbildung 1 und 2):

$$\tilde{T}_j(u) := T_j(iu) \quad \tilde{\Phi}_j(u) := \Phi_j(iu) \quad \tilde{u} := -iu \quad \Rightarrow \quad \tilde{T}_j(\tilde{u}) = T_j(u) \quad (56)$$

Die Lage der Bethe-Wurzeln ändert sich dadurch natürlich auch.

$$\tilde{T}_1(\mu_j) \tilde{Q}(\mu_j) = 0 \quad \Leftrightarrow \quad T_1(i\mu_j) Q(i\mu_j) = 0 \quad (57)$$

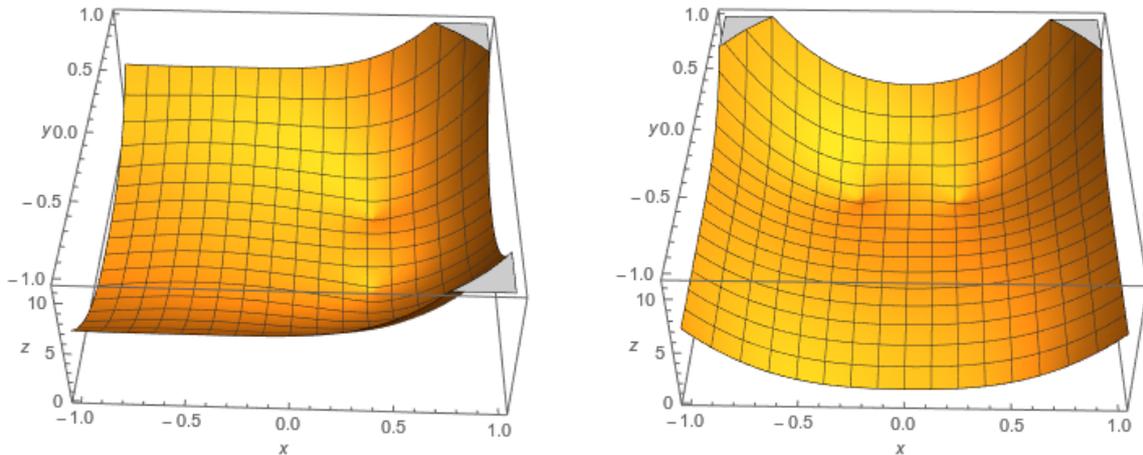


Abbildung 1:  $T_1(u)$  (links) und  $\tilde{T}(u)$  (rechts) für die Bethe-Ansatz-Wurzeln in Zeile 1 von Tabelle 6 zur Veranschaulichung der durch die Notation bewirkten Drehung.

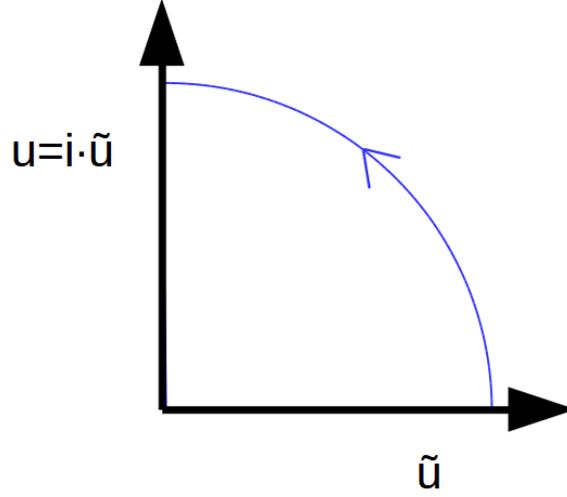


Abbildung 2: Drehung des Arguments

Damit folgt für die Argumente der Funktionen mit beliebigen reellen Verschiebungen  $a \in \mathbb{R}$ :

$$\tilde{T}_j(\tilde{u} + j + a) = \tilde{T}_j(-iu + j + a) = T_j(i\tilde{u} + (j + a)i) = T_j(u + (j + a)i) \quad (58)$$

Gleichung (53) kann nun umgeschrieben werden.

$$\tilde{T}_j(\tilde{u}) \tilde{T}_1(\tilde{u} + (j + 1)) = \tilde{\Phi}(\tilde{u} + j) \tilde{T}_{j+1}(\tilde{u} + 1) + \tilde{\Phi}(\tilde{u} + (j + 2)) \tilde{T}_{j-1}(\tilde{u} - 1) \quad (59)$$

Als Erstes muss überprüft werden, ob die Fusionsrelation in Gleichung (59) auch mit der in dieser Arbeit behandelten inhomogenen T-Q-Gleichung (10) verträglich ist. Diese Gleichung wird zur besseren Übersicht in der neuen Notation wiedergegeben.

$$\tilde{T}_1(\tilde{u}) = e^{i\phi} \tilde{a}(\tilde{u}) \frac{\tilde{Q}(\tilde{u} - 1)}{\tilde{Q}(\tilde{u})} + e^{-i\phi} \tilde{d}(\tilde{u}) \frac{\tilde{Q}(\tilde{u} + 1)}{\tilde{Q}(\tilde{u})} + 2(1 - \cos \phi) \frac{\tilde{a}(\tilde{u})\tilde{d}(\tilde{u})}{\tilde{Q}(\tilde{u})} \quad (60)$$

$$\tilde{a}(\tilde{u}) = \prod_{l=1}^N (\tilde{u} - \Theta_l + 1) \quad \tilde{d}(\tilde{u}) = \prod_{l=1}^N (\tilde{u} - \Theta_l) \quad \tilde{Q}(\tilde{u}) = \prod_{l=1}^N (\tilde{u} - \mu_l) \quad (61)$$

Um zunächst  $\tilde{T}_2(\tilde{u})$  bestimmen zu können, wird Gleichung (60) in Gleichung (59) für  $j = 1$  eingesetzt.

$$\tilde{T}_2(\tilde{u}) = \frac{\tilde{T}_1(\tilde{u}-1) \tilde{T}_1(\tilde{u}+1) - \tilde{\Phi}(\tilde{u}+2) \tilde{\Phi}(\tilde{u}-2)}{\tilde{\Phi}(\tilde{u})} \quad (62)$$

Es ist aber nicht klar, ob dieses Vorgehen eine reguläre Funktion  $\tilde{T}_2(\tilde{u})$  liefert. Die Nullstellen von  $\tilde{\Phi}(\tilde{u})$  müssen dazu auch Nullstellen des Zählers in Gleichung (62) sein. Nach einigem Ausprobieren wird ersichtlich, dass dazu die Verschiebungen in den Argumenten auf der rechten Seite von Gleichung (62) halbiert werden müssen. Wird dies berücksichtigt und außerdem benutzt, dass  $\tilde{a}(\tilde{u}) = \tilde{d}(\tilde{u}+1)$ , so ergibt sich für  $\tilde{T}_2(\tilde{u})$ :

$$\begin{aligned} \tilde{T}_2(\tilde{u}) = & \left[ \left( e^{i\phi} \tilde{d}\left(\tilde{u} + \frac{1}{2}\right) \frac{\tilde{Q}\left(\tilde{u} - \frac{3}{2}\right)}{\tilde{Q}\left(\tilde{u} - \frac{1}{2}\right)} + e^{-i\phi} \tilde{d}\left(\tilde{u} - \frac{1}{2}\right) \frac{\tilde{Q}\left(\tilde{u} + \frac{1}{2}\right)}{\tilde{Q}\left(\tilde{u} - \frac{1}{2}\right)} + 2(1 - \cos \phi) \frac{\tilde{d}\left(\tilde{u} + \frac{1}{2}\right) \tilde{d}\left(\tilde{u} - \frac{1}{2}\right)}{\tilde{Q}\left(\tilde{u} - \frac{1}{2}\right)} \right) \right. \\ & \left( e^{i\phi} \tilde{d}\left(\tilde{u} + \frac{3}{2}\right) \frac{\tilde{Q}\left(\tilde{u} - \frac{1}{2}\right)}{\tilde{Q}\left(\tilde{u} + \frac{1}{2}\right)} + e^{-i\phi} \tilde{d}\left(\tilde{u} + \frac{1}{2}\right) \frac{\tilde{Q}\left(\tilde{u} + \frac{3}{2}\right)}{\tilde{Q}\left(\tilde{u} + \frac{1}{2}\right)} + 2(1 - \cos \phi) \frac{\tilde{d}\left(\tilde{u} + \frac{3}{2}\right) \tilde{d}\left(\tilde{u} + \frac{1}{2}\right)}{\tilde{Q}\left(\tilde{u} + \frac{1}{2}\right)} \right) \\ & \left. - \tilde{\Phi}(\tilde{u}+1) \tilde{\Phi}(\tilde{u}-1) \right] \frac{1}{\tilde{\Phi}(\tilde{u})} \end{aligned} \quad (63)$$

Ausmultiplizieren der rechten Seite von Gleichung (63) ergibt 10 Summanden, von denen 9 den Faktor  $\tilde{d}\left(\tilde{u} + \frac{1}{2}\right)$  enthalten und mit  $S(\tilde{u})\tilde{d}\left(\tilde{u} + \frac{1}{2}\right)$  bezeichnet werden. Lediglich zwei der Summanden enthalten diesen Faktor nicht.

$$\tilde{T}_2(\tilde{u}) = \frac{1}{\tilde{\Phi}(\tilde{u})} \left[ S \cdot \tilde{d}\left(\tilde{u} + \frac{1}{2}\right) + \tilde{d}\left(\tilde{u} + \frac{3}{2}\right) \tilde{d}\left(\tilde{u} - \frac{1}{2}\right) - \tilde{\Phi}(\tilde{u}-1) \tilde{\Phi}(\tilde{u}+1) \right] \quad (64)$$

Eine analytische Funktion  $\tilde{T}_2(\tilde{u})$  ohne Polstellen kann somit gefunden werden, wenn  $\tilde{\Phi}(\tilde{u}) := \tilde{d}\left(\tilde{u} + \frac{1}{2}\right)$  gewählt wird. So modifiziert sehen die Rekursionsgleichung und die Gleichung zur Bestimmung von  $\tilde{T}_2(\tilde{u})$  wie folgt aus:

$$\tilde{T}_j(\tilde{u}) \tilde{T}_1\left(\tilde{u} + \frac{j+1}{2}\right) = \tilde{d}\left(\tilde{u} + \frac{j+1}{2}\right) \tilde{T}_{j+1}\left(\tilde{u} + \frac{1}{2}\right) + \tilde{d}\left(\tilde{u} + \frac{j+3}{2}\right) \tilde{T}_{j-1}\left(\tilde{u} - \frac{1}{2}\right) \quad (65)$$

$$\tilde{T}_2(\tilde{u}) = \frac{\tilde{T}_1\left(\tilde{u} - \frac{1}{2}\right) \tilde{T}_1\left(\tilde{u} + \frac{1}{2}\right) - \tilde{d}\left(\tilde{u} + \frac{3}{2}\right) \tilde{d}\left(\tilde{u} - \frac{1}{2}\right)}{\tilde{d}\left(\tilde{u} + \frac{1}{2}\right)} \quad (66)$$

Nun können alle  $T_j(u)$  für  $j \in \mathbb{N}$  aus Gleichung (65) bestimmt werden.

$$\tilde{T}_{j+1}(\tilde{u}) = \frac{\tilde{T}_j\left(\tilde{u} - \frac{1}{2}\right) \tilde{T}_1\left(\tilde{u} + \frac{j}{2}\right) - \tilde{d}\left(\tilde{u} + \frac{j+2}{2}\right) \tilde{T}_{j-1}(\tilde{u} - 1)}{\tilde{d}\left(\tilde{u} + \frac{j}{2}\right)} \quad (67)$$

Es muss aber noch überprüft werden ob die  $\tilde{T}_j(\tilde{u})$  für  $j \in \mathbb{N}$  reguläre Funktionen ohne Polstellen sind. Die Nullstellen des Nenners in Gleichung (67) müssen also auch Nullstellen des Zählers sein. Dazu muss für alle  $j, k \in \mathbb{N}$  gelten:

$$\tilde{T}_j\left(\Theta_k - \frac{j+1}{2}\right) \cdot \tilde{T}_1(\Theta_k) = \tilde{d}(\Theta_k + 1) \tilde{T}_{j-1}\left(\Theta_k - \frac{j+2}{2}\right) \quad (68)$$

Die Gültigkeit dieser Gleichung kann durch Ersetzen von  $\tilde{T}_j$ , durch den Ausdruck in Gleichung (67), bewiesen werden.

$$\tilde{T}_j\left(\Theta_k - \frac{j+1}{2}\right) \tilde{T}_1(\Theta_k) = \frac{\tilde{T}_{j-1}\left(\Theta_k - \frac{j+2}{2}\right) \tilde{T}_1(\Theta_k - 1) - \tilde{d}(\Theta_k) \tilde{T}_{j-2}(\Theta_k - 1)}{\tilde{d}(\Theta_k - 1)} \cdot \tilde{T}_1(\Theta_k) \quad (69)$$

Mit den Relationen für die Transfermatrix, die in Kapitel (2.2) an den Punkten  $\Theta_k$  und  $\Theta_k - 1$  gelten, kann die Transfermatrix durch  $\tilde{a}(\tilde{u}), \tilde{d}(\tilde{u})$  ausgedrückt werden, wodurch bewiesen wird, dass der erste Summand von Gleichung (69) gleich der rechten Seite von Gleichung (68) ist. Der zweite Summand von Gleichung (69) ist gleich 0, da  $\tilde{d}(\Theta_k) = 0$  ist. Somit gilt Gleichung (68) für alle  $j, k \in \mathbb{N}$ . Das bedeutet, dass alle  $\tilde{T}_j(\tilde{u})$  regulär sind. Damit wurde die Fusionsrelation für die inhomogene T-Q-Gleichung bewiesen.

#### 4.4 Nicht-lineare Integralgleichungen (N=4)

Nun können nicht-lineare Integralgleichungen für  $N = 4$  bestimmt werden. Zunächst wird das allgemeine Vorgehen beschrieben. Im nächsten Kapitel werden dann die genauen Eigenschaften der Funktionen  $Y_j(u)$  für  $N = 4$  benutzt. Es wird wieder zur Notation mit den komplexen Verschiebungen zurückgekehrt (siehe Gleichung (54) und (55)).

$$T_{j+1}(u) = \frac{T_j\left(u - \frac{1}{2} \cdot i\right) T_1\left(u + \frac{j}{2} \cdot i\right) - d\left(u + \frac{j+2}{2} \cdot i\right) T_{j-1}(u - i)}{d\left(u + \frac{j}{2} \cdot i\right)} \quad (70)$$

Mit den Ergebnissen aus dem vorherigen Kapitel kann aus Gleichung (53) die folgende Gleichung hergeleitet werden:

$$T_j \left( u - \frac{i}{2} \right) T_j \left( u + \frac{i}{2} \right) = d \left( u - \frac{j}{2} \cdot i \right) d \left( u + \frac{j+2}{2} \cdot i \right) + T_{j-1}(u) T_{j+1}(u) \quad (71)$$

Es werden neue Funktionen  $Y_j(u)$  ( $j \in \mathbb{N}$ ,  $Y_0 \equiv 0$ ) eingeführt:

$$Y_j(u) = \frac{T_{j-1}(u) T_{j+1}(u)}{d \left( u - \frac{j}{2} \cdot i \right) d \left( u + \frac{j+2}{2} \cdot i \right)} \quad (72)$$

$$Y_j \left( u - \frac{i}{2} \right) Y_j \left( u + \frac{i}{2} \right) = [1 + Y_{j-1}(u)][1 + Y_{j+1}(u)] \quad (73)$$

Die Idee ist nun Gleichung (73) erst zu logarithmieren und dann die Eigenschaften der Fourier-Transformation zu benutzen. Dabei muss allerdings darauf geachtet werden, dass die Funktionen  $Y_j(u)$  ( $\forall j \in \mathbb{N}$ ) im physikalischen Streifen nullstellenfrei sind. Der physikalische Streifen ist durch die Verschiebung der Argumente der Funktionen  $Y_j(u)$  auf der linken Seite von Gleichung (73) definiert. Er hat also eine Breite von  $b = 1$  um die reelle Achse. Es müssen nun die Null- und Polstellen der Funktionen  $Y_j(u)$  bestimmt werden. Treten vereinzelt Null- oder Polstellen von  $Y_j(u)$  auf, so können diese mit Hilfe der folgenden Definition behoben werden:

$$\hat{Y}_j(u) = \tanh \left[ \frac{\pi}{2} \cdot (u - u_0) \right]^m \cdot Y_j(u) \quad (74)$$

Dabei ist  $m = -r_N$  bzw.  $m = r_P$  mit der Nullstellenordnung  $r_N$  bzw. der Polstellenordnung  $r_P$  von  $Y_j(u)$  an der Stelle  $u_0$ . Diese Substitution ist wegen folgendem Zusammenhang gerechtfertigt:

$$\tanh \left[ \frac{\pi}{2} \cdot \left( u - u_0 - \frac{i}{2} \right) \right] \tanh \left[ \frac{\pi}{2} \cdot \left( u - u_0 + \frac{i}{2} \right) \right] = 1 \quad (75)$$

In Gleichung (73) können somit auf der linken Seite auch die Funktionen  $Y_j(u)$  durch  $\hat{Y}_j(u)$  ersetzt werden. Dann kann der Logarithmus angewendet werden. Weiterhin muss beim Logarithmieren natürlich auch darauf geachtet werden, welcher Zweig des Logarithmus genutzt werden kann und ob die Funktionsargumente über einen Verzweigungsschnitt laufen. Nachdem die beschriebene Verschiebung des Funktionsarguments und alle Programmierfehler behoben wurden, stellte dies allerdings kein Problem mehr dar. Die Funktionen werden nun durch ihre Fourier-Transformierte (siehe Gleichung (41)) ausgedrückt. Anschließend wird das Faltungstheorem genutzt, wodurch sich das folgende Gleichungssystem ergibt:

$$\ln[Y_j(u)] = (\ln[1 + Y_{j-1}(u)][1 + Y_{j+1}(u)]) * \operatorname{sech}(\pi \cdot u) - m \cdot \ln \tanh \left[ \frac{\pi}{2} \cdot (u - u_0) \right] \quad (76)$$

$$\mathcal{F}[\operatorname{sech}(\pi \cdot u)](p) = \operatorname{sech}(\pi \cdot p) \quad (77)$$

Gleichung (76) beschreibt eine unendliche Anzahl von nicht-linearen Integralgleichungen. Eine Lösung für die Größe  $Y_1(u)$  ist zunächst von besonderem Interesse, da daraus die Relation für die Eigenwerte der Transfermatrix und somit auch die Energieeigenwerte berechnet werden können. Zur Bestimmung von  $Y_1(u)$  müssten nach Gleichung (76) aber zunächst alle  $Y_j(u)$  bestimmt werden. Es muss also ein anderer Lösungsweg gefunden werden.

## 4.5 Lösung der nicht-linearen Integralgleichungen für den Grundzustand (N=4)

Um aus dem Gleichungssystem (76) ein endliches, lösbares Gleichungssystem extrahieren zu können, wird das Vorgehen aus [8] angewendet. Demnach kann das Gleichungssystem (76) bei dem ersten  $Y_j(u)$ , welches keine Nullstelle im physikalischen Streifen besitzt, abgebrochen werden. Mit Hilfe der berechneten Werte für die Bethe-Wurzeln des Grundzustands (siehe Tabelle 6) und der berechneten Fusionsrelation können alle  $T_j(u)$  und  $Y_j(u)$  ( $\forall j \in \mathbb{N}$ ) berechnet werden. Weiterhin wird noch eine Verschiebung des Arguments um  $-\frac{i}{2}$  durchgeführt ( $\hat{u} = u - \frac{i}{2}$ ), da danach eine symmetrische Verteilung der Nullstellen der Funktionen  $Y_j(\hat{u})$  um die reelle Achse vorliegt.

Da nach Tabelle 2 nur  $Y_1(\hat{u})$  eine Nullstelle im physikalischen Streifen besitzt und sich die Nullstellen von  $Y_j(\hat{u})$  für größer werdende  $j$  immer weiter von der reellen Achse entfernen, kann die unendliche Folge von Integralgleichungen nach [8] bei  $j = 2$  abgebrochen werden. Dies führt auf das Gleichungssystem (78). Das Argument  $\hat{u}$  ist ab jetzt immer reell ( $\hat{u} \in \mathbb{R}$ ).

$$\begin{aligned} \ln Y_1(\hat{u}) &= N \cdot \ln \tanh \frac{\pi}{2} \cdot \hat{u} + (s * \ln B\bar{B})(\hat{u}) \\ \ln b(\hat{u}) &= (s * \ln(1 + Y_1))(\hat{u}) + (\kappa * \ln B)(\hat{u}) - (\kappa * \ln \bar{B})(\hat{u} + i) \\ \ln \bar{b}(\hat{u}) &= (s * \ln(1 + Y_1))(\hat{u}) + (\kappa * \ln \bar{B})(\hat{u}) - (\kappa * \ln B)(\hat{u} - i) \end{aligned} \quad (78)$$

$$B(\hat{u}) = 1 + b(\hat{u}) \quad \bar{B}(\hat{u}) = 1 + \bar{b}(\hat{u}) \quad B(\hat{u})\bar{B}(\hat{u}) = 1 + Y_2(\hat{u})$$

Tabelle 2: Nullstellen in der Schreibweise  $\hat{z} = \hat{x} + i\hat{y}$  (Grundzustand,  $N = 4$ ). Der Nullpunkt ist eine Nullstelle von Ordnung 4 für  $Y_1(\hat{u})$ . Alle anderen Nullstellen sind von Ordnung 1.

$Y_1(\hat{u})$		$Y_2(\hat{u})$		$Y_3(\hat{u})$		$Y_4(\hat{u})$	
$\hat{x}$	$\hat{y}$	$\hat{x}$	$\hat{y}$	$\hat{x}$	$\hat{y}$	$\hat{x}$	$\hat{y}$
-0.283	1.442	0.275	0.909	0.283	1.442	0.286	1.957
-0.283	-1.442	0.275	-0.909	0.283	-1.442	0.286	-1.957
0.283	1.442	-0.275	0.909	-0.283	1.442	-0.286	1.957
0.283	-1.442	-0.275	-0.909	-0.283	-1.442	-0.286	-1.957
0.000	0.000	0.286	1.957	0.287	2.466	0.287	2.972
		0.286	-1.957	0.287	-2.466	0.287	-2.972
		-0.286	1.957	-0.287	2.466	-0.287	2.972
		-0.286	-1.957	-0.287	-2.466	-0.287	-2.972

Die jeweiligen Integrationskerne  $\kappa(\hat{u})$  und  $s(\hat{u})$  sind wie folgt definiert:

$$s(\hat{u}) = \frac{1}{2 \cosh(\pi\hat{u})} \quad \kappa(\hat{u}) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-\frac{|p|}{2}}}{2 \cosh\left(\frac{p}{2}\right)} e^{ip\hat{u}} dp \quad (79)$$

Das Gleichungssystem (78) kann nun für  $N = 4$  gelöst werden. Dazu wird eine Iteration der Integralgleichungen programmiert. Laut [8] gilt  $B(\hat{u})\bar{B}(\hat{u}) = Y_2(\hat{u})$ . Deshalb wird als Anfangswert für die Hilfsfunktionen  $B(\hat{u}) = \sqrt{Y_2(\hat{u})}$  und  $\bar{b}(\hat{u}) = \bar{b}(\hat{u})$  gesetzt. Die Funktionen werden auf ein reelles, symmetrisches Intervall um den Nullpunkt der Breite  $L = 100$  eingeschränkt. Die Anzahl der Stützstellen beträgt  $n = 2^{12} = 4096$ .

Die Definition des Integrationskerns  $\kappa(u)$  über ein uneigentliches Integral legt die Benutzung des Faltungstheorems nahe, da die Fourier-Transformierte von  $\kappa(\hat{u})$  aus elementaren Funktionen besteht.

$$\mathcal{F}[\kappa(\hat{u} + \alpha i)](p) = \frac{e^{-\pi|p|}}{2 \cosh(\pi p)} e^{-2\pi\alpha p} \quad (80)$$

Zur Berechnung der Fourier-Transformierten von  $\kappa(\hat{u})$  wird folgende Definition der Delta-Funktion benötigt:

$$\delta(p - a) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\hat{u}(p-a)} d\hat{u} \quad (81)$$

Die Iterationsvorschrift zur Lösung der nicht-linearen Integralgleichungen ist in Abbildung 3 in einem Flussdiagramm dargestellt. Die Faltungen auf der rechten Seite werden mit Hilfe des Faltungstheorems gelöst. Dies bedeutet, dass die zu faltenden Funktionen nach Fourier

transformiert, multipliziert und anschließend nach Fourier zurück transformiert werden. Genauere Erläuterungen über die Anwendung der diskreten Fourier-Transformation können aus [9] entnommen werden. Dort sind insbesondere die nötige Zerlegung des Fourier-Integrals bzw. die Vertauschung der Funktionswerte, bevor sie als Argument in die diskrete Fourier-Transformation eingeführt werden, erläutert.

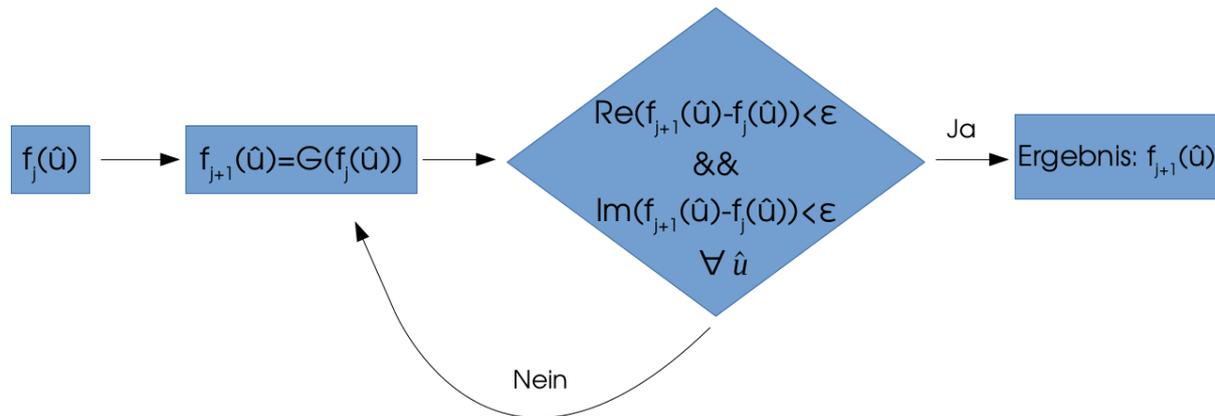


Abbildung 3: Flussdiagramm für die Iteration der gesuchten Funktion  $f(\hat{u})$ . Dabei bezeichnet  $f(\hat{u})$  die jeweilige Funktion im Argument des Logarithmus auf der linken Seite der im Gleichungssystem (78) auftretenden Gleichungen. Die Funktion  $G$  entspricht der Anwendung der rechten Seite der jeweiligen Gleichung. Für die erste Gleichung ( $f \equiv Y_1$ ) hängt  $G$  nicht vom vorherigen Iterationswert von  $Y_1(\hat{u})$  ab. Mit dem Index  $j$  wird hier der jeweilige Iterationsschritt gekennzeichnet.

Die Iteration der nicht-linearen Integralgleichungen für den Grundzustand ( $N = 4$ ) ergibt eine im Vergleich zum analytischen Resultat (aus Gleichung (72)) unveränderte Funktion  $Y_1(\hat{u})$  und einen Wert für die Grundzustandsenergie von  $E_0 = -4.00004$ .

## 4.6 Lösung der Integralgleichungen für beliebige Kettenlängen

Das Gleichungssystem (78) wurde für beliebige  $N$  hergeleitet. Die einzige Voraussetzung dabei war, dass alleine  $Y_1(\hat{u})$  eine Nullstelle 4. Ordnung im Nullpunkt besitzt. Die zuvor bestimmten Funktionen  $Y_1(\hat{u})$  und  $Y_2(\hat{u})$  bei Kettenlänge  $N = 4$  werden nun als Startbedingung für das Gleichungssystem verwendet, um auch für größere Kettenlängen die Funktion  $Y_1(\hat{u})$  bestimmen zu können. Dazu wird in dem Gleichungssystem (78) nur der Wert für  $N$  angepasst. Die Lösbarkeit und die Gültigkeit dieses Gleichungssystems werden nicht explizit bewiesen. Stattdessen wird das Gleichungssystem im Folgenden iterativ gelöst. Die Resultate für die Grundzustandsenergie werden anschließend mit Literaturwerten verglichen. Die Relation für die Eigenwerte der Transfermatrix  $T_1(\hat{u})$  kann aus dem

Resultat für die Funktion  $Y_1(\hat{u})$  bestimmt werden. Dazu wird zunächst Gleichung (82) aus den Gleichungen (71) und (72) berechnet.

$$T_j \left( \hat{u} - \frac{i}{2} \right) T_j \left( \hat{u} + \frac{i}{2} \right) = d \left( \hat{u} - \frac{j}{2} \cdot i \right) d \left( \hat{u} + \frac{j+2}{2} \cdot i \right) (1 + Y_j(\hat{u})) \quad (82)$$

Durch Anwendung des Logarithmus und Ausnutzen der jeweiligen Fourier-Transformierten (ähnlich wie zur Berechnung von Gleichung (76)) kann Gleichung (82) für  $j = 1$  nach der gesuchten Größe  $T_1(\hat{u})$  umgestellt werden.

$$\ln T_1(\hat{u}) = \left[ \ln \left( d \left( \hat{u} - \frac{1}{2}i \right) d \left( \hat{u} + \frac{3}{2} \cdot i \right) \right) + \ln(1 + Y_1(\hat{u})) \right] * s(\hat{u}) \quad (83)$$

Um die Grundzustandsenergie berechnen zu können, muss noch die vorherige Verschiebung um  $-\frac{i}{2}$  und die eingeführte „ $\sim$ “ -Notation beachtet werden (vgl. Gleichung (54) und (60)).

$$\begin{aligned} \frac{\partial \ln \tilde{T}_1(\tilde{u})}{\partial \tilde{u}} \Big|_{\tilde{u}=0} &= i \cdot \frac{\partial \ln T_1(\hat{u})}{\partial \hat{u}} \Big|_{\hat{u}=\frac{i}{2}} \\ &= - \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\pi \cosh(\pi y)}{\sinh^2(\pi y)} \cdot \left[ \ln (d(y-i) d(y+i)) + \ln \left( 1 + Y_1 \left( y - \frac{i}{2} \right) \right) \right] dy \end{aligned} \quad (84)$$

## 4.7 Grundzustandsenergie für beliebige Kettenlängen

In diesem Kapitel werden die Ergebnisse der Iteration der nicht-linearen Integralgleichungen (78) für beliebige Kettenlängen angegeben. Die Funktion  $Y_1(\hat{u})$  ist für beliebige Kettenlängen  $N$  in Abbildung 4 dargestellt. Der Imaginärteil ist immer gleich 0.

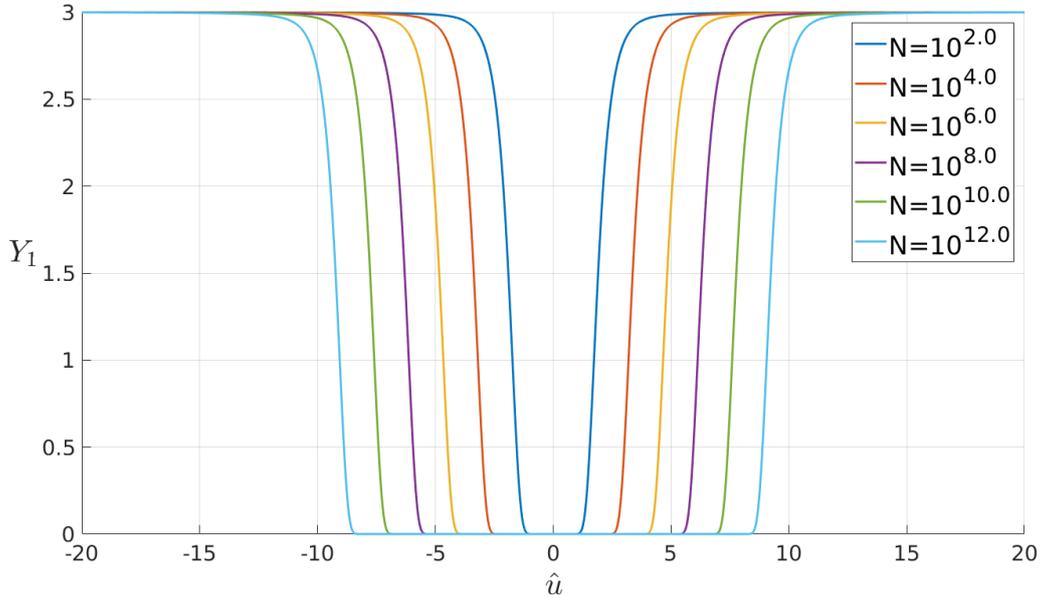


Abbildung 4:  $Y_1(\hat{u})$  für verschiedene Kettenlängen

Die Grundzustandsenergie setzt sich für die periodische XXX-Kette aus folgenden Summanden zusammen (siehe [10]):

$$E_0 = a \cdot N + b + c \cdot \frac{1}{N} \quad (85)$$

Sie kann aus der Funktion  $Y_1(\hat{u})$  mit Hilfe von Gleichung (84) berechnet werden. Die asymptotische Grundzustandsenergie pro Gitterplatz ist für große Kettenlängen  $N$  durch Gleichung (86) gegeben (siehe [11]).

$$\frac{E_A - E_F}{JN} \xrightarrow{N \rightarrow \infty} -\ln 2 \quad (86)$$

Da der antiferromagnetische Zustand hier auch der Grundzustand ist, gilt:  $E_A = E_0$ . Die Energie des ferromagnetischen Zustands ist gegeben durch  $E_F = \frac{JN}{4}$ . Aus dem Vergleich mit dem Hamilton-Operator in [11] folgt, dass die Kopplungskonstante hier den Wert  $J = 2$  besitzt. Somit ergibt sich insgesamt für die asymptotische Grundzustandsenergie:

$$E_0 \xrightarrow{N \rightarrow \infty} \frac{1}{2} - 2 \ln 2 \approx -0.8862944 \quad (87)$$

Zur Überprüfung dieser Aussage wird ein Fit der Energiewerte pro Gitterplatz mit folgender Gleichung durchgeführt:

$$E_0 = a + b \cdot \frac{1}{N} + c \cdot \frac{1}{N^2} \quad \rightarrow \quad a \approx -0.8862970 \pm 2 \cdot 10^{-11} \quad (88)$$

Dabei wurden folgende Parameter der Iteration gewählt: Intervallbreite  $L = 100$ , Anzahl der Stützstellen  $n = 2^{12} = 4096$ , Iterationsgenauigkeit  $\epsilon = 10^{-15}$ . Der Wert für  $a$  stimmt also mit dem theoretisch bestimmten Grenzwert bis zur sechsten Nachkommastelle überein. Eine Vergrößerung der Intervallbreite liefert keine genaueren Ergebnisse. Ansonsten wurden aus Zeitgründen keine weiteren Schritte unternommen, um die Genauigkeit des Ergebnisses und weitere Abhängigkeiten von den Parametern der Iteration zu überprüfen. Die angegebene Unsicherheit ergibt sich aus dem Fit. Diese ist somit deutlich kleiner als der Fehler, der durch die Iteration zustande kommt. Die Werte für  $a$  bei großen Kettenlängen  $N > 10^6$  stimmen mit dem in Gleichung (88) angegebenen Wert in der gegebenen Genauigkeit überein. In Abbildung 5 ist die Energie pro Gitterplatz über der Kettenlänge  $N$  dargestellt. Es ist zu erkennen, wie die Energie pro Gitterplatz sich dem konstanten Wert annähert.

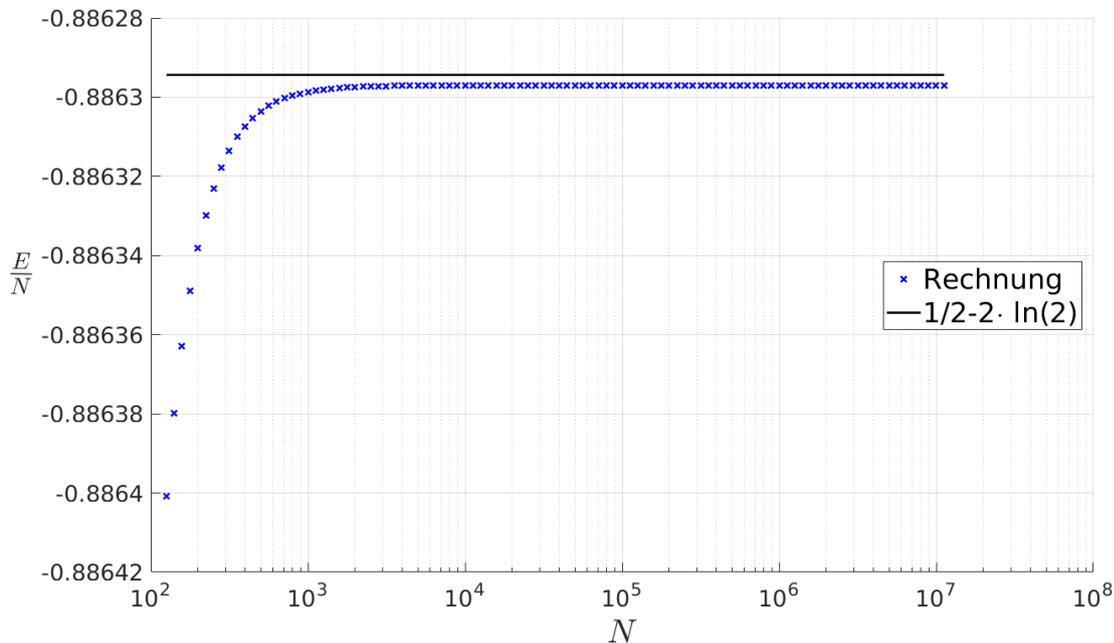


Abbildung 5: Annäherung der Energie pro Gitterplatz an eine Konstante für große Kettenlängen

Weiterhin wird ein Fit (siehe auch Abbildung 6) durchgeführt, bei dem der theoretische Wert für

a eingesetzt und die Größen a und b bestimmt werden.

$$\frac{E_0}{N} = \frac{1}{2} - 2 \ln 2 + b \cdot \frac{1}{N} + c \cdot \frac{1}{N^2} \quad (89)$$

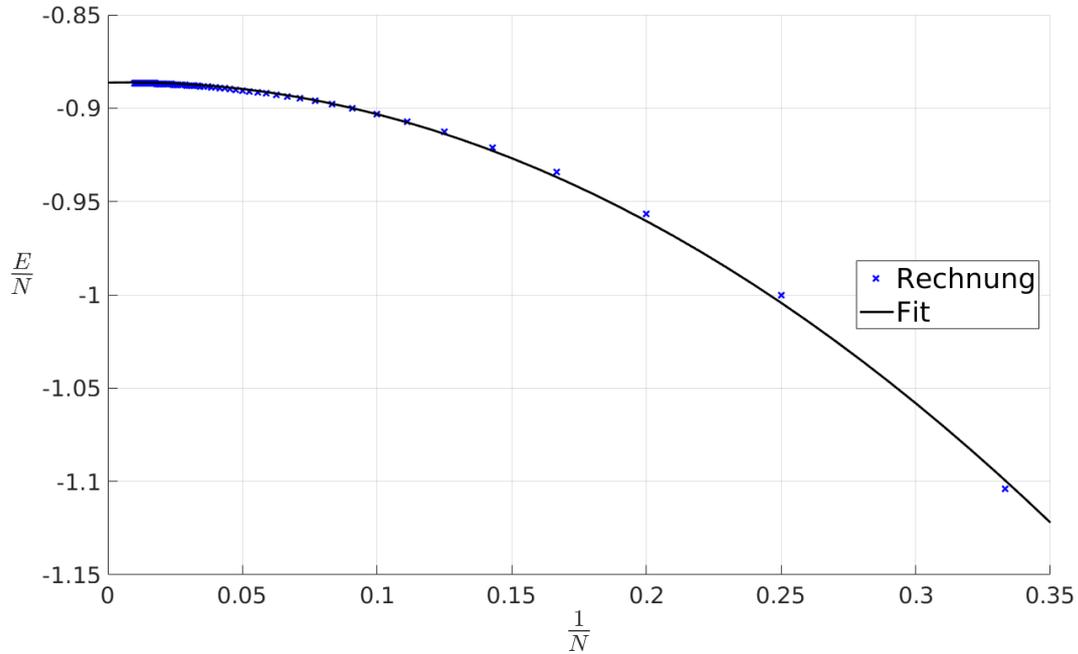


Abbildung 6: Energie pro Gitterplatz für kleine Kettenlängen

Diese beiden Parameter hängen dann allerdings so stark von der Intervallbreite ab, dass für sie keine Angaben gemacht werden können. Dennoch sollen der Vollständigkeit halber die Werte, für die oben angegebenen Parameter der Iteration, erwähnt werden.

$$b = 0.032 \pm 0.003 \quad c = -2.02 \pm 0.01 \quad (90)$$

Für diese beiden Parameter konnten keine Literaturwerte gefunden werden. Da die genaue Bestimmung dieser Parameter auch nicht Ziel der vorliegenden Arbeit ist, wird keine Zeit in die genaue Bestimmung dieser Größen investiert. Das Ergebnis für den Energieeigenwert des Grundzustands bei  $N = 4$  und die Übereinstimmung mit dem analytischen Ergebnis für  $N \rightarrow \infty$  zeigen, dass die nicht-linearen Integralgleichungen die erwarteten Ergebnisse liefern. Damit kann nun mit dem eigentlichen Ziel dieser Arbeit, der Untersuchung der XXX-Kette mit nicht-diagonalen Randbedingungen, begonnen werden.

## 5 XXX-Kette mit nicht-diagonalen Randbedingungen

Die XXX-Kette mit nicht-diagonalen Randbedingungen erfüllt nicht die  $U(1)$ -Symmetrie und stellt damit eine typische Anwendung des „Off-Diagonal Bethe-Ansatz“ dar. Zunächst wird versucht das Vorgehen aus Kapitel (4) auf die XXX-Kette mit nicht-diagonalen Randbedingungen zu übertragen. Im zweiten Teil wird dann der erste Vorschlag der Autoren von [2] für eine inhomogene T-Q-Gleichung genauer untersucht. Im letzten Abschnitt wird mit Hilfe einer weiteren inhomogenen T-Q-Gleichung versucht ein ähnliches Vorgehen wie in [12] anzuwenden, um nicht-lineare Integralgleichungen für dieses Modell bestimmen zu können.

### 5.1 Versuch zur Bestimmung nicht-linearer Integralgleichungen

Zunächst wird versucht, das Vorgehen aus Kapitel (4) auf die XXX-Kette mit nicht-diagonalen Randbedingungen anzuwenden. Dazu wird die T-Q-Gleichung (29) betrachtet und versucht, ähnlich wie in Kapitel 4.3 eine Gleichung für eine reguläre Funktion  $T_2(u)$  zu bestimmen, indem ein passendes  $\Phi(u)$  definiert wird. Der dritte Summand der inhomogenen T-Q-Gleichung (29) wird durch  $S_3(u)$  abgekürzt.

$$T(u) = a(u) \frac{Q(u-1)}{Q(u)} + d(u) \frac{Q(u+1)}{Q(u)} + \frac{S_3(u)}{Q(u)} \quad (91)$$

Mit Gleichung (66) gilt dann für  $T_2(u)$ :

$$\begin{aligned} T_2(u) = & \left[ \left( a \left( u - \frac{1}{2} \right) \frac{Q \left( u - \frac{3}{2} \right)}{Q \left( u - \frac{1}{2} \right)} + d \left( u - \frac{1}{2} \right) \frac{Q \left( u + \frac{1}{2} \right)}{Q \left( u - \frac{1}{2} \right)} + \frac{S_3 \left( u - \frac{1}{2} \right)}{Q \left( u - \frac{1}{2} \right)} \right) \right. \\ & \left. \left( a \left( u + \frac{1}{2} \right) \frac{Q \left( u - \frac{1}{2} \right)}{Q \left( u + \frac{1}{2} \right)} + d \left( u + \frac{1}{2} \right) \frac{Q \left( u + \frac{3}{2} \right)}{Q \left( u + \frac{1}{2} \right)} + \frac{S_3 \left( u + \frac{1}{2} \right)}{Q \left( u + \frac{1}{2} \right)} \right) \right. \\ & \left. - \Phi(u+1)\Phi(u-1) \right] \frac{1}{\Phi(u)} \quad (92) \end{aligned}$$

Der Unterschied zu Gleichung (63) besteht nun darin, dass, anstatt des linken Teils von Gleichung (93), hier nur der rechte Teil gilt.

$$a(u) \neq d(u+1) \qquad a(u) = d(-u-1) \quad (93)$$

Somit kann eine zu Abschnitt (4) analoge Definition von  $\Phi(u)$  nicht verwendet werden. Eine andere Definition von  $\Phi(u)$  konnte auch nicht gefunden werden. Des Weiteren ergab ein Gespräch von Prof. A. Klümper mit Prof. H. Frahm von der Leibniz Universität Hannover, dass für die XXX-

Kette mit nicht-periodischen Randbedingungen auf einem anderen Wege ein Gleichungssystem wie in Gleichung (76) aufgestellt werden kann. Die dort auftretenden Funktionen  $Y_j(u)$  sind dann aber auch für große  $j \in \mathbb{N}$  nicht null- und polstellenfrei. Das bedeutet, dass das Gleichungssystem nicht ab einem bestimmten  $j$  abgebrochen werden kann. Das Gleichungssystem ist somit nicht lösbar. Da Ähnliches bei der vorliegenden Methode über die inhomogene T-Q-Gleichung auch zu erwarten war, wurden die beiden anderen Versuche (Kapitel 5.2 und 5.3) zur Bestimmung nicht-linearer Integralgleichungen verfolgt.

## 5.2 Versuch zur Bestimmung einer einfacheren inhomogenen T-Q-Gleichung

Beim Betrachten der inhomogenen T-Q-Gleichung (29) bzw. (31) fällt auf, dass bereits eine einfachere inhomogene T-Q-Gleichung existiert. Es kann gezeigt werden, dass folgende Gleichung auch die über Gleichung (29) angegebenen Bestimmungsgleichungen für die Eigenwerte der Transfermatrix erfüllt:

$$T(u) = a(u) \frac{Q(u)}{Q(u-1)} + d(u) \frac{Q(u+1)}{Q(u)} + 2[1 - (1 + \xi^2)^{\frac{1}{2}}] \cdot (u(u+1))^{N+1} \quad (94)$$

Die Bethe-Ansatz-Gleichung entspricht dann der einer homogenen T-Q-Gleichung mit polynomialer Lösung für  $Q(u)$ . Allerdings stimmen die aus den Bethe-Wurzeln errechneten Energieeigenwerte nicht mit den in Tabelle 7 ( $p = -0.6$ ,  $q = -0.3$ ,  $\xi = 1.2$ ,  $N = 4$ ) über die inhomogene T-Q-Gleichung (31) berechneten Lösungen für die Energieeigenwerte überein. Es kann auch kein systematischer Unterschied zwischen den Ergebnissen gefunden werden. Dazu sind in Tabelle 3 zwei Vergleichswerte angegeben. Die erste Lösung zeigt, dass Bethe-Wurzeln gefunden werden können, die die Auswahlregeln nicht verletzen und einen Energiewert mit einem Imaginärteil zur Folge haben. All dies spricht dafür, dass die inhomogene T-Q-Gleichung (94) so nicht gewählt werden darf.

Tabelle 3: Bethe-Wurzeln aus Gleichung (12) ( $p = -0.6$ ,  $q = -0.3$ ,  $\xi = 1.2$ ,  $N = 4$ )

$\mu_1$	$\mu_2$	$\mu_3$	$\mu_4$	$E_n$
-0.1662	-0.1251	0.1681	-1.1254	-12.0551
-0.0821i	+0.0290i	+0.0809i	+0.0290i	+0.0176i
0.5101	-1.1921	0.5564	0.5564	9.8735
+0.0000i	+0.0000i	-0.3882i	+0.3882i	+0.0000i

Die Lösung für die Energien aus Gleichung (29) sollte für kleine Werte des Parameters  $\xi \rightarrow 0$  mit der Lösung für die parallelen Randfelder übereinstimmen. Dazu werden die beiden Modelle für  $\xi = 0.1$  und  $N = 2$  in Tabelle 4 und 5 verglichen. Es ist zu erkennen, dass sich die Energiewerte nur geringfügig unterscheiden. Die Bethe-Ansatz-Gleichung ist in beiden Fällen nahezu gleich. Die Funktionen  $a(u)$  und  $d(u)$  sind aufgrund des kleinen Wertes von  $\xi$  nur leicht verschieden, woraus sich leicht verschobene Bethe-Wurzeln und Energiewerte ergeben. Dies liefert also keine Aussage darüber, ob die inhomogene T-Q-Gleichung (94) tatsächlich physikalisch richtige Ergebnisse liefert.

Tabelle 4: Bethe-Wurzeln der XXX-Kette mit parallelen Randfeldern ( $p = -0.6$ ,  $q = -0.3$ ,  $N = 2$ ). Dies entspricht der Lösung von Gleichung (3) mit den in Gleichung (16) angegebenen Funktionen  $a(u)$ ,  $d(u)$ ,  $Q(u)$ . Für jeden Energieeigenwert existiert immer noch eine weitere, um 1 verschobene Lösung für die Bethe-Wurzeln aufgrund der Form von  $Q(u)$ . Diese ist für den Energiewert  $E_n = 1.6023$  beispielhaft angegeben.

$\mu_1$	$\mu_2$	$E_n$
/	/	-4.0000
1.8007 - 0.0000i	/	-3.6034
0.2791 - 0.0000i	/	1.6023
-1.2791 - 0.0000i	/	1.6023
0.2689 - 0.0979i	-1.2689 - 0.0979i	6.0000

Tabelle 5: Bethe-Wurzeln der XXX-Kette mit nicht-diagonalen Randbedingungen ( $p = -0.6$ ,  $q = -0.3$ ,  $\xi = 0.1$ ,  $N = 2$ ). Dies entspricht der Lösung von Gleichung (32) mit den in Gleichung (30) angegebenen Funktionen  $a(u)$ ,  $d(u)$ ,  $Q(u)$

$\mu_1$	$\mu_2$	$E_n$
/	/	-4.0166
1.7844 - 0.0000i	/	-3.6141
0.2779 - 0.0000i	/	1.6146
0.2684 - 0.0974i	-1.2684 - 0.0974i	6.0166

Die Autoren des Buches [2] fordern also implizit, dass die Struktur von Baxters T-Q-Gleichung erhalten bleibt. Konkret bedeutet dies, dass der dritte Summand der inhomogenen T-Q-Gleichung auch immer die Funktion  $Q(u)$  im Nenner enthalten muss. Wird diese Bedingung den am Ende von Kapitel 2.4.1 angegebenen Bestimmungsgleichungen für die Eigenwerte der Transfermatrix hinzugefügt, so ergibt sich die naheliegendste Lösung in Gleichung (29) bzw. (31).

### 5.3 Bestimmung nicht-linearer Integralgleichungen

Im letzten Versuch zur Bestimmung nicht-linearer Integralgleichungen für die XXX-Kette mit nicht-diagonalen Randbedingungen wird die inhomogene T-Q-Gleichung (37) aus [2] mit Hilfe der Substitution  $u = \frac{i}{2}x - \frac{1}{2}$  umgeschrieben. Die Begründung dafür folgt im Verlauf dieses Kapitels.

$$\begin{aligned} q_1(x) &:= Q_1 \left( \frac{i}{2}x - \frac{1}{2} \right) = \left( \frac{i}{2} \right)^{2N} \prod_{l=1}^N (x + i + 2i\mu_l) \\ q_2(x) &:= Q_2 \left( \frac{i}{2}x - \frac{1}{2} \right) = (-1)^N \left( \frac{i}{2} \right)^{2N} \prod_{l=1}^N (x - i - 2i\mu_l) \end{aligned} \quad (95)$$

$$\tilde{T}(x) = T(u) = \underbrace{\Phi_1(x) \frac{q_1(x+2i)}{q_2(x)}}_{\lambda_1(x)} + \underbrace{\Phi_2(x) \frac{1}{q_1(x)q_2(x)}}_{\lambda_2(x)} + \underbrace{\Phi_3(x) \frac{q_2(x-2i)}{q_1(x)}}_{\lambda_3(x)} \quad (96)$$

$$\begin{aligned} \Phi_1(x) &:= a \left( \frac{i}{2}x - \frac{1}{2} \right) = \underbrace{\left( \frac{i}{2} \right)^{2N+1} (1 + \xi^2)^{\frac{1}{2}}}_{C_1} \frac{1}{x} \underbrace{(x + i - 2ip)(x + i - 2iq(1 + \xi^2)^{-\frac{1}{2}})}_{\Psi_1(x)} (x - i)^{2N+1} \\ \Phi_2(x) &:= \underbrace{\left( -\frac{1}{4} \right)^{2N+1} \cdot 2 \cdot \left( (-1)^N - (1 + \xi^2)^{\frac{1}{2}} \right)}_{C_2} [(x+i)(x-i)]^{2N+1} \\ \Phi_3(x) &:= d \left( \frac{i}{2}x - \frac{1}{2} \right) = \underbrace{\left( \frac{i}{2} \right)^{2N+1} (1 + \xi^2)^{\frac{1}{2}}}_{C_1} \frac{1}{x} \underbrace{(x - i + 2ip)(x - i + 2iq(1 + \xi^2)^{-\frac{1}{2}})}_{\Psi_3(x)} (x + i)^{2N+1} \end{aligned} \quad (97)$$

Zu beachten ist hier, dass die Nullstellen von  $\Psi_1(x)$ , aufgrund der Wahl der Parameter der Randbedingungen, einen Imaginärteil besitzen, der größer als 1 ist ( $n, m > 0$ ). Es wird  $\tilde{\Phi}_1(x) = x \cdot \Phi_1(x)$  und  $\tilde{\Phi}_3(x) = x \cdot \Phi_3(x)$  gesetzt und die in Gleichung (98) dargestellten Hilfsfunktionen definiert. Die Idee dazu stammt aus [12], wo ein ähnliches Vorgehen für das t-J-Modell angewendet wird.

$$\begin{aligned}
B(x) &= 1 + b(x) = \frac{\tilde{T}(x)}{\lambda_1(x)} = \frac{x \cdot q_2(x)}{\tilde{\Phi}_1(x)q_1(x+2i)} \tilde{T}(x) \\
\bar{B}(x) &= 1 + \bar{b}(x) = \frac{\tilde{T}(x)}{\lambda_3(x)} = \frac{x \cdot q_1(x)}{\tilde{\Phi}_3(x)q_2(x-2i)} \tilde{T}(x) \\
C(x) &= 1 + c(x) = \frac{[\lambda_1(x) + \lambda_2(x)][\lambda_2(x) + \lambda_3(x)]}{\lambda_1(x)\lambda_3(x)} = \frac{D(x)\bar{D}(x)}{C_1^2\Psi_1(x)\Psi_3(x)q_1(x+2i)q_2(x-2i)} \\
b(x) &= \frac{\lambda_2(x) + \lambda_3(x)}{\lambda_1(x)} = \underbrace{\frac{x \cdot q_2(x)[\lambda_2(x) + \lambda_3(x)]}{(x+i)^{2N+1}}}_{D(x)} \cdot \frac{(x+i)^{2N+1}}{x \cdot \Phi_1(x)q_1(x+2i)} \\
\bar{b}(x) &= \frac{\lambda_1(x) + \lambda_2(x)}{\lambda_3(x)} = \underbrace{\frac{x \cdot q_1(x)[\lambda_1(x) + \lambda_2(x)]}{(x-i)^{2N+1}}}_{\bar{D}(x)} \cdot \frac{(x-i)^{2N+1}}{x \cdot \Phi_3(x)q_2(x-2i)} \\
c(x) &= \frac{\lambda_2(x)\tilde{T}(x)}{\lambda_1(x)\lambda_3(x)} = \frac{\tilde{T}(x)}{\Phi_1(x)\Phi_3(x)q_1(x+2i)q_2(x-2i)} = \frac{C_2\tilde{T}(x) \cdot x^2}{\Psi_1(x)\Psi_3(x)q_1(x+2i)q_2(x-2i)}
\end{aligned} \tag{98}$$

Die Idee ist nun, die Gleichungen (98) zu logarithmieren und abzuleiten, damit die Konstanten verschwinden. Anschließend werden die Gleichungen nach Fourier transformiert. Dabei wird die Kenntnis der Nullstellen der Funktionen benötigt. Die bisher noch beliebig gewählten Parameter der Randbedingungen und die Kettenlänge werden zum Test wie folgt gewählt:  $p = -0.6$ ,  $q = -0.3$ ,  $\xi = 1.2$ ,  $N = 4$ . Der Grund dafür ist, dass für diese Parameterwahl die Funktion  $D(x)$  bzw.  $\bar{D}(x)$  nur Nullstellen in der oberen bzw. unteren Hälfte der komplexen Ebene besitzt. Dies ist unabdingbar für die Lösbarkeit des im Folgenden berechneten Gleichungssystems. Für  $N = 2$  konnten keine Parameter  $p$ ,  $q$ ,  $\xi$  gefunden werden, sodass dies gilt. Die Substitution am Anfang dieses Kapitels wurde so gewählt, dass, für die genannten Parameter der Randbedingungen, die Nullstellen der Funktion  $q_1(x)$  bzw.  $q_2(x)$  für den Grundzustand etwas über bzw. unter der reellen Achse liegen (siehe Tabelle 8 Zeile 1 und Gleichung (95)).

Es wird eine Funktion  $\Lambda(x)$  eingefügt, aus der die Linearfaktoren der Nullstellen von  $\tilde{T}(x)$  herausgezogen werden. Die Nullstellen werden numerisch bestimmt.

$$\tilde{T}(x) = \Lambda(x)\lambda(x) \quad \lambda(x) = (x - x_0)(x + x_0) \quad x_0 = 2.224475686 \tag{99}$$

Um die Gleichungen übersichtlicher zu gestalten, wird folgende vereinfachende Notation für alle Fourier-Transformierten verwendet:  $B(p) := \mathcal{F} \left[ \frac{\partial \ln(1+b(x))}{\partial x} \right] (p)$ . Die Fourier-Transformierten der jeweiligen Funktionen sind also nur durch das veränderte Argument  $p$  gekennzeichnet. Der natürliche Logarithmus und die Ableitung gehen in der Definition unter, um eine übersichtliche Form der Gleichungen zu gewährleisten. Zur Berechnung der Fourier-Transformation wird der Residuensatz benutzt. Das komplette Vorgehen soll beispielhaft für die erste Gleichung im

Gleichungssystem (102) erklärt werden. Zunächst ist eine Fourier-Transformation mit der reellen Achse als Integrationsachse nicht so einfach möglich, da sich jeweils zwei der Nullstellen der Funktionen  $q_1(x)$  und  $q_2(x)$  fast auf der reellen Achse befinden. Durch die Anwendung des Logarithmus werden die Nullstellen zu Polstellen. Deshalb wird die Fourier-Transformation für  $\frac{\partial \ln(B(x))}{\partial x}$  bzw.  $\frac{\partial \ln(\overline{B}(x))}{\partial x}$  auf der Achse mit Imaginärteil  $-1$  bzw.  $+1$  durchgeführt. Bei der Fourier-Transformation der ersten Gleichung in Gleichungssystem (99) ist die Fourier-Transformierte von  $\mathcal{F}\left[\frac{\partial \ln(q_2(x))}{\partial x}\right]$  gleich 0, da nach dem Residuensatz das Fourier-Integral zu einem Kontur-Integral über einen Halbkreis, dessen Kreisbogen mit Radius  $R \rightarrow \infty$  in dem Teil der komplexen Ebene mit  $\text{Im}(z) \leq 1$  verläuft, umgeschrieben werden kann. Der Beitrag des Kreisbogens verschwindet für  $p > 0$ . Das Kontur-Integral ist auch gleich 0, da  $\frac{\partial \ln(q_2(x))}{\partial x}$  keine Residuen in dem Bereich  $\text{Im}(z) \leq 1$  besitzt. Dies lässt sich auf folgende Regeln verallgemeinern:

$$\begin{aligned} p > 0 : f(x) \text{ regulär im Gebiet unter der Integrationsachse} &\Rightarrow f(p) = 0 \\ p < 0 : f(x) \text{ regulär im Gebiet über der Integrationsachse} &\Rightarrow f(p) = 0 \end{aligned} \quad (100)$$

Außerdem gelten folgende Gleichungen für die Fourier-Transformation der logarithmischen Ableitungen der Linearfaktoren ( $a \in \mathbb{R}$ ,  $a \neq 0$ ):

$$\begin{aligned} x + i &\xrightarrow{\ln, \frac{\partial}{\partial x}, \mathcal{F}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-2\pi i p x}}{x + i} = \begin{cases} -2\pi i \cdot e^{-2\pi p} & p > 0 \\ 0 & p < 0 \end{cases} \\ x + ai &\xrightarrow{\ln, \frac{\partial}{\partial x}, \mathcal{F}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-2\pi i p x}}{x + ai} = \begin{cases} -2\pi i \cdot e^{-2\pi \cdot pa} & p > 0 \\ 0 & p < 0 \end{cases} \\ x - i &\xrightarrow{\ln, \frac{\partial}{\partial x}, \mathcal{F}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-2\pi i p x}}{x - i} = \begin{cases} 0 & p > 0 \\ 2\pi i \cdot e^{2\pi p} & p < 0 \end{cases} \\ x - ai &\xrightarrow{\ln, \frac{\partial}{\partial x}, \mathcal{F}} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-2\pi i p x}}{x - ai} = \begin{cases} 0 & p > 0 \\ 2\pi i \cdot e^{2\pi \cdot pa} & p < 0 \end{cases} \end{aligned} \quad (101)$$

Dabei ist das Vorzeichen der Fourier-Transformierten durch die Umlaufzahl gegeben. Die Fourier-Transformierten der restlichen Funktionen der ersten Gleichung in Gleichungssystem (98) werden in der genannten Notation hingeschrieben (siehe 1. Gleichung des Gleichungssystems (102)). Wird all dies berücksichtigt, so ergeben sich die Gleichungssysteme (102) für  $p > 0$  und (103) für  $p < 0$ .

$$\boxed{p > 0}$$

$$\begin{aligned}
B(p) &= -\tilde{\Phi}_1(p) - q_1(p)e^{-2p} + \Lambda(p) = -\Psi_1(p) - q_1(p)e^{-2p} + \Lambda(p) \\
\bar{B}(p) &= -\tilde{\Phi}_3(p) + q_1(p) + \Lambda(p) - i - 2i \cos(px_0) \\
&= (2N + 1)ie^{-p} + q_1(p) + \Lambda(p) - i - 2i \cos(px_0) \\
C(p) &= \bar{D}(p) - q_1(p)e^{-2p} - \Psi_1(p) \\
b(p) &= -q_1(p)e^{-2p} - (2N + 1)ie^{-p} - \Psi_1(p) \\
\bar{b}(p) &= \bar{D}(p) + (2N + 1)ie^{-p} \\
c(p) &= -q_1(p)e^{-2p} + \Lambda(p) - \Psi_1(p)
\end{aligned} \tag{102}$$

$$\boxed{p < 0}$$

$$\begin{aligned}
B(p) &= -\tilde{\Phi}_1(p) + q_2(p) + \Lambda(p) + i + 2i \cos(px_0) \\
&= -(2N + 1)ie^p + q_2(p) + \Lambda(p) + i + 2i \cos(px_0) \\
\bar{B}(p) &= -\tilde{\Phi}_3(p) - q_2(p)e^{2p} + \Lambda(p) = -\Psi_3(p) - q_2(p)e^{2p} + \Lambda(p) \\
C(p) &= D(p) - q_2(p)e^{2p} - \Psi_3(p) \\
b(p) &= D(p) - (2N + 1)ie^p \\
\bar{b}(p) &= (2N + 1)ie^p - q_2(p)e^{2p} - \Psi_3(p) \\
c(p) &= -q_2(p)e^{2p} + \Lambda(p) - \Psi_3(p)
\end{aligned} \tag{103}$$

Dabei wird die Funktion  $c(p)$  nochmal gesondert definiert.

$$c(p) := \mathcal{F} \left[ \frac{\partial \ln \left( \frac{c(x)}{x^2 \lambda(x)} \right)}{\partial x} \right] \tag{104}$$

Die beiden Gleichungssysteme (102) und (103) bestehen jeweils aus 6 Gleichungen. Abgesehen von den Hilfsfunktionen  $B(p), \bar{B}(p), C(p), b(p), \bar{b}(p), c(p)$  und dem nullstellenfreien Teil der Transfermatrix  $\Lambda(p)$  sind in Gleichungssystem (102) noch  $\Psi_1(p), q_1(p), \bar{D}(p)$  enthalten. Mit Hilfe eines Computeralgebrasystems kann dieses Gleichungssystem auf drei Gleichungen reduziert und somit  $q_1(p)$  und  $\bar{D}(p)$  eliminiert werden. Aus den Hilfsfunktionen ergibt sich dann durch eine vierte Gleichung  $\Lambda(p)$ . Die Funktion  $\Psi_1(p)$  kann mit Hilfe der Gleichungen (101) durch deren Nullstellen, die durch die Parameter der Randbedingungen gegeben sind, ausgedrückt werden. Somit ergibt sich ein lösbares Gleichungssystem aus 3 Gleichungen mit 3 unbekannt Funktionen. Für das Gleichungssystem (103) wird analog vorgegangen. Dabei wird nochmal deutlich, dass die oben genannte Forderung an die Lage der Nullstellen von  $D(x)$  bzw.  $\bar{D}(x)$  für die Lösbarkeit des Gleichungssystems unbedingt benötigt wird. Werden die Gleichungssysteme für  $p > 0$  und  $p < 0$

kombiniert, so ergibt sich Gleichungssystem (106), wobei noch eine Verschiebung der Argumente von  $b(x)$  durchgeführt wird.

$$a(x) = b(x - i) \quad \bar{a}(x) = b(x + i) \quad (105)$$

$$\begin{aligned}
a(p) &= -i \frac{e^{-|p|+p}}{e^p + e^{-p}} - (2N + 1)i \frac{e^p}{e^p + e^{-p}} + i \left\{ \begin{array}{ll} \frac{e^{2p}}{e^p + e^{-p}} (e^{-np} + e^{-mp}) & p > 0 \\ \frac{1}{e^p + e^{-p}} (e^{np} + e^{mp}) & p < 0 \end{array} \right\} \\
&\quad + \frac{e^{-|p|}}{e^p + e^{-p}} (A(p) - \bar{A}(p)e^{2p}) \left\{ \begin{array}{ll} 0 & p > 0 \\ C(p)e^p & p < 0 \end{array} \right\} \\
\bar{a}(p) &= i \frac{e^{-|p|-p}}{e^p + e^{-p}} + (2N + 1)i \frac{e^{-p}}{e^p + e^{-p}} - i \left\{ \begin{array}{ll} \frac{1}{e^p + e^{-p}} (e^{-np} + e^{-mp}) & p > 0 \\ \frac{e^{-2p}}{e^p + e^{-p}} (e^{np} + e^{mp}) & p < 0 \end{array} \right\} \\
&\quad + \frac{e^{-|p|}}{e^p + e^{-p}} (\bar{A}(p) - A(p)e^{-2p}) \left\{ \begin{array}{ll} C(p)e^{-p} & p > 0 \\ 0 & p < 0 \end{array} \right\} \\
c(p) &= \left\{ \begin{array}{ll} A(p)e^{-p} & p > 0 \\ \bar{A}(p)e^p & p < 0 \end{array} \right\} \\
\Lambda(p) &= - (2N + 1)i \cdot \text{sign}(p) \frac{e^{-2|p|}}{e^p + e^{-p}} + i \cdot \text{sign}(p) \frac{e^{-|p|}}{e^p + e^{-p}} \\
&\quad - i \cdot \text{sign}(p) \cdot \left\{ \begin{array}{ll} e^{-np} + e^{-mp} & p > 0 \\ e^{np} + e^{mp} & p < 0 \end{array} \right\} + \frac{A(p) + \bar{A}(p)}{e^p + e^{-p}}
\end{aligned} \quad (106)$$

Aufgrund der beschränkten Zeit, die für die Erstellung dieser Arbeit vorhanden war, konnte der Versuch diese Gleichungen zu lösen nicht mehr unternommen werden. Deshalb wird die Gültigkeit des Gleichungssystems (106) für die gegebenen Parameter der Randbedingungen und die Kettenlänge  $N = 4$  überprüft. Dazu wird zunächst nur die Gleichung für  $c(p)$  betrachtet, indem jeweils die rechte und die linke Seite der Gleichung berechnet werden (siehe Abbildung 7 und 8). Die Berechnung des Logarithmus wird dabei umgangen.

$$\frac{\partial(\ln f(x))}{\partial x} = \frac{\left(\frac{\partial f(x)}{\partial x}\right)}{f(x)} \quad (107)$$

Um die rechte Seite der dritten Gleichung in Gleichungssystem (106) zu berechnen, wird die logarithmische Ableitung der Funktionen  $A(x), \bar{A}(x)$  diskret nach Fourier transformiert. An-

schließlich wird die rechte Seite der Gleichung berechnet und das Ergebnis wieder diskret nach Fourier zurück transformiert. Die Realteile der rechten und linken Seite stimmen fast überein. Der Unterschied ist jedoch zu groß, um von der numerischen Ungenauigkeit erklärt werden zu können. Die Tatsache, dass die linke Seite rein reell ist, ist allerdings verwunderlich. Hier liegt wohl noch ein Fehler in den Integralgleichungen vor.

Die Integralgleichungen müssten also nochmal genauer untersucht werden. Dazu bietet es sich an, die Ergebnisse für die Bethe-Wurzeln des Grundzustands (Zeile 1 in Tabelle 8) bei den genannten Parametern der Randbedingungen und der Kettenlänge  $N = 4$  zu benutzen, um die Funktionen in Gleichungssystem (98) zu berechnen. Anschließend ist die logarithmische Ableitung (Gleichung (107)) und die Fourier-Transformierte zu berechnen. Dann kann zunächst die Gültigkeit von Gleichungssystem (102) und (103), und nach der inversen Fourier-Transformation auch die des Gleichungssystems (106) überprüft werden.

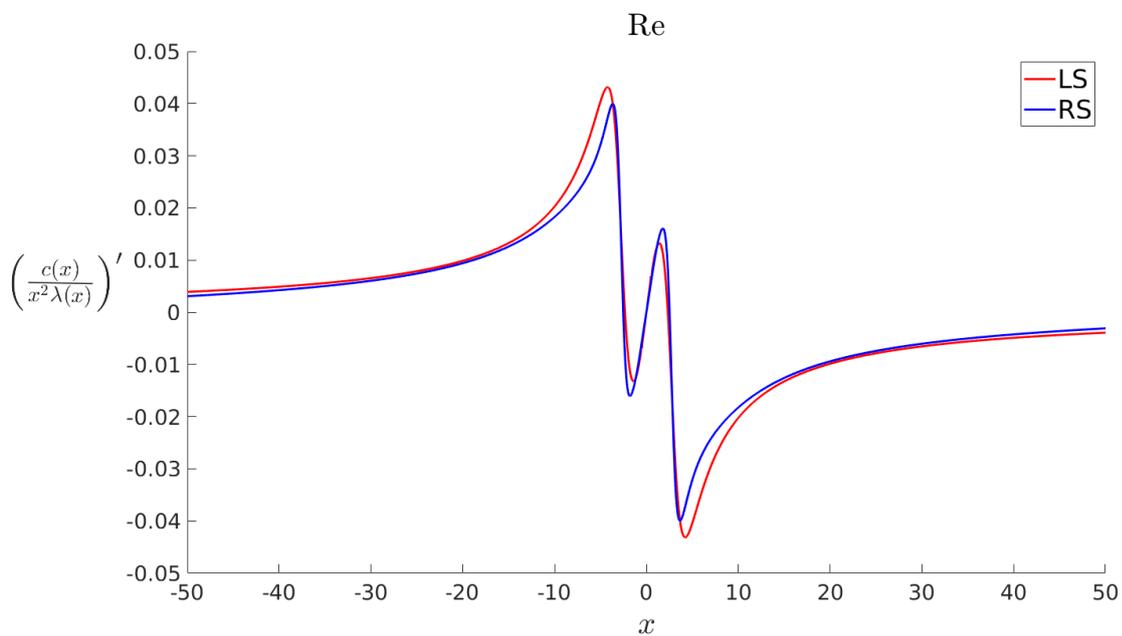


Abbildung 7: Realteil der linken (LS) und rechten Seite (RS) der dritten Gleichung des Gleichungssystems (106)

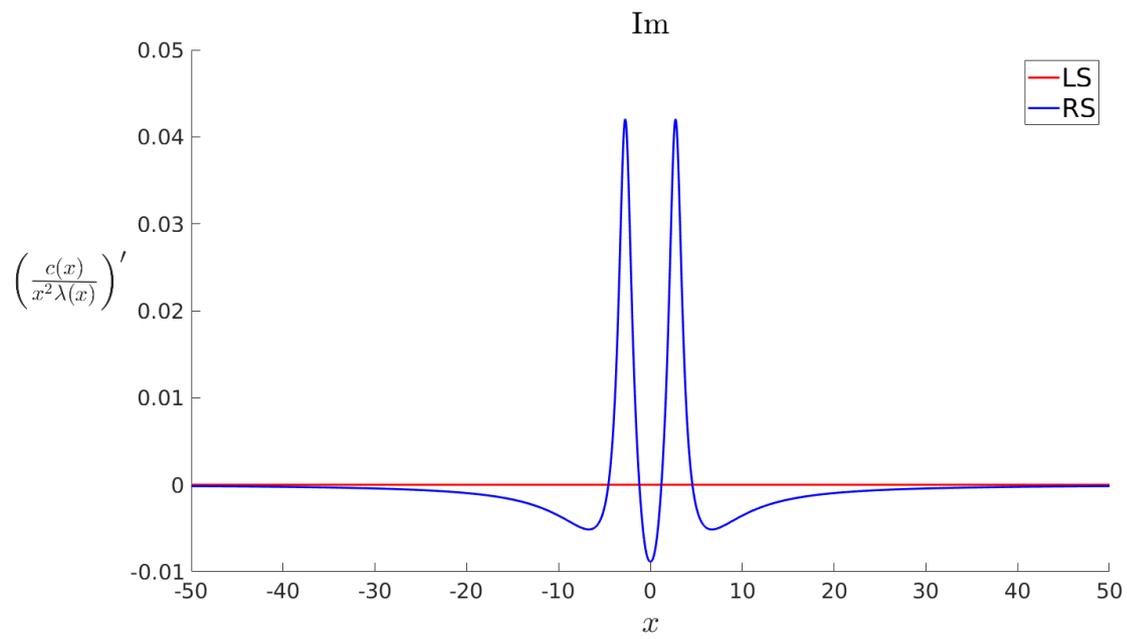


Abbildung 8: Imaginärteil der linken (LS) und rechten Seite (RS) der dritten Gleichung des Gleichungssystems (106)

## 6 Fazit

Das Fazit der vorliegenden Master-Thesis lässt sich getrennt nach den betrachteten Modellen, der XXX-Kette mit periodischen Randbedingungen und der XXX-Kette mit nicht-diagonalen Randbedingungen, angeben.

Für die XXX-Kette mit periodischen Randbedingungen konnte die Bethe-Ansatz-Gleichung der inhomogenen T-Q-Gleichung aus [2] für die Kettenlänge  $N = 4$  gelöst werden. Die Ergebnisse stimmen mit denen aus dem Koordinaten-Bethe-Ansatz überein. Außerdem konnte eine Fusionsgleichung aufgestellt werden, die zur Bestimmung von 3 nicht-linearen Integralgleichungen für  $N = 4$  genutzt wurde. Dieses ließ sich auf beliebige Kettenlängen erweitern. Somit konnte die Grundzustandsenergie für beliebige Kettenlängen berechnet werden. Das asymptotische Verhalten für  $N \rightarrow \infty$  stimmt mit dem analytischen Ergebnis aus [11] bis zur 6. Nachkommastelle überein. Für die Parameter  $b$  und  $c$  konnten keine Werte angegeben werden. Es ist jedoch davon auszugehen, dass nach einer genaueren Untersuchung des erstellten Iterationsprogramms und der Routine für den Fit der Energiewerte die Berechnung dieser Parameter möglich ist.

Für die XXX-Kette mit nicht-diagonalen Randbedingungen konnte das Vorgehen zur Bestimmung nicht-linearer Integralgleichungen für die XXX-Kette mit periodischen Randbedingungen nicht erweitert werden. Es konnte allerdings gezeigt werden, dass die inhomogene T-Q-Gleichung (29) bzw. (31) die kürzeste Lösung der Bestimmungsgleichungen für die Eigenwerte der Transfermatrix ist. Zum Schluss konnte dann über ein ähnliches Vorgehen wie in [12] ein System nicht-linearer Integralgleichungen für die XXX-Kette mit nicht-diagonalen Randbedingungen aufgestellt werden. Leider konnte dieses Gleichungssystem nur noch in Ansätzen auf seine Gültigkeit überprüft werden.

Anschließend an diese Master-Thesis wäre die Überprüfung der Gültigkeit der nicht-linearen Integralgleichungen der nächste logische Schritt. Es ist zu hoffen, dass danach auch hier eine Iteration der Gleichungen programmiert werden kann, die die Berechnung der Grundzustandsenergie für beliebige Kettenlängen erlaubt.

## 7 Literatur

- [1] J. Cao, K. Shi, Y. Wang, W.L. Yang. Off-diagonal Bethe ansatz solution of the xxx spin-chain with arbitrary boundary conditions. 2013.
- [2] J. Cao, K. Shi, Y. Wang, W.L. Yang. *Off-Diagonal Bethe Ansatz for Exactly Solvable Models*. Springer-Verlag Berlin, 2015.
- [3] R.J. Baxter. *Exactly Solved Models in Statistical Mechanics*. Dover, 2007.
- [4] E.K. Sklyanin. Boundary conditions for integrable quantum systems. *J. Phys. A: Math. Gen.* 21 2375, 1988.
- [5] K. Fritzsche. *Grundkurs Funktionentheorie*. Spektrum Akademischer Verlag Heidelberg, 2009.
- [6] M. Karbach, G. Müller. Introduction to the Bethe Ansatz I. 2004.
- [7] F. Essler, H. Frahm, F. Göhmann, A. Klümper, V.E. Korepin. *The One-Dimensional Hubbard Model*. Cambridge University Press, 2009.
- [8] A. Klümper, C. Trippe. Quantum phase transitions and thermodynamics of quantum antiferromagnets with competing interactions. *Low Temperature Physics* 33, 920 (2007); doi: 10.1063/1.2747066, 2007.
- [9] D. Wagner. Thermodynamische Eigenschaften des Anderson-Modells über reduzierte Integralgleichungen. 2015.
- [10] M. Kaulke. Anwendung der Dichtematrix-Renormierung auf nichthermitesche Probleme. 1999.
- [11] M. Karbach, G. Müller. Introduction to the Bethe Ansatz II. 2004.
- [12] A. Klümper, G. Jüttner. Exact calculation of thermodynamical quantities of the integrable  $t - j$  model. *EPL (Europhysics Letters)*, 37(5):335, 1997.

## 8 Anhang

Tabelle 6: Bethe-Wurzeln aus Gleichung (12) (vgl. [2] Tabelle 1.2)

$\mu_1$	$\mu_2$	$\mu_3$	$\mu_4$	$E_n$	$d$
$-3.46085 - 2.04638i$	$-3.46085 + 2.04638i$	$-0.53915 - 0.28370i$	$-0.53915 + 0.28370i$	-4.00000	1
$-3.49754 - 0.00000i$	$-2.00000 + 2.49853i$	$-2.00000 - 2.49853i$	$-0.50246 - 0.00000i$	-2.00000	3
$-3.41695 - 0.01463i$	$-2.20702 + 2.20734i$	$-1.88461 - 2.68745i$	$-0.49142 + 0.49474i$	-0.00000	3
$-3.41695 + 0.01463i$	$-2.20702 - 2.20734i$	$-1.88461 + 2.68745i$	$-0.49142 - 0.49474i$	-0.00000	3
$-3.38446 - 2.02080i$	$-3.38446 + 2.02080i$	$-1.11571 + 0.00000i$	$-0.11537 - 0.00000i$	-0.00000	1
$-3.07558 + 1.25638i$	$-3.07558 - 1.25638i$	$-0.92442 + 3.56865i$	$-0.92442 - 3.56865i$	2.00000	5

Tabelle 7: Bethe-Wurzeln aus Gleichung (32) ( $p = -0.6$ ,  $q = -0.3$ ,  $\xi = 1.2$ ,  $N = 4$ , aus [2] Tabelle 5.2)

$\mu_1$	$\mu_2$	$\mu_3$	$\mu_4$	$E_n$	$n$
$-4.46107 - 0.71343i$	$-4.46107 - 0.71343i$	$-0.50000 - 1.47504i$	$-0.50000 - 0.25996i$	-10.7613	1
$-4.56929 - 1.09496i$	$-4.56929 + 1.09496i$	$-1.88789 - 0.00000i$	$-0.50000 - 0.20948$	-9.2894	2
$-4.50072 - 0.88253i$	$-4.50072 + 0.88253i$	$-0.04631 - 0.72962i$	$-0.04631 + 0.72962i$	-6.6473	3
$-4.55229 - 1.03934i$	$-4.55229 + 1.03934i$	$-1.66354 - 0.00000i$	$-0.50000 - 0.48843$	-5.9532	4
$-5.23553 - 0.00000i$	$-2.59403 - 1.82497i$	$-2.59403 + 1.82497i$	$-0.50000 - 2.45317i$	-4.0479	5
$-5.09717 + 0.00000i$	$-1.65621 - 0.00000i$	$-1.17558 - 1.01449i$	$-1.17558 + 1.01449i$	-3.2252	6
$-4.50132 - 0.74750i$	$-4.50132 + 0.74750i$	$-1.60487 + 0.00000i$	$-0.50000 - 1.93378i$	-2.0867	7
$-4.65338 - 1.37662i$	$-4.65338 - 1.37662i$	$-2.83435 - 0.00000i$	$-1.60050 - 0.00000i$	-1.2396	8
$-4.53170 - 0.97733i$	$-4.53170 + 0.97733i$	$-1.19203 - 0.00000i$	$-0.50000 - 0.35150$	-0.2815	9
$-5.08572 + 0.00000i$	$-1.19200 - 0.00000i$	$-1.04063 - 0.57078i$	$-1.04063 + 0.57078i$	2.5029	10
$-4.47229 - 0.71326i$	$-4.47229 + 0.71326i$	$-1.19205 - 0.00000i$	$-0.5000 + 1.70841i$	4.4645	11
$-5.06505 + 0.00000i$	$-1.51605 - 0.00000i$	$-1.19208 + 0.00000i$	$-0.5000 + 0.83275i$	5.395	12
$-4.61490 - 1.24350i$	$-4.61490 + 1.24350i$	$-2.43548 - 0.00000i$	$-1.19205 + 0.00000i$	5.6159	13
$-4.55981 - 1.07589i$	$-4.55981 + 1.07589i$	$-1.58275 - 0.00000i$	$-1.19206 - 0.00000i$	7.2293	14
$-4.93529 - 0.00000i$	$-1.65630 - 0.08493i$	$-1.65630 + 0.08493i$	$-1.19205 + 0.00000i$	8.5512	15
$-1.57292 - 0.39217i$	$-1.57292 + 0.39217i$	$-1.51678 - 0.00000i$	$-1.19207 + 0.00000i$	9.7732	16

Tabelle 8: Bethe-Wurzeln aus Gleichung (38) ( $p = -0.6$ ,  $q = -0.3$ ,  $\xi = 1.2$ ,  $N = 4$ , aus [2] Tabelle 5.4)

$\mu_1$	$\mu_2$	$\mu_3$	$\mu_4$	$E_n$	$n$
$-0.71035 - 1.36767i$	$-0.71035 + 1.36767i$	$-0.50024 - 0.26039i$	$-0.50024 + 0.26039i$	-10.76127	1
$-1.91094 + 0.00000i$	$-0.50021 - 0.20995i$	$-0.50021 + 0.20995i$	1.47382	-9.28939	2
$-0.96346 - 0.70776i$	$-0.96346 + 0.70776i$	$-0.06264 - 0.79468i$	$-0.06264 - 0.79468i$	-6.64726	3
$-1.6631 + 0.00000i$	$-0.49817 - 0.48700i$	$-0.49817 + 0.48700i$	1.04836	-5.95319	4
$-3.89970 - 0.00000i$	$-0.99283 - 1.34713i$	$-0.99283 + 1.34713i$	1.35759	-4.04791	5
$-1.56030 - 0.12746i$	$-1.56030 + 0.12746i$	$-0.39547 - 0.16855i$	$-0.39547 + 0.16855i$	-3.22515	6
$-1.60493 + 0.00000i$	$-0.72696 - 1.77115i$	$-0.72696 + 1.77115i$	0.69601	-2.08666	7
-3.20888	-1.60051	-0.69733	3.72062	-1.23956	8
$-1.19203 + 0.00000i$	$-0.49706 - 0.34771i$	$-0.49706 + 0.34771i$	0.38698	-0.28153	9
$-1.71270 - 0.00000i$	$-1.19205 - 0.00000i$	$-0.49072 - 0.19568i$	$-0.49072 + 0.19568i$	2.50287	10
$-1.19205 - 0.00000i$	$-0.72527 - 1.56553i$	$-0.72527 + 1.56553i$	0.21839i	4.46454	11
$-1.61832 + 0.00000i$	$-1.19205 - 0.00000i$	$-0.51413 - 0.45569i$	$-0.51413 + 0.45569i$	5.39498	12
-2.59741	-1.19205	0.22830	2.64892	5.61585	13
-1.58150	-1.19206	0.09182	1.17787	7.22925	14
$-1.60145 + 0.00000i$	$-1.19206 - 0.00000i$	$-0.39610 - 1.21382i$	$-0.39610 + 1.21382i$	8.55124	15
-10.43047	-1.60000	-1.19206	5.40224	9.77318	16