Exakt lösbare Vertexmodelle in zwei und drei Dimensionen

Diplomarbeit
von
Rainer Raupach

Institut für Theoretische Physik
der
Universität zu Köln

September 1997

Inhaltsverzeichnis

Anhang

Kapitel 1

Einleitung

1.1 Grundlagen

Die statistische Physik versucht Aussagen über thermodynamische Eigenschaften von Gittermodellen zu machen. Dazu gehören Informationen über Phasenübergänge, Korrelationen und Response auf äußere Einflüsse. Ein wichtiges Feld bilden dabei klassische Modelle, bei denen im Gegensatz zu quantenmechanischen Systemen Spin-Operatoren kommutierende Objekte sind. An die Stelle des Hamilton-Operators tritt eine klassische Energiefunktion, die Hamilton-Funktion. Neben perturbativen Zugängen wie Hoch- oder Tieftemperatur-Entwicklungen sind exakte Resultate von besonderem Interesse.

Vertexmodelle dienen als Repräsentanten klassischer Systeme. Beispielsweise können Ising-, Potts- oder IRF-Modelle[1] [1] auf Vertexmodelle abgebildet werden und umgekehrt. Dies soll kurz am feldfreien Spin-$\frac{1}{2}$ Ising-Modell auf dem Quadratgitter mit Nächste-Nachbarn-Wechselwirkung (NN-Wechselwirkung) erläutert werden: Dort sitzen klassische Spin-Variable σ_i, die die Werte ± 1 annehmen können, auf den Gitterpunkten. Die Wechselwirkung zwischen benachbarten Spins ist durch Kopplungskonstanten J_{ij} gegeben, die den Verbindungslinien (= Bonds) zwischen den Gitterpunkten zugeordnet werden. Der Einfachheit halber habe J_{ij} überall denselben Wert J. Falls kein äußeres Feld wirkt, trägt jedes Paar von benachbarten Spins mit $\epsilon = J\sigma_i\sigma_j$ zur Gesamtenergie bei. Insbesondere ist die Gesamtenergie einer Spinkonfiguration also nur von der relativen Stellung benachbarter Spins abhängig. Man kann daher neue, auf den Bonds des dualen Gitters angesiedelte klassische Spins definieren, die mit den ursprünglichen in folgender Weise zusammenhängen: Stehen benachbarte Spins des ursprünglichen Ising-Modells parallel bzw. antiparallel, zeigt der zu diesem Paar korrespondierende Spin auf dem dualen Gitter nach oben bzw. unten oder nach rechts bzw. links.

---

[1] IRF = Interaction Round a Face, Modelle mit Wechselwirkung auf den Plaketten des Gitters

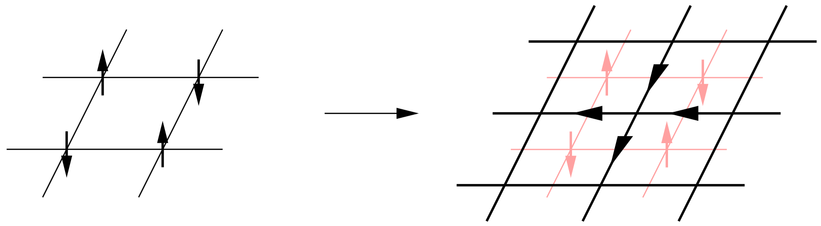


Abbildung 1.1: *Abbildung eines feldfreien Spin-$\frac{1}{2}$ Ising-Modells auf ein Vertexmodell.*

Abb. 1.1 zeigt dies an einem konkreten Beispiel. Ein nach oben bzw. rechts zeigender Pfeil repräsentiert den Zustand $+1$ der neuen klassischen Spinvariablen, entsprechend steht ein nach unten bzw. links zeigender Pfeil für den Wert -1. Die lokalen Beiträge der Energie für einen Gitterpunkt des dualen Gitters sind nun abhängig von den Stellungen der vier ihn umgebenden Pfeile. Eine solche Konfiguration wird als Vertex bezeichnet. Jedem Vertex kann nun der entsprechende Energiebeitrag oder äquivalent das zugehörige Boltzmanngewicht zugeordnet werden. Die Konfiguration aus Abb. 1.1 hat beispielsweise die Energie $\epsilon = -J - J - J - J = -4J$ bzw. das Gewicht $e^{-\epsilon/k_B T} = e^{4J/k_B T}$. Das feldfreie Spin-$\frac{1}{2}$ Ising-Modell auf dem Quadratgitter führt offensichtlich auf $2^3 = 8$ verschiedene Vertizes von insgesamt 16 möglichen. Den nicht realisierten Vertizes wird das Gewicht null zugeordnet, was der Energie $\epsilon = +\infty$ entspricht. Man hat somit eine Eins-zu-eins-Zuordnung jeder globalen Konfiguration der Spins des Ising-Modells mit einer Anordnung von Vertizes auf dem dualen Gitter.

Da die Zustände auf den Bonds zwei verschiedene Werte annehmen können, spricht man von einem Zwei-Zustands-Vertexmodell. Natürlich läßt sich das Konzept der Vertizes auch auf q mögliche Zustände übertragen, so daß es sich dann um ein q-Zustands-Vertexmodell handelt.

Der Grund, warum Vertexmodelle verwendet werden, ist die Tatsache, daß viele Problemstellungen und Methoden der statistischen Physik in diesem Formalismus einfacher zu behandeln sind, so z.B. Dualitätstransformationen [1] und der algebraische Bethe-Ansatz (bzw. die Yang-Baxter-Gleichung) [2]. Bekannt ist weiterhin der Zusammenhang zwischen D-dimensionalen Quantensystemen und $(D+1)$-dimensionalen Vertexmodellen, z.B. über die Quanten-Inverse-Streu-Methode [2] oder die Trotter-Suzuki-Abbildung. Ergebnisse über klassische Vertexmodelle liefern somit auch Informationen über quantenmechanische Systeme in einer um eins niedrigeren Dimension.

Das primäre Ziel bei der Untersuchung von statistischen Modellen ist die Berechnung der freien Energie pro Gitterplatz im thermodynamischen Limes. Daneben sind Momente der Spins und Korrelationen von Interesse. Häufig wird dazu der sogenannte Transfer-Zugang gewählt, der im folgenden genauer beschrieben wird. Man bildet dabei die Berechnung der Zustandssumme auf ein Eigenwertproblem ab. Thermodynamische Eigenschaften wie Korrelationen lassen sich auf solche von Eigenzuständen linearer Operatoren zurückführen.

In der vorliegenden Arbeit wird die Übertragbarkeit des in Quantensystemen erfolgreich eingesetzten Konzepts von sogenannten Matrixprodukt-Zuständen zur Konstruktion optimaler Grundzustände [6, 7] auf Vertexmodelle untersucht. Der Schwerpunkt liegt dabei auf der exakten Berechnung der freien Energie im thermodynamischen Limes. Im speziellen werden zwei- und dreidimensionale Systeme betrachtet. Während in zwei Dimensionen viele Modelle exakt gelöst sind, gibt es für dreidimensionale Modelle bis heute sehr wenige exakte Ergebnisse.

1.2 Transfermatrix-Methode bei Vertexmodellen

Für ein q-Zustands-Vertexmodell auf einem $N \times M$-Quadratgitter mit periodischen Randbedingungen sei das Boltzmanngewicht eines Vertex durch $\mathcal{R}\,(\mu, \alpha \,|\, \beta, \nu)$ gegeben, wobei μ, α, β und ν die wie in Abb. 1.2 definierten, an einen Gitterpunkt angrenzenden Bond-Zustände mit q möglichen Werten darstellen. Im folgenden werden die auf den Bonds angesiedelten Zustände als klassische Spins σ_i betrachtet, deren q verschiedene Werte formal durch die Ein-Spin-Zustände $|1\rangle, \ldots, |q\rangle$ beschrieben sind. Durch

$$T_{\mathrm{R}}{}_{\alpha_1,\ldots,\alpha_N}^{\beta_1,\ldots,\beta_N} = \sum_{k_1,\ldots,k_N=1}^{q} \mathcal{R}\,(k_1, \alpha_1 \,|\, \beta_1, k_2\,)\, \mathcal{R}\,(k_2, \alpha_2 \,|\, \beta_2, k_3\,) \ldots \mathcal{R}\,(k_N, \alpha_N \,|\, \beta_N, k_1\,) \tag{1.1}$$

wird die Reihentransfermatrix T_{R} definiert. Die Berechnung der Zustandssumme kann mithilfe dieses Operators auf ein algebraisches Problem zurückgeführt werden:

$$Z = \mathrm{Spur}\, T_{\mathrm{R}}{}^{M} = \sum_{i=1}^{q^N} \Lambda_i{}^{M}. \tag{1.2}$$

Wegen der Unabhängigkeit der Spur von der gewählten Basis, kann diejenige verwendet werden, in der die Transfermatrix in Jordan-Normalform ist. Bei der M-fachen Potenz der Transfermatrix erscheinen auf der Diagonalen die M-ten Potenzen der q^N Eigenwerte Λ_i von T_{R}.

Diese Darstellung der Zustandssumme ist im thermodynamischen Limes interessant. Für festes N sei Λ_{max} der betraglich maximale Eigenwert der Transfermatrix[2], d.h.

[2] Die Transfermatrix hat nur nichtnegative Matrixelemente. Daher folgt aus dem Satz von FROBENIUS, daß ein Eigenwert mit maximalen Betrag reell und positiv ist.

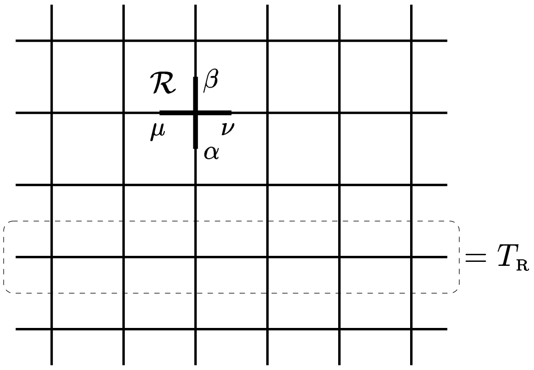


Abbildung 1.2: *Reihen-Transfermatrix T_{R} auf dem zweidimensionalen Quadratgitter.*

$|\Lambda_i| \leq \Lambda_{\max}$ für alle i. Für großes M gilt dann offensichtlich

$$Z \simeq \Lambda_{\max}^M, \tag{1.3}$$

und die freie Energie pro Gitterplatz ergibt sich als

$$-\frac{f}{k_B T} = \lim_{M,N\to\infty} \frac{1}{NM} \ln Z = \lim_{N\to\infty} \frac{\ln \Lambda_{\max}}{N}. \tag{1.4}$$

Für die Gültigkeit dieses Ergebnisses wird angenommen, daß die Art und Weise der Bildung des thermodynamischen Limes unerheblich ist, die Grenzwertprozesse $N \to \infty$ und $M \to \infty$ also vertauschen. Bei Systemen, die bei Rotation um 90° in sich selbst übergehen, ist dies klar, da die Transfermatrizen in beiden Raumrichtungen bis auf den Austausch von Systemparametern identisch sind. Die Wahl einer bestimmten Transfermatrix ist damit genau wie die explizite Ausführung des thermodynamischen Limes willkürlich.

Systeme ohne diese Eigenschaft hingegen erlauben diesen Schluß nicht. Dennoch gibt es auch für diese Fälle Theoreme. Ist das Vertexmodell beispielsweise über die Trotter-Suzuki-Abbildung mit einem Quantensystem mit kurzreichweitiger Wechselwirkung verknüpft, kann die Vertauschbarkeit der Grenzwerte bewiesen werden [3].

Ein strenger Beweis kann auch geführt werden, wenn eine Funktion $h(N,M)$ existiert mit den Eigenschaften

$$0 < h(N,M) \leq \frac{Z}{\Lambda_{\max}^M} \tag{1.5}$$

für alle N, M und

$$\lim_{N,M\to\infty} \frac{\ln h(N,M)}{NM} = 0. \tag{1.6}$$

Beweis:
Nach Voraussetzung und wegen $|\Lambda_i| \leq \Lambda_{\max}$ gilt

$$\begin{aligned} h(N,M) &\leq \frac{Z}{\Lambda_{\max}^M} \leq q^N \\ \Longleftrightarrow \quad \frac{\ln h(N,M)}{NM} &\leq \frac{\ln Z}{NM} - \frac{\ln \Lambda_{\max}}{N} \leq \frac{\ln q}{M}. \end{aligned}$$

Für $N, M \to \infty$ konvergieren sowohl der linke als auch der rechte Ausdruck gegen null, unabhängig von der Reihenfolge. Nach Definition der freien Energie folgt damit unmittelbar (1.4). Dieses Theorem kann insbesondere verwendet werden, wenn alle Eigenwerte Λ_i reell und positiv sind. Man wählt dazu $h(N,M) \equiv 1$.

Bekannt ist ebenfalls die Gültigkeit für Systeme, bei denen zwischen den Eigenwerten $|\Lambda_i| = \Lambda_{\max}$ und denen mit $|\Lambda_i| < \Lambda_{\max}$ eine im thermodynamischen Limes bestehende Lücke existiert.

Das zu lösenden Eigenwertproblem $T_{\mathrm{R}}\,|\Psi\rangle = \lambda\,|\Psi\rangle$ ist allerdings insofern kompliziert, als die Eigenzustände von T_{R} q^N-dimensionale Vektoren sind, was in der Regel den Übergang $N \to \infty$ erschwert. Eine Möglichkeit, die Kenntnis dieser Eigenzustände in hochdimensionalen Räumen zu umgehen, bietet die Verwendung der Diagonal-zu-Diagonal-Transfermatrix (DTM). Ausgangspunkt ist ein um 45° gedrehtes Quadratgitter. Die sich neu formierenden Gitterpunkte werden mit einem Zeilenindex 1 bis M und einem Spaltenindex 1 bis N versehen, die periodischen Randbedingungen neu definiert. Möglich ist die Verwendung chiraler Randbedingungen in beiden Raumrichtungen, wie in Abb. 1.3 dargestellt ist.

In diesem Fall hat man zwei verschiedene Matrizen T'_{D} und T''_{D}, die als

$$\begin{aligned} T'_{\mathrm{D}}{}^{\beta_1,\ldots,\beta_{2N}}_{\alpha_1,\ldots,\alpha_{2N}} &= \prod_{i=1}^{N} \mathcal{R}\left(\alpha_{2i}, \alpha_{2i+1} \,|\, \beta_{2i}, \beta_{2i+1}\right) \\ T''_{\mathrm{D}}{}^{\beta_1,\ldots,\beta_{2N}}_{\alpha_1,\ldots,\alpha_{2N}} &= \prod_{i=1}^{N} \mathcal{R}\left(\alpha_{2i-1}, \alpha_{2i} \,|\, \beta_{2i-1}, \beta_{2i}\right) \end{aligned} \tag{1.7}$$

definiert werden, wobei sich die Periodizität in der Identität $2N+1 \equiv 1$ äußert. Die vollständige DTM ist einfach das Produkt von T'_{D} und T''_{D}, so daß die Zustandssumme als

$$Z = \mathrm{Spur}\; T_{\mathrm{D}}^{M/2} = \mathrm{Spur}\; \left(T'_{\mathrm{D}} T''_{\mathrm{D}}\right)^{M/2} \tag{1.8}$$

geschrieben werden kann. Für diese Art von Randbedingungen muß M also gerade sein. Ebenfalls möglich ist das Etablieren von normal periodischen Randbedingungen in einer Raumrichtung und chiralen in der anderen (vgl. Abb. 1.4). Das Gitter kann dabei als geschertes Quadratgitter betrachtet werden derart, daß die horizontalen Bonds zu Diagonalen werden, die vertikalen Bonds ihre Lage beibehalten und

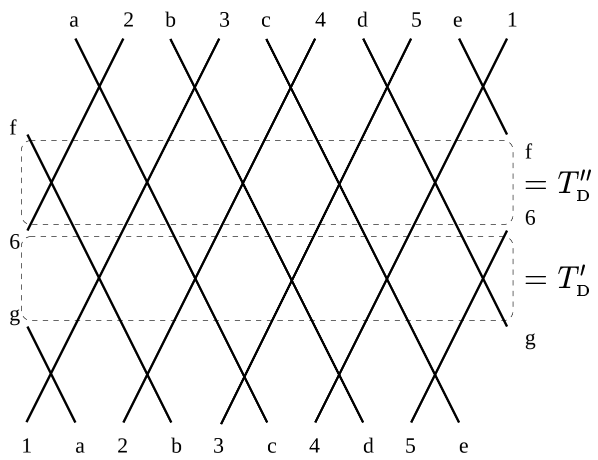


Abbildung 1.3: *DTM* $T_D = T'_D{\cdot}T''_D$ *auf dem zweidimensionalen Quadratgitter mit doppelt chiralen Randbedingungen für* $N = 5$, $M = 4$. *Ist* $N = M$, *stimmen diese Randbedingungen mit den gewöhnlichen überein.*

die Ränder einfach periodisch verbunden werden.

Man definiert die DTM als

$$T_{\mathrm{D}}{}^{\beta_1,\ldots,\beta_{2N}}_{\alpha_1,\ldots,\alpha_{2N}} = \prod_{i=1}^{N} \mathcal{R}\left(\alpha_{2i-1}, \alpha_{2i} \,|\, \beta_{2i}, \beta_{2i+1}\right), \tag{1.9}$$

wobei wiederum $2N + 1 \equiv 1$ gesetzt wird, und erhält auch hier einen einfachen algebraischen Ausdruck für die Zustandssumme, nämlich

$$Z = \mathrm{Spur}\, T_{\mathrm{D}}{}^{M}. \tag{1.10}$$

Die graphische Darstellung der Boltzmanngewichte als Vertizes ist in beiden Fällen mit der des einfachen Quadratgitters konsistent (vgl. Abb. 1.5).

Der entscheidende Unterschied zwischen Reihen- und Diagonal-zu-Diagonal-Transfermatrizen liegt offenbar in der Tatsache, daß im ersten Fall eine Summe von Termen, im zweiten Fall eine reine Produktstruktur vorliegt. Auf dieser charakteristischen Eigenschaft der DTM basiert gerade das in dieser Arbeit vorgestellte Verfahren. Alle Bemerkungen über die Berechnung der freien Energie bei der Reihen-Transfermatrix gelten natürlich auch für die DTM.

Wählt man in der Richtung, in der die Transfermatrix wirkt, keine periodischen Randbedingungen sondern die vorgegebenen Zustände $|\Psi_\alpha\rangle$ und $|\Psi_\beta\rangle$ als Ränder, kann die Zustandssumme als

$$Z = \left\langle \Psi_\alpha \left| T^M \right| \Psi_\beta \right\rangle, \tag{1.11}$$

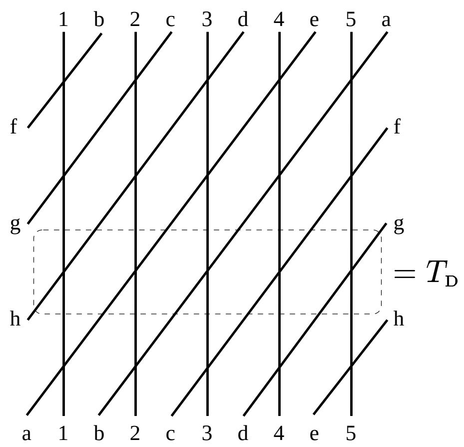


Abbildung 1.4: *DTM T_D auf dem zweidimensionalen Quadratgitter unter Verwendung chiraler Randbedingungen in einer Raumrichtung und normal periodischer in der anderen. Für den Fall $N = M$ erhält man die gewöhnlichen Randbedingungen.*

$\mathcal{R}(\mu, \alpha \,|\, \beta, \nu) \quad \longleftrightarrow$

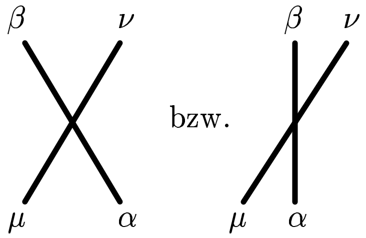


Abbildung 1.5: *Graphische Zuordnung der $\mathcal{R}$-Matrix.*

dargestellt werden, wobei T irgendeine der oben vorgestellten Transfermatrizen ist. Gilt speziell $|\Psi_\beta\rangle = |\Psi_\alpha\rangle$ und ist dieser Zustand gleichzeitig Eigenzustand der Transfermatrix zum Eigenwert Λ, erhält man

$$Z = \Lambda^M \quad \Longrightarrow \quad f = -k_B T \lim_{N\to\infty} \frac{\ln \Lambda}{N}. \tag{1.12}$$

Der Zustand $|\Psi_\alpha\rangle$ ist genau dann ohne die externen Randbedingungen auf dem periodischen Gitter stabil, wenn Λ der einzige Eigenwert von T mit maximalem Betrag und zudem einfach ist.

1.3 Unordnungs-Linien von Vertex-Modellen

Das grundsätzliche Ziel besteht in der Berechnung der Zustandssumme für das System, um mit deren Hilfe Aussagen über thermodynamische Eigenschaften zu machen, was bis hierher mit der Transfermatrix-Methode formal geschehen ist. Konkrete Rechnungen sind im allgemeinen aber kompliziert, da die Dimension der Matrizen im thermodynamischen Limes exponentiell wächst. Ein Ausweg liegt im Zurückgreifen auf ein lokales Kriterium, analog zur Konstruktion optimaler Grundzustände von Quantensystemen [6, 7].

Ausgangspunkt sei noch einmal ein diagonal liegendes Quadratgitter, wobei nun die Randbedingungen so gewählt sind, daß die Rand-Spins vollständig ungeordnet sind, was genau freien Spin-Variablen entspricht, über die in der Zustandssumme später summiert wird (Abb. 1.6).

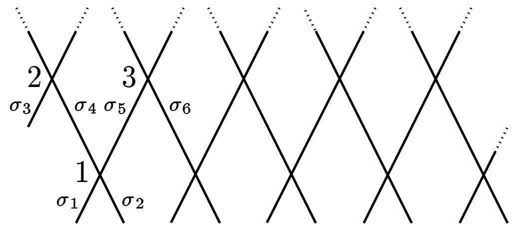


Abbildung 1.6: *Vertexmodell mit freien Rändern.*

Die Zustandssumme ist dann die Summe der Boltzmanngewichte über alle möglichen Konfigurationen der Zustände auf den Bonds, inklusive der Ränder

$$Z = \sum_{\sigma_1,\sigma_2,\dots} e^{-\beta E\{\sigma\}} = \sum_{\sigma_1,\sigma_2,\dots} \prod_{\text{alle Vertizes}} \mathcal{R}\left(\sigma_{i_1}, \sigma_{i_2} \,|\, \sigma_{j_2}, \sigma_{j_1}\right). \tag{1.13}$$

Z kann nun durch folgendes Dezimierungsverfahren in bestimmten Fällen vertexweise berechnet werden: Summiere bei festem σ_4, σ_5 über die beiden externen Spin-Variablen σ_1 und σ_2. Es resultiert ein effektiver Anteil der Spins σ_4, σ_5 an der Energie,

$$\sum_{\sigma_1,\sigma_2} \mathcal{R}\left(\sigma_1, \sigma_2 \,|\, \sigma_4, \sigma_5\right) = \mathcal{R}^*\left(\sigma_4, \sigma_5\right). \tag{1.14}$$

Dieselbe Prozedur läßt sich für die nun neu am Rand des Gitters stehenden Vertizes 2 und 3 genau dann ausführen, wenn die Boltzmanngewichte von der gleichen Form wie der ursprüngliche Rand-Vertex sind. Da aber nach Konstruktion des Gitters alle $\mathcal{R}$-Operatoren identisch sind, muß man für die sukzessive Fortsetzung des Verfahrens $\mathcal{R}^*\left(\sigma_4, \sigma_5\right) =$ konstant fordern, etwa

$$\sum_{\sigma_1,\sigma_2} \mathcal{R}\left(\sigma_1, \sigma_2 \,|\, \sigma_4, \sigma_5\right) = g, \tag{1.15}$$

so daß nach (1.13) $Z = g^N$ (N = Anzahl der Vertizes des Gitters) und die freie Energie pro Gitterplatz damit einfach $f = -k_B T \ln g$ ist. Die Bedingung (1.15) schränkt dabei den Parameterbereich des Modells auf eine niedriger-dimensionale Mannigfaltigkeit ein. Betrachtet man nun die $\mathcal{R}$-Matrix als einen auf einen Zwei-Spin-Zustandsraum wirkenden Operator, also als eine lokale Transfermatrix, die Zwei-Spin-Zustände von unten nach oben durchschiebt, so ist (1.15) äquivalent zu

$$\mathcal{R}\Big[\,|v\rangle \otimes |v\rangle\,\Big] = g\;|v\rangle \otimes |v\rangle\,. \tag{1.16}$$

Dabei ist $|v\rangle = \sum_i |i\rangle$ die Summe aller möglichen Ein-Spin-Zustände an dem Bein eines Vertex. Den Basiszuständen $|i\rangle \otimes |j\rangle$ werden die Einheitsvektoren $e_{q(i-1)+j}$ zugeordnet und $\mathcal{R}$ als $q^2 \times q^2$-Matrix über $\mathcal{R}_{q(\beta-1)+\nu, q(\mu-1)+\alpha} = \mathcal{R}\,(\mu, \alpha \,|\, \beta, \nu)$ definiert. Für ein Zwei-Zustands-Vertexmodell etwa ist $|v\rangle = |1\rangle + |2\rangle$ und $\mathcal{R}$ eine 4×4-Matrix. Der "Grundzustand" des Modells hat damit offenbar die Eigenschaft, daß jeder Spin vollkommen ungeordnet ist, da beide Ein-Spin-Zustände mit gleicher Wahrscheinlichkeit vorliegen[3].

Wegen der einfachen Tensorprodukt-Struktur verschwinden sämtliche Korrelationen in dem Sinne, daß Korrelationsfunktionen nur einen konstanten Anteil besitzen. Man spricht daher von Unordnungslinien bzw. -flächen auf der Parametermannigfaltigkeit des Vertexmodells [4, 5].

1.4 Matrixprodukt-Zustände

Ursache für das Verschwinden der Korrelationen auf den Unordnungslinien des Modells ist die Tatsache, daß der globale Zustand aus einem einfachen Tensorprodukt von Ein-Spin-Zuständen besteht, was wiederum aus dem geforderten lokalen Kriterium (1.15) resultiert. Um nichttriviale Korrelationen zu bekommen und dabei trotzdem die Produktstruktur beizubehalten, kann man Matrizen, deren Einträge Ein-Spin-Zustände sind, multiplizieren. Die Idee der Benutzung von Matrixprodukt-Zuständen wurde zuerst von A. Klümper, A. Schadschneider und J. Zittartz zur Konstruktion von Grundzuständen antiferromagnetischer Quanten-Ketten angewandt [6]. Diese Zustände erweisen sich aber auch für andere physikalische Probleme als geeignete Variationszustände, so z.B. auch für klassische Probleme, was in dieser Arbeit diskutiert werden soll, oder im Zusammenhang mit stochastischen Prozessen.

Es seien m bzw. $\overline{m}$ Matrizen bestehend aus Ein-Spin-Zuständen bezüglich zweier verschiedener Bonds, etwa

$$m = \begin{pmatrix} |A\rangle & |B\rangle \\ |C\rangle & |D\rangle \end{pmatrix}, \quad \overline{m} = \begin{pmatrix} |\overline{A}\rangle & |\overline{B}\rangle \\ |\overline{C}\rangle & |\overline{D}\rangle \end{pmatrix}. \tag{1.17}$$

[3] Im Sinne von (1.11) ist $|\Psi_a\rangle = |\Psi_b\rangle = |v\rangle \otimes \ldots \otimes |v\rangle$ und $T_{\mathrm{D}}\,|\Psi_a\rangle = g\,|\Psi_a\rangle$, woraus dieselben Ergebnisse für Z und f folgen.

Das Matrixprodukt $m\,\overline{m}$ wird nun definiert durch

$$\begin{pmatrix} |A\rangle & |B\rangle \\ |C\rangle & |D\rangle \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} |\overline{A}\rangle & |\overline{B}\rangle \\ |\overline{C}\rangle & |\overline{D}\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} |A\overline{A}\rangle + |B\overline{C}\rangle & |A\overline{B}\rangle + |B\overline{D}\rangle \\ |C\overline{A}\rangle + |D\overline{C}\rangle & |C\overline{B}\rangle + |D\overline{D}\rangle \end{pmatrix}, \tag{1.18}$$

was bis auf die Tatsache, daß die Verknüpfung der Matrixelemente durch das Tensorprodukt gegeben ist, den Regeln der gewöhnlichen Matrizenmultiplikation entspricht. Die Einträge der Ergebnismatrix sind also Zwei-Spin-Zustände, wobei die verkürzte Schreibweise $|XY\rangle = |X\rangle \otimes |Y\rangle$ verwendet wird.

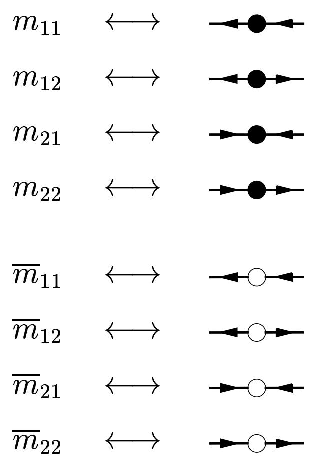


Abbildung 1.7: *Graphische Repräsentation von Matrix-Zuständen.*

Zur späteren Vereinfachung sei hier eine graphische Repräsentation des Matrixproduktes eingeführt [7, 8]. Eine Matrix läßt sich als Tensor zweiter Stufe offenbar durch einen Vertex mit zwei Beinen, denen die beiden Indizes entsprechen, darstellen. Die Pfeile an den Enden haben im Falle einer 2×2-Matrix jeweils zwei Einstellmöglichkeiten. Die Zuordnung von Zuständen und Graphen ist in Abb. 1.7 dargestellt.

Um die Elemente des Matrixprodukt-Zustandes $m\,\overline{m}$ zu erhalten, setzt man einfach Vertizes geeignet zusammen und summiert über die inneren Pfeile, was exakt der Matrixmultiplikation entspricht. Abb. 1.8 zeigt den Eintrag $(m\,\overline{m})_{22}$.

Abbildung 1.8: *Graphische Repräsentation des Matrixproduktes.*

Es sei an dieser Stelle auf den Unterschied zwischen Vertizes im gewöhnlichen Sinne, bei denen es sich um Boltzmanngewichte handelt, und den hier definierten Vertex-Zuständen hingewiesen. Außerdem ist es evident, wie die Graphen auf $n \times n$-Matrizen verallgemeinert werden können. Im Fall $n = 1$ wird die Matrizenmultiplikation trivial zum Tensorprodukt von Zuständen.

Kapitel 2

Zweidimensionale Systeme

2.1 Parentale Vertexmodelle

In Analogie zu Quantenspin-Systemen sei ein parentales Vertexmodell zu einem vorgegebenen Zustand $|\Psi_G\rangle$ dasjenige Modell, zu dem $|\Psi_G\rangle$ Grundzustand ist, d.h. ein Eigenzustand der DTM zum betraglich größten Eigenwert $|\Lambda| = \Lambda_{\max}$. Alle Eigenzustände mit $|\Lambda| < \Lambda_{\max}$ werden als angeregte Zustände bezeichnet.

Das Prinzip soll konkret an einem q-Zustands-Vertex-Modell auf einem Quadratgitter mit Randbedingungen wie in Abb. 1.4 erläutert werden, weil hier nur ein Typ von Transfermatrix erforderlich ist. Grundsätzlich läßt sich das im folgenden vorgestellte Verfahren jedoch problemlos auf den Fall der doppelt chiralen Randbedingungen (Abb. 1.3) übertragen. Die Struktur der DTM erlaubt es, sich hierbei auf ein lokales Kriterium zu beschränken. Es soll nun das eben vorgestellte Unordnungs-Kriterium (1.16) insofern verallgemeinert werden, daß anstelle von einfachen Ein-Spin-Zuständen Matrixprodukt-Zustände verwendet werden und für beide an einen Vertex angrenzenden Bonds verschiedene Zustände möglich sind.

Wie oben seien wiederum m und $\overline{m}$ Matrizen aus Ein-Spin-Zuständen, die auf den Bonds eines Vertexmodelles definiert sind. Die lokale $\mathcal{R}$-Matrix, die auf diese beiden Bondzustände wirkt, soll für $i, j = 1, \ldots, n$ folgende Bedingung erfüllen:

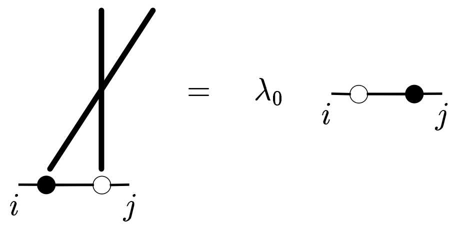


Abbildung 2.1: *Geforderte Eigenschaft der $\mathcal{R}$-Matrix.*

Formal ist die geforderte Bedingung äquivalent zu

$$\mathcal{R}\left[m\,\overline{m}\right] = \lambda_0\,\overline{m}\,m \quad (\lambda_0 > 0)\,, \tag{2.1}$$

d.h. per definitionem $\mathcal{R}\left[(m\,\overline{m})_{ij}\right] = \lambda_0\,(\overline{m}\,m)_{ij}$. Der Zusammenhang der graphischen Darstellung und der $\mathcal{R}$-Matrix ist dabei wie oben gegeben. Hat man Zustände m und $\overline{m}$ sowie einen $\mathcal{R}$-Operator gefunden, die dieser Bedingung genügen, so kann man daraus eine Art optimalen Grundzustand $|\Psi_G\rangle$ eines klassischen Modells bei einer bestimmten Temperatur T konstruieren, dessen lokale Hamiltonfunktion durch $H\,(\mu,\alpha\,|\,\beta,\nu) = -k_BT\ln\mathcal{R}\,(\mu,\alpha\,|\,\beta,\nu)$ gegeben ist. Aus (2.1) und der Definition der DTM folgt nämlich unmittelbar

$$\begin{aligned} T_{\mathrm{D}}\,|\Psi_G\rangle &= \lambda_0^N\,|\Psi_G\rangle\,, \\ \text{mit}\ \ |\Psi_G\rangle &= \mathrm{Spur}(m\,\overline{m})^N. \end{aligned} \tag{2.2}$$

Unter den in Kap. 1.2 gemachten Voraussetzungen und falls $\lambda_0^N = \Lambda_{\max}$ der betraglich größte Eigenwert von T_{D} ist, kann die Zustandssumme sofort berechnet werden. Die freie Energie pro Gitterplatz im thermodynamischen Limes ist $f = -k_BT\ln\lambda_0$.

Der Begriff “Optimaler Grundzustand” ist in dem Sinne zu verstehen, daß lokal schon die maximal möglichen thermischen Gewichte vorliegen, nämlich λ_0, und sich das Gesamtgewicht daher einfach als λ_0^{MN} ergibt. Der Beitrag des Zustandes $|\Psi_G\rangle$ zur freien Energie ist damit exakt extensiv ohne finite-size Korrekturen.

Das gleiche Ergebnis für f erhält man für den Fall, daß der Zustand $|\Psi_G\rangle$ als Randbedingung vorgegeben wird, dann sogar völlig unabhängig von den anderen Eigenwerten (vgl. (1.11)).

Das Kriterium (2.1) läßt sich in eine Operatorgleichung umformen. Dazu sei $\mathcal{P}$ ein auf den Paar-Spin-Raum wirkender Operator mit der Eigenschaft

$$\mathcal{P}\left[m\,\overline{m}\right] = \overline{m}\,m. \tag{2.3}$$

Im allgemeinen wird der Zustandsraum der Zwei-Spin-Zustände jedoch größer sein als derjenige, der durch Matrixeinträge von $m\,\overline{m}$ aufgespannt wird. In diesem Fall ist $\mathcal{P}$ durch diese Forderung allein noch nicht vollständig definiert, sondern nur die Beschränkung auf den Unterraum, der durch die n^2 Paar-Zustände des Matrixproduktes $m\,\overline{m}$ aufgespannt wird. Die in Abb. 2.1 graphisch definierte Bedingung schreibt sich dann als

$$(\mathcal{R} - \lambda_0\mathcal{P})\,m\,\overline{m} = 0 \tag{2.4}$$

Die Einträge der beiden verschiedenen Matrixprodukte von m und $\overline{m}$ werden über

$$\begin{aligned} (m\,\overline{m})_{ij} &= \left|v_{n(i-1)+j}\right\rangle \\ (\overline{m}\,m)_{ij} &= \left|w_{n(i-1)+j}\right\rangle \end{aligned} \tag{2.5}$$

definiert und spannen jeweils maximal n^2-dimensionale Unterräume

$$V = \Big\langle \, |v_1\rangle\,, |v_2\rangle\,, \ldots, |v_{n^2}\rangle \, \Big\rangle, \quad W = \Big\langle \, |w_1\rangle\,, |w_2\rangle\,, \ldots, |w_{n^2}\rangle \, \Big\rangle \tag{2.6}$$

des Raumes der Zwei-Spin-Zustände auf. Es sei d die Dimension von V $(d \leq n^2)$ und ein Satz von Basisvektoren des orthogonalen Komplementes zu V durch die Definition

$$V^{\perp} = \Big\langle \, \left|v_1^{\perp}\right\rangle, \left|v_2^{\perp}\right\rangle, ..., \left|v_k^{\perp}\right\rangle \, \Big\rangle \tag{2.7}$$

gegeben, wobei $k = q^2 - d$ ist[1]. Ohne Beschränkung der Allgemeinheit gelte $\left\langle v_i^{\perp} \middle| v_j^{\perp} \right\rangle = \delta_{ij}$, d.h die Zustände $\left|v_i^{\perp}\right\rangle$ sollen ein Orthonormalsystem bilden. Zusätzlich werde eine Orthonormalbasis $|u_1\rangle\,, \ldots, |u_d\rangle$ von V gewählt, es gilt also $\langle u_i | u_j \rangle = \delta_{ij}$. $\mathcal{P}$ muß die Forderung $\mathcal{P}\,|v_i\rangle = |w_i\rangle$ für $i = 1, \ldots, n^2$ erfüllen, hat demnach die Gestalt

$$\mathcal{P} = \sum_{j=1}^{k} \left(\sum_{i=1}^{d} p_{ij} \, |u_i\rangle + \sum_{i=1}^{k} p_{ij}^{\perp} \left|v_i^{\perp}\right\rangle \right) \left\langle v_j^{\perp}\right| + \mathcal{P}_V, \tag{2.8}$$

wobei $\mathcal{P}_V$ durch $\mathcal{P}_V\,|v_i\rangle = |w_i\rangle$ sowie $\mathcal{P}_V \left|v_i^{\perp}\right\rangle = 0$ definiert wird, und beinhaltet $k(k+d) = q^2\,(q^2 - d)$ Freiheitsgrade.

Im folgenden ist es das Ziel, den allgemeinsten Operator $\mathcal{R}$ zu konstruieren, der das lokale Kriterium (2.1) bzw. Abb. 2.1 erfüllt. Dabei soll λ_0 das lokal maximale Gewicht, also λ_0^N der maximale Eigenwert der DTM sein. Um die Physikalität des Modells zu garantieren, muß selbstverständlich sichergestellt werden, daß die Vertexgewichte nichtnegativ sind, was äquivalent zu einer reellen Hamiltonfunktion ist. Zunächst wird der allgemeinste Operator A mit der Eigenschaft, alle Zustände aus V zu vernichten, d.h. $A\,|v_i\rangle = 0$, gebildet. Offenbar gilt

$$A = \sum_{j=1}^{k} \left(\sum_{i=1}^{d} \alpha_{ij} \, |u_i\rangle + \sum_{i=1}^{k} \alpha_{ij}^{\perp} \left|v_i^{\perp}\right\rangle \right) \left\langle v_j^{\perp}\right|. \tag{2.9}$$

Man erhält hier zunächst noch einmal $k(k+d)$ kontinuierliche Parameter, die aber keine neuen Freiheitsgrade darstellen, was sofort klar werden wird. Da nach Konstruktion $A\, m\, \overline{m} = 0$ ist, identifiziere

$$\mathcal{R} = A + \lambda_0 \mathcal{P}. \tag{2.10}$$

Nun ist offensichtlich, daß man ohne Einschränkung $p_{ij} = p_{ij}^{\perp} = 0$, also $\mathcal{P} = \mathcal{P}_V$ setzen kann. Ist p die Anzahl der kontinuierlichen Parameter in m und $\overline{m}$, so beträgt

[1]Der Raum der Zwei-Spin-Zustände hat die Dimension q^2.

damit die Zahl der unabhängigen, kontinuierlichen Parameter des parentalen Vertex-Modells maximal

$$q^2\left(q^2-d\right)+p. \tag{2.11}$$

Anzahl und Wertebereiche der Parameter müssen durch die zwei folgenden Forderungen eventuell reduziert bzw. eingeschränkt werden:

- **Physikalität**

  Wie oben bereits erwähnt ist die Hamiltonfunktion des Modells genau dann reell, und damit physikalisch sinnvoll, wenn die Vertex-Gewichte, also die Matrixelemente von $\mathcal{R}$ in der kanonischen Zwei-Spin-Basis reell und nichtnegativ sind. Es ist somit

  $$\mathcal{R}\left(\mu,\alpha\,|\,\beta,\nu\right)\geq 0 \tag{2.12}$$

  für alle μ, ν, α und β zu fordern.

- **Extremalität des Eigenwertes**

  Damit $|\psi\rangle=\mathrm{Spur}(m\,\overline{m})^N$ ein Zustand mit dem größten thermodynamischen Gewicht ist, muß garantiert werden, daß λ_0^N der betraglich größte Eigenwert der DTM ist. Die Behandlung des Eigenwertproblemes für T_{D} wird erheblich durch die Indexverschiebung beim Übergang in die nächste Reihe erschwert. Lokal, d.h. für jeden $\mathcal{R}$-Operator, liegt daher kein echtes Eigenwertproblem vor. Konkrete Aussagen über die Eigenwerte von T_{D} lassen sich aber im speziellen Fall machen, daß

  $$m=\overline{m}\quad\text{und}\quad\mathcal{R}=\text{hermitesch} \tag{2.13}$$

  gilt, was für $\mathcal{R}$ genau $\alpha_{ij}=0$, $\alpha_{ij}^{\perp}=\left(\alpha_{ij}^{\perp}\right)^*$ bedeutet. Man beachte, daß die Matrixelemente $\mathcal{R}\left(\mu,\alpha\,|\,\beta,\nu\right)$ in der kanonischen Zwei-Spin-Basis natürlich reell sein müssen (vgl. Physikalität), in der Basis, in der die Parameter α_{ij} und $\alpha_{ij}^{\perp}$ definiert sind, dies jedoch nicht notwendigerweise der Fall sein muß.

  Damit ist $|v_i\rangle=|w_i\rangle$, $V=W$ und die $\mathcal{R}$-Matrix diagonalisierbar, wobei auf V bereits Diagonalgestalt vorliegt. Mit diesen Einschränkungen gilt nämlich nach Definition $\mathcal{R}\,|u_\mu\rangle=\lambda_0\,|u_\mu\rangle$. V und $V^\perp$ bilden invariante Unterräume von $\mathcal{R}$, denn es gilt $\left\langle v_\mu^\perp\,|\mathcal{R}|\,v_\nu\right\rangle=\left\langle v_\mu\,\middle|\mathcal{R}|\,v_\nu^\perp\right\rangle=0$. Die durch den Ansatz von A eingeführte Matrix $\alpha^\perp$ hängt mit $\mathcal{R}$ wie folgt zusammen:

  $$\alpha_{\mu\nu}^\perp=\left\langle v_\mu^\perp\,\middle|\mathcal{R}|\,v_\nu^\perp\right\rangle. \tag{2.14}$$

  Es handelt sich also um eine Darstellung von $\mathcal{R}$ in der Basis $\left|v_\mu^\perp\right\rangle$.

Behauptung:
λ_0^N ist der betraglich größte Eigenwert der DTM, wenn der betraglich größte Eigenwert $\alpha_{\text{max}}^\perp$ von $\alpha^\perp$ der Bedingung

$$\left|\alpha_{\text{max}}^\perp\right| \leq \lambda_0 \tag{2.15}$$

genügt. Gilt sogar die strenge Ungleichung, kann jeder Grundzustand des Modells aus den Zwei-Spin-Zuständen $|v_1\rangle, \ldots, |v_{n^2}\rangle$ aufgebaut werden. Dies soll im folgenden bewiesen werden.

Beweis:
Da $\mathcal{R}$ hermitesch ist, seien die oben schon definierten Vektoren $\left|v_1^\perp\right\rangle, \ldots, \left|v_k^\perp\right\rangle$ ohne Beschränkung der Allgemeinheit so gewählt, daß $\mathcal{R}$ dadurch auf dem invarianten Unterraum $V^\perp$ diagonal wird. Natürlich soll weiterhin $\left\langle v_\mu^\perp \middle| v_\nu^\perp \right\rangle = \delta_{\mu\nu}$ gelten. Die DTM wird für feste Anzahl N von lokalen $\mathcal{R}$-Operatoren betrachtet. Damit wirkt T_{D} auf einen q^{2N}-dimensionalen Vektorraum mit der Orthonormalbasis

$$\left\{\, |\phi_1\rangle \otimes \ldots \otimes |\phi_N\rangle \,\right\}, \tag{2.16}$$

wobei $|\phi_j\rangle \in \{|u_1\rangle, \ldots, |u_d\rangle, \left|v_1^\perp\right\rangle, \ldots, \left|v_k^\perp\right\rangle\}$. Jeder beliebige Vektor $|\varphi\rangle$ im Zustandsraum von T_{D} kann damit als

$$|\varphi\rangle = \sum_{i=1}^{q^{2N}} \gamma_i \left|\phi_1^{(i)}\right\rangle \otimes \ldots \otimes \left|\phi_N^{(i)}\right\rangle \tag{2.17}$$

dargestellt werden. Die quadratische Norm dieses Zustandes ist einfach

$$\langle \varphi | \varphi \rangle = \sum_{i=1}^{q^{2N}} |\gamma_i|^2 \,. \tag{2.18}$$

Es sei τ ein Operator, der auf dem Raum der DTM unter Beachtung der chiralen Randbedingungen eine Translation der Operator-Indizes nach rechts induziert, d.h.

$$(\tau\, T_{\text{D}})_{\alpha_1,\ldots,\alpha_{2N}}^{\beta_1,\ldots,\beta_{2N}} = T_{\text{D}}{}_{\alpha_1,\ldots,\alpha_{2N}}^{\beta_{2N},\beta_1,\ldots,\beta_{2N-1}}. \tag{2.19}$$

Dadurch wird in T_{D} die Index-Verschiebung, die durch die Scherung des Gitters entsteht, aufgehoben (vgl. Kap. 1.2). Besonders deutlich wird dies in der graphischen Darstellung von $\tau\, T_{\text{D}}$ (Abb. 2.2).

τ ist offenbar unitär, d.h. genau $\tau^\dagger = \tau^{-1}$. Es folgt

$$\begin{aligned} \tau\, T_{\text{D}} |\varphi\rangle &= \sum_{i=1}^{q^{2N}} \gamma_i \mathcal{R} \left|\phi_1^{(i)}\right\rangle \otimes \ldots \otimes \mathcal{R} \left|\phi_N^{(i)}\right\rangle \\ &= \sum_{i=1}^{q^{2N}} \gamma_i c_i \left|\phi_1^{(i)}\right\rangle \otimes \ldots \otimes \left|\phi_N^{(i)}\right\rangle \end{aligned} \tag{2.20}$$

$$(\tau\, T_{\mathrm{D}})^{\{\beta\}}_{\{\alpha\}} \quad =$$

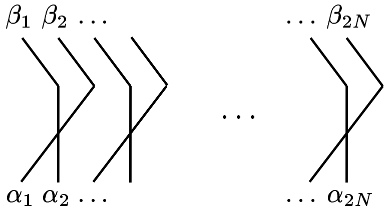


Abbildung 2.2: *Graphische Darstellung des Operators $\tau\, T_D$.*

Der zweite Schritt gilt nach Definition der $\left|\phi_j^{(i)}\right\rangle$. $c_1, \ldots, c_{q^{2N}}$ sind nach der Voraussetzung (2.15) reelle Zahlen mit $|c_j| \leq \lambda_0^N$. Man liest die quadratische Norm dieses Zustands sofort als

$$\big|\big|\; \tau\, T_{\mathrm{D}}\, |\varphi\rangle\; \big|\big|^2 = \sum_{i=1}^{q^{2N}} |\gamma_i|^2\, |c_i|^2 \tag{2.21}$$

ab, und erhält daraus

$$\big|\big|\; \tau\, T_{\mathrm{D}}\, |\varphi\rangle\; \big|\big| \leq \lambda_0^N\, \big|\big|\; |\varphi\rangle\; \big|\big|. \tag{2.22}$$

Angenommen, $|\varphi\rangle$ ist ein Eigenzustand von T_{D}, d.h.

$$T_{\mathrm{D}}\, |\varphi\rangle = \Lambda\, |\varphi\rangle\,, \tag{2.23}$$

dann gilt äquivalent

$$\tau\, T_{\mathrm{D}}\, |\varphi\rangle = \Lambda\, \tau\, |\varphi\rangle\,. \tag{2.24}$$

Wegen der Unitarität von τ ist die Norm von $\tau\,|\varphi\rangle$ identisch mit der von $|\varphi\rangle$. Es ergibt sich daher mit (2.22)

$$|\Lambda| = \frac{\big|\big|\; \tau\, T_{\mathrm{D}}\, |\varphi\rangle\; \big|\big|}{\big|\big|\; |\varphi\rangle\; \big|\big|} \leq \lambda_0^N. \tag{2.25}$$

Dies folgt für alle Eigenwerte von T_{D}. Gilt (2.15) sogar streng und verschwinden alle γ_i, deren zugehörige Basisvektoren nur aus $|u_1\rangle\,, \ldots, |u_d\rangle$ aufgebaut sind, wird ebenfalls aus (2.22) und damit auch aus (2.25) eine strenge Ungleichung. Dann besitzen alle Eigenvektoren, die nicht ausschließlich aus dem Matrixprodukt $m\, m$ hervorgehen, Eigenwerte, die betraglich echt kleiner als λ_0^N sind.

Im Verlauf des Beweises wird deutlich, daß die oben gemachten Einschränkungen unbedingt notwendig sind: $m = \overline{m}$ ist die Voraussetzung dafür, daß $\mathcal{P}_V$

die Identität wird und damit nur Eigenwerte vom Wert eins besitzt. Die Hermitizität von $\mathcal{R}$, die sich explizit in der Bedingung

$$\mathcal{R}\,(\mu, \alpha \,|\, \beta, \nu) = \mathcal{R}\,(\beta, \nu \,|\, \mu, \alpha)\,. \tag{2.26}$$

manifestiert, benötigt man für die Diagonalisierbarkeit.

Ein weiterer Fall, für den die Abschätzung der Eigenwerte der DTM gelingt, ist die Situation, daß die Menge der Vektoren $\Omega = \left\{\mathcal{R}\,|u_1\rangle\,, \ldots,\, \mathcal{R}\,|u_d\rangle\,, \mathcal{R}\,\left|v_1^\perp\right\rangle, \ldots, \mathcal{R}\,\left|v_k^\perp\right\rangle\right\}$ ein Orthogonalsystem bilden, d.h. $\left\langle \phi \,\middle|\, \mathcal{R}^\dagger\mathcal{R} \,\middle|\, \chi\right\rangle = 0$ für $|\phi\rangle\,, |\chi\rangle \in \Omega$ mit $|\phi\rangle \neq |\chi\rangle$. Diese Voraussetzung wird im weiteren Verlauf als orthogonaler Fall bezeichnet. Die Bedingung (2.15) ist dann durch

$$\left|\left|\, \mathcal{R}\,|\phi\rangle\, \right|\right| \leq \lambda_0 \tag{2.27}$$

zu ersetzen. Der Beweis, daß daraus die Beschränkung $|\Lambda| \leq \lambda_0^N$ folgt, wird völlig analog geführt. Wiederum gilt auch hier im Falle der strengen Ungleichung für $|\phi\rangle = \left|v_i^\perp\right\rangle$, daß alle Grundzustände des Modells aus den Einträgen des Matrixproduktes aufgebaut werden können. Der orthogonale Fall ermöglicht häufig insbesondere die Wahl $m \neq \overline{m}$.

Nach Konstruktion von $\mathcal{R}$ im allgemeinsten Fall kennt man zwar unmittelbar einen Eigenzustand der DTM mit dem zugehörigen Eigenwert, die Abschätzung bezüglich der übrigen Eigenwerte gelingt jedoch, wie gesehen, nur in speziellen Fällen. Trotzdem werden bei den in den folgenden Kapiteln diskutierten Beispielen zunächst die allgemeinsten parentalen Vertexmodelle konstruiert, die auf eine reelle Hamiltonfunktion führen. Es ist anzunehmen, daß die für die betrachteten Spezialfälle gemachten Aussagen auch unter schwächeren Voraussetzungen gelten.

2.2 $(q = 2)$–Modelle auf dem Quadratgitter

Für $q = 2$ hat die $\mathcal{R}$-Matrix $2^4 = 16$ Einträge, ein Zwei-Zustands-Vertexmodell stellt damit eine Unterklasse des 16-Vertex-Modells dar. Der simpelste Fall, an dem man die Wirkungsweise des Verfahrens studieren kann, ist die Verwendung von 1×1-Matrizen, d.h. $n = 1$. Die Eigenschaften des Zustandes sind jedoch in dem Sinne trivial, daß Korrelationsfunktionen lediglich einen konstanten Anteil besitzen.

2.2.1 Konstruktion des parentalen Vertexmodells

Um eine direkte Verbindung zu Spin-$\frac{1}{2}$ Systemen herzustellen, seien $|1\rangle = |+\rangle$ und $|2\rangle = |-\rangle$ die Ein-Spin-Zustände zu den Werten $+1$ bzw. -1 der klassischen Spin-Variable. Die vorgegebenen, trivialen Matrizen sind

$$\begin{aligned} m &= |+\rangle + a\,|-\rangle\,, \\ \overline{m} &= |+\rangle + b\,|-\rangle\,, \end{aligned} \tag{2.28}$$

was abgesehen von der Normierung als die allgemeinste Darstellung im Fall $n = 1$ angesehen werden kann. Die Parameter a und b werden reell gewählt. Nach FROBENIUS ist damit keine Einschränkung verbunden. Der Raum der lokalen Grundzustände ist genau wie der Raum, auf den die $\mathcal{R}$-Matrix diese abbildet, eindimensional, nämlich

$$\begin{aligned} |v\rangle &= m\,\overline{m} = |{+}{+}\rangle + b\,|{+}{-}\rangle + a\,|{-}{+}\rangle + ab\,|{-}{-}\rangle\,, \\ |w\rangle &= \overline{m}\,m = |{+}{+}\rangle + a\,|{+}{-}\rangle + b\,|{-}{+}\rangle + ab\,|{-}{-}\rangle\,. \end{aligned} \tag{2.29}$$

Als Orthonormalbasis von $V^\perp$ wählt man zum Beispiel

$$\begin{aligned} \left|v_1^\perp\right\rangle &= \beta\big[\,|{+}{-}\rangle - b\,|{+}{+}\rangle\,\big], \\ \left|v_2^\perp\right\rangle &= \beta\big[\,|{-}{-}\rangle - b\,|{-}{+}\rangle\,\big], \\ \left|v_3^\perp\right\rangle &= \gamma\big[a\,|{+}{+}\rangle + ab\,|{+}{-}\rangle - |{-}{+}\rangle - b\,|{-}{-}\rangle\,\big], \end{aligned} \tag{2.30}$$

mit $\beta = \sqrt{1+b^2}^{\,-1}$, $\gamma = \sqrt{(1+a^2)(1+b^2)}^{\,-1}$, und setzt der im Kapitel über parentale Vertexmodelle eingeführten Nomenklatur folgend

$$|u\rangle = \gamma\,|v\rangle\,. \tag{2.31}$$

In diesem Fall kann man den oben eingeführten Operator $\mathcal{P}_V$ sofort explizit hinschreiben[2], nämlich

$$\mathcal{P}_V = \frac{1}{\langle v\,|v\rangle}\,|w\rangle\langle v| = \gamma^2 \begin{pmatrix} ab & b \\ a & 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} ab & a \\ b & 1 \end{pmatrix}. \tag{2.32}$$

Ordnet man den kanonischen Zwei-Spin-Zuständen die Einheitsvektoren $e_1, \ldots, e_4$ in folgender Weise zu,

$$\begin{aligned} |{-}{-}\rangle &\longleftrightarrow e_1, \\ |{-}{+}\rangle &\longleftrightarrow e_2, \\ |{+}{-}\rangle &\longleftrightarrow e_3, \\ |{+}{+}\rangle &\longleftrightarrow e_4, \end{aligned} \tag{2.33}$$

so erhält man explizit

$$\mathcal{P}_V = \gamma^2 \begin{pmatrix} a^2b^2 & a^2b & ab^2 & ab \\ ab^2 & ab & b^2 & b \\ a^2b & a^2 & ab & a \\ ab & a & b & 1 \end{pmatrix}. \tag{2.34}$$

Die Frage, ob hiermit überhaupt physikalisch sinnvolle Modelle erzeugt werden können, ist damit schon positiv beantwortet. Offenbar hat $\mathcal{P}_V$ für $a, b > 0$ nur

[2] Für $d > 1$ funktioniert dies nur dann in der Projektorschreibweise, wenn die Zustände $|v_1\rangle, \ldots, |v_d\rangle$ ein Orthogonalsystem bilden.

positive Einträge. Wählt man zudem $A=0$, was offensichtlich $A\,m\,\overline{m}=0$ erfüllt, so hat man mit $\mathcal{R}=\lambda_0\mathcal{P}_V$ schon ein Modell gefunden. Um dies zu begründen, ist es hier nicht erforderlich, sich auf den hermiteschen Fall zu beschränken. Die Zustandsvektoren $|u\rangle\,,\left|v_1^\perp\right\rangle,\left|v_2^\perp\right\rangle,\left|v_3^\perp\right\rangle$ bilden eine Orthonormalbasis des Zwei-Spin-Zustandsraumes. Sind $|\phi_j\rangle$ Elemente dieser Basis, so kann jeder Eigenzustand $|\varphi\rangle$ der DTM als

$$|\varphi\rangle=\sum_{i=1}^{2^{2N}}\gamma_i\left|\phi_1^{(i)}\right\rangle\otimes\ldots\otimes\left|\phi_N^{(i)}\right\rangle \tag{2.35}$$

entwickelt werden. γ_1 sei der Koeffizient des Basisvektors $|u\rangle\otimes\ldots\otimes|u\rangle$. Mit $\mathcal{R}=\mathcal{P}_V$ folgt wegen $\mathcal{P}_V\,|u\rangle=\gamma\,|w\rangle=:|\hat{w}\rangle$ und $\mathcal{P}_V\left|v_\mu^\perp\right\rangle=0$

$$\Lambda\,\tau\,|\varphi\rangle=\tau\,T_{\mathrm{D}}\,|\varphi\rangle=\lambda_0^N\gamma_1\,|\hat{w}\rangle\otimes\ldots\otimes|\hat{w}\rangle\,, \tag{2.36}$$

und somit

$$|\Lambda|=\lambda_0^N\frac{|\gamma_1|}{\sqrt{\sum_i|\gamma_i|^2}}\leq\lambda_0^N. \tag{2.37}$$

Es ist sogar noch eine stärkere Aussage möglich, nämlich

$$|\Lambda|=\lambda_0^N\quad\Longleftrightarrow\quad|\varphi\rangle\propto|u\rangle\otimes\ldots\otimes|u\rangle\,. \tag{2.38}$$

Die Eindeutigkeit des Eigenzustandes zum betraglich maximalen Eigenwert ergibt sich ebenfalls als Konsequenz des Satzes von Perron [15] über die Spektraleigenschaften von Matrizen mit positiven Einträgen, denn für $A=0$ und $a,b>0$ hat die DTM gerade diese Eigenschaft. Der Satz macht zwar qualitative Aussagen über den Eigenzustand, durch das vorliegende Verfahren hier kann dieser aber auch explizit angegeben werden.

Sowohl die Vertexgewichte als auch die Eigenwerte der DTM bei endlicher Systemgröße sind stetige Funktionen der Parameter α_{ij} und $\alpha_{ij}^\perp$. Daher können diese alle gleichzeitig nichttrivial, d.h. ungleich null, gewählt werden. Es existiert also mit Sicherheit eine nichtleere Mannigfaltigkeit im Parameterraum, auf der die Physikalität des Modells und die Extremalität des Eigenwertes gewährleistet sind. Die explizite Angabe dieses maximalen Bereiches ist jedoch kompliziert.

Die Parameter α_{ij} und $\alpha_{ij}^\perp$ werden kompakt als 3×1- bzw. 3×3-Matrizen zusammengefaßt und als neuer Satz von Parametern λ_i definiert.

$$\begin{aligned}\alpha &= \begin{pmatrix}\lambda_1 & \lambda_2 & \lambda_3\end{pmatrix},\\ \alpha^\perp &= \begin{pmatrix}\lambda_4 & \lambda_5 & \lambda_6\\ \lambda_7 & \lambda_8 & \lambda_9\\ \lambda_{10} & \lambda_{11} & \lambda_{12}\end{pmatrix}\end{aligned} \tag{2.39}$$

Das gefundene parentale Vertexmodell besitzt somit die maximal mögliche Anzahl von freien, kontinuierlichen Parametern, nämlich $q^2\,(q^2-d)+p = 4(4-1)+2 = 14$. Die vollständigen Vertexgewichte sind im Anhang A aufgeführt.

In bestimmten Fällen kennt man nun also den Zustand mit dem größten Gewicht bei endlicher Systemgröße. Alle Anregungsenergien haben wegen der Extremal-Bedingung für den zugehörigen Eigenwert einen endlichen Abstand zur Grundzustandsenergie, es existiert also eine Anregungslücke. Im thermodynamischen Limes allerdings kann diese verschwinden, was problematisch wird, wenn die Annäherung der tiefsten Anregung an die Grundzustandsenergie in Abhängigkeit von der Systemgröße zu schnell erfolgt. Um darüber Aussagen machen zu können, benötigt man, wie in Kap. 1.2 gesehen, Informationen über den nächst kleineren Eigenwert der DTM. Diesen kann man sich im allgemeinen mit der vorgestellten Methode jedoch nicht beschaffen, unter gewissen Einschränkungen sind hier jedoch Aussagen möglich.

Von nun an soll $\mathcal{R}$ hermitesch gewählt werden, d.h.

$$\begin{aligned} a &= b, \\ \lambda_1 = \lambda_2 &= \lambda_3 = 0, \\ \lambda_7 &= \lambda_5, \\ \lambda_{10} &= \lambda_6, \\ \lambda_{11} &= \lambda_9. \end{aligned} \tag{2.40}$$

Es verbleiben also sieben kontinuierliche Parameter. Unter diesen Voraussetzungen ist $\mathcal{R}$ diagonalisierbar, und es gilt bereits $\mathcal{R}\,|u\rangle = \lambda_0\,|u\rangle$. Ferner kann eine Orthonormalbasis $\left|\hat{v}_1^{\perp}\right\rangle, \left|\hat{v}_2^{\perp}\right\rangle, \left|\hat{v}_3^{\perp}\right\rangle$ von $V^{\perp}$ gewählt werden, in der $\mathcal{R}$ Diagonalgestalt annimmt, d.h. $\mathcal{R}\left|\hat{v}_i^{\perp}\right\rangle = c_i\left|\hat{v}_1^{\perp}\right\rangle$. c_1, c_2, c_3 sind gerade die Eigenwerte von $\alpha^{\perp}$. Damit der Zustand $|\Psi_G\rangle = |u\rangle \otimes \ldots \otimes |u\rangle$ eindeutiger Grundzustand werden kann, ist zunächst $|c_i| \leq \lambda_0$ zu fordern. Dann nämlich ist das Spektrum der DTM, wie im Kapitel über parentale Vertexmodelle gesehen, betraglich nach oben durch λ_0^N beschränkt.

Behauptung:
Für $|c_i| < \lambda_0$ ist im Limes $N \to \infty$ $|\Psi_G\rangle$ eindeutiger Eigenzustand von T_{D} zum maximalen Eigenwert $\Lambda_{\text{max}} = \lambda_0^N$. Der Betrag des nächst kleineren Eigenwertes Λ der DTM hat eine endliche Lücke, d.h. $\frac{\Lambda}{\Lambda_{\text{max}}} < 1$.

Beweis:
Nach Konstruktion gilt auch im thermodynamischen Limes $T_{\text{D}}\,|\Psi_G\rangle = \lambda_0^N\,|\Psi_G\rangle$ mit $|\Psi_G\rangle = \prod_{i=1}^{\otimes\infty} |u\rangle$. Da die DTM nicht notwendigerweise hermitesch ist, sind Eigenvektoren zu verschiedenen Eigenwerten im allgemeinen nicht orthogonal zueinander, jedoch linear unabhängig. Für $N \to \infty$ wird durch die Vektoren $|\Psi\rangle = \prod_{i=1}^{\otimes\infty} |\phi_i\rangle$ mit

$|\phi_i\rangle \in \{|u\rangle, |\hat{v}_1^\perp\rangle, |\hat{v}_2^\perp\rangle\, |\hat{v}_3^\perp\rangle\}$ eine Orthonormalbasis des (unendlich-dimensionalen) Zustandsraumes aufgespannt. Ein Basisvektor ist offenbar identisch mit $|\Psi_G\rangle$, die anderen Basisvektoren seien mit $|\Psi_1\rangle, |\Psi_2\rangle, \ldots$ durchnumeriert. Jeder von $|\Psi_G\rangle$ verschiedene Eigenzustand $|\varphi\rangle$ von T_D wird durch eine Folge $\{\gamma_\mu\}$ von (komplexen) Zahlen bezüglich dieser Basis charakterisiert,

$$|\varphi\rangle = \gamma_0\, |\Psi_G\rangle + \sum_{\mu=1}^{\infty} \gamma_\mu\, |\Psi_\mu\rangle\,, \tag{2.41}$$

wobei

$$\gamma_\mu \neq 0 \text{ für mindestens ein } \mu \geq 1. \tag{2.42}$$

Offenbar ist $\tau\, T_\mathrm{D}\, |\Psi_G\rangle = \lambda_0^N\, |\Psi_G\rangle$, $\tau\, T_\mathrm{D}\, |\Psi_\mu\rangle = d_\mu\, |\Psi_\mu\rangle$ mit $d_\mu \leq |c_{\mathrm{max}}|^N < \lambda_0^N$ nach Voraussetzung und $\langle \Psi_\mu\, |\Psi_\mu\rangle = \delta_{\mu\nu}$. Daher gilt wie zuvor für den Eigenwert Λ_φ von $|\varphi\rangle$

$$\frac{|\Lambda_\varphi|^2}{\Lambda_{\mathrm{max}}^2} = \frac{\frac{1}{\lambda_0^{2N}}\, ||\, \tau\, T_\mathrm{D}\, |\varphi\rangle||^2}{||\, |\varphi\rangle||^2} \leq \lim_{N\to\infty} \frac{|\gamma_0|^2 + \left(\frac{|c_{\mathrm{max}}|}{\lambda_0}\right)^{2N} \sum_{\mu=1}^N |\gamma_\mu|^2}{|\gamma_0|^2 + \sum_{\mu=1}^N |\gamma_\mu|^2} < 1, \tag{2.43}$$

denn es ist $\lim_{N\to\infty} \sum_{\mu=1}^N |\gamma_\mu|^2 > 0$ nach (2.42). Dies war genau zu zeigen.

Neben der Bedingung $|c_i| < \lambda_0$ müssen die λ-Parameter natürlich so gewählt sein, daß alle Vertexgewichte positiv sind. Nach Kap. 1.2 ergibt sich folglich im thermodynamischen Limes $N, M \to \infty$ für die freie Energie pro Gitterplatz $f = -k_B T \ln \lambda_0$.

Alles bisher Gesagte gilt auch im orthogonalen Fall. Der Bildvektor $|w\rangle$ läßt sich in eindeutiger Weise als $|w\rangle = \eta_1\, |v_1^\perp\rangle + \eta_2\, |v_2^\perp\rangle + \eta_3\, |v_3^\perp\rangle + \eta_4\, |u\rangle$ entwickeln, wobei die Koeffizienten η_i Funktionen von a, b sind. Für $a = b$ gilt offensichtlich $\eta_1 = \eta_2 = \eta_3 = 0$ und $\eta_4 = \gamma^{-1}$, während für beliebige a, b komplizierte Abhängigkeiten vorliegen. Die Bildvektoren sind genau dann paarweise orthogonal, wenn die Relationen

$$\begin{aligned} \alpha_{1,i}\alpha_{1,j} + \sum_{\mu=1}^{3} \alpha_{\mu,i}^\perp \alpha_{\mu,j}^\perp &= 0 \quad (i < j), \\ \eta_4 \alpha_{1,i} + \sum_{\mu=1}^{3} \eta_\mu \alpha_{\mu,i}^\perp &= 0, \end{aligned} \tag{2.44}$$

erfüllt sind. Diese Bedingungen sollen nicht weiter untersucht werden, es ist jedoch daraus ersichtlich, daß Modelle für $a \neq b$ konstruiert werden können, die im thermodynamischen Limes die Aussage $\Lambda_{\mathrm{max}} = \lambda_0^N$ und $|\Lambda_i| < \Lambda_{\mathrm{max}}$ für alle anderen Eigenwerte der DTM gestatten. Durch die Bedingungsgleichungen werden sechs λ-Parameter festgelegt, so daß ein achtdimensionaler Parameterraum zur Verfügung steht.

Interessant ist auch die Betrachtung des feldfreien Falles, also die Gleichheit der Gewichte von Vertizes, die durch Invertieren aller Pfeile ineinander übergehen, d.h. $\mathcal{R}(\mu, \alpha \,|\, \beta, \nu) = \mathcal{R}(-\mu, -\alpha \,|\, -\beta, -\nu)$. Ausgehend vom allgemeinsten Modell mit positiven Gewichten gibt es zwei mögliche Parametersätze, die auf den feldfreien Fall führen.

$$a = b = \pm 1,$$

$$\begin{array}{rclrcl} \lambda_2 &=& \mp\lambda_1, & \lambda_3 &=& 0, \\ \lambda_7 &=& \lambda_5, & \lambda_8 &=& \lambda_4, \\ \lambda_9 &=& \pm\lambda_6, & \lambda_{11} &=& \pm\lambda_{10}, \end{array} \tag{2.45}$$

$$\lambda_{12} \quad \text{frei.}$$

Dabei verbleiben also jeweils sechs frei wählbare Parameter. Fordert man zusätzlich die Hermitizität von $\mathcal{R}$, so benötigt man zudem

$$\lambda_1 = 0, \quad \lambda_{10} = \lambda_6, \tag{2.46}$$

wodurch zwei weitere Parameter festgelegt werden. Im feldfreien, hermiteschen Fall behält man also vier Parameter.

2.2.2 Eigenschaften des Grundzustandes

Für einen großen Parameterbereich kann festgestellt werden, daß der Zustand

$$|\Psi_G\rangle = |v\rangle^N = (m\,\overline{m}\,)^N \tag{2.47}$$

für jede Systemgröße, auch im thermodynamischen Limes, eindeutiger Eigenzustand der DTM zum betraglich maximalen Eigenwert ist. Gesicherte Aussagen über das Verhalten des nächst kleineren Eigenwertes im thermodynamischen Limes sind, wie zuvor gesehen, nur möglich, wenn $\mathcal{R}$ hermitesch ist oder im orthogonalen Fall. Trotzdem ist es nicht ausgeschlossen, daß dieses Verhalten des Systems im thermodynamischen Limes auch für einen größeren Parameterbereich gilt. Es sei

$$Z = \langle \Psi_G \,|\Psi_G \rangle = \mathcal{Z}^N \tag{2.48}$$

mit $\mathcal{Z} = \langle v\,|v\,\rangle$ die quadratische Norm des Grundzustandes. Beliebige Erwartungswerte eines lokalen Operators, also eines Operators A_i, der nur auf den Raum eines Produktes $m\,\overline{m}$ wirkt, das an der i-ten $\mathcal{R}$-Matrix lokalisiert ist, lassen sich offenbar durch die lokalen Zwei-Spin-Zustände berechnen. Gleiches gilt für die Produkte an verschiedenen Positionen wirkender, lokaler Operatoren, deren Erwartungswert faktorisiert.

$$\begin{array}{rclcl} \langle A_i \rangle_{\Psi_G} &=& Z^{-1} \langle \Psi_G \,| A_i |\, \Psi_G \rangle &=& \mathcal{Z}^{-1} \langle v\,|A|\,v\rangle\,, \\ \langle A_i B_j \rangle_{\Psi_G} &=& Z^{-1} \langle \Psi_G \,| A_i B_j |\, \Psi_G \rangle &=& \mathcal{Z}^{-2} \langle v\,|A|\,v\rangle\, \langle v\,|B|\,v\rangle\,. \end{array} \tag{2.49}$$

Man findet damit für die Erwartungswerte der klassischen Spin-Operatoren

$$\langle \sigma_m \rangle_{\Psi_G} = \frac{1-a^2}{1+a^2}, \quad \langle \sigma_{\overline{m}} \rangle_{\Psi_G} = \frac{1-b^2}{1+b^2}, \tag{2.50}$$

wobei σ_m auf die durch m und $\sigma_{\overline{m}}$ auf die durch $\overline{m}$ gegebenen Zustände wirkt. Für $a=0$ bzw. $b=0$ sind die jeweiligen Untergitter voll polarisiert, d.h. $|\langle \sigma \rangle| = 1$. Im Fall $|a|=1$ bzw. $|b|=1$ liegen die lokalen Zustände $|+\rangle$ und $|-\rangle$ mit gleicher Wahrscheinlichkeit vor, so daß $\langle \sigma \rangle = 0$ gilt. Die Korrelationsfunktion ist konstant, der Wert hängt lediglich von der Plazierung der Operatoren auf einem der beiden Untergitter ab. Die Korrelation von Zuständen auf verschiedenen Untergittern berechnet sich zu

$$\langle \sigma_m \sigma_{\overline{m}} \rangle_{\Psi_G} = \langle \sigma_{\overline{m}} \sigma_m \rangle_{\Psi_G} = \left(\frac{1-a^2}{1+a^2} \right) \left(\frac{1-b^2}{1+b^2} \right), \tag{2.51}$$

die sowohl positive als auch negative Werte annehmen kann. Das quadratische Moment der Spin-Operatoren bzw. die Korrelation zwischen Spins auf demselben Untergitter ist

$$\left\langle {\sigma_m}^2 \right\rangle = \left\langle {\sigma_{\overline{m}}}^2 \right\rangle = 1. \tag{2.52}$$

Damit sind Korrelationenfunktionen abstandsunabhängig, also konstant.

Per definitionem "leben" die benutzten, klassischen Zustände auf den Bonds eines Quadratgitters mit chiralen Randbedingungen. Dieser Tatsache entsprechend erscheint es sinnvoll, die Erwartungswerte der Spin-Operatoren nicht als Magnetisierung sondern als Polarisierung zu deuten [1]. Bringt man das gescherte Gitter wieder in die Ausgangsform zurück, so wird dies besonders deutlich. Ein Pfeil stelle nun durch Richtung und Größe das Vorzeichen und den Wert von $\langle \sigma \rangle$ dar. Orientiert man den Pfeil für positive Werte nach oben bzw. nach rechts, so sieht etwa der Fall $|b| < |a| < 1$ wie in Abb. 2.3 gezeigt aus.

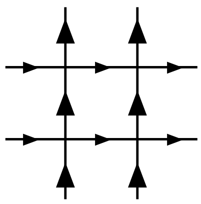


Abbildung 2.3: *Polarisierung des Gitters im Grundzustand für* $|b| < |a| < 1$.

Außer für $|a| = |b| = 1$ bekommt man immer Pfeile endlicher Größe, die auf einer Koordinatenachse in dieselbe Richtung zeigen, das Gitter ist also polarisiert, wobei die Richtung vom Vorzeichen von $1-a^2$ bzw. $1-b^2$ abhängt.

Im Spezialfall $a=b=1$ liegen die beiden Einspin-Zustände $|+\rangle, |-\rangle$ mit der gleichen Wahrscheinlichkeit vor. Dies ist also ein Punkt totaler Unordnung im Parameterraum. Für die vier verschiedenen Grenzfälle $(a,b) \to (0,0), (0,\infty), (\infty,0)$ bzw. (∞,∞) streben alle Vertexgewichte außer jeweils einem, nämlich $\mathcal{R}(+,+\,|\,+,+)$, $\mathcal{R}(+,-\,|\,-,+)$, $\mathcal{R}(-,+\,|\,+,-)$ bzw. $\mathcal{R}(-,-\,|\,-,-)$ gegen null. Nur eine Konfiguration auf dem Gitter hat damit endliche Energie und wird gewissermaßen "eingefroren". Der Betrag der Polarisierung erreicht in diesen Fällen sein Maximum, was ebenfalls aus den Ergebnissen abgelesen werden kann.

2.3 Ergebnisse für das Acht-Vertex-Modell

Folgende Matrizen werden als Ausgangspunkt angenommen:

$$\begin{aligned} m &= \begin{pmatrix} |\psi_+(a)\rangle & 0 \\ 0 & |\psi_-(a)\rangle \end{pmatrix}, \\ \overline{m} &= \begin{pmatrix} |\psi_+(b)\rangle & 0 \\ 0 & |\psi_-(b)\rangle \end{pmatrix}, \end{aligned} \tag{2.53}$$

mit $|\psi_\pm(x)\rangle = |+\rangle \pm x\,|-\rangle$. Da Produkte von Diagonalmatrizen wieder diagonal sind, ist die Matrixschreibweise nicht unbedingt notwendig, bietet sich aber als kompakte Darstellung an. Die für die Konstruktion benötigten Zwei-Spin-Zustände ergeben sich aus den Matrixprodukten $m\,\overline{m}$ und $\overline{m}\,m$ als

$$\begin{aligned} |v_1\rangle &= |\psi_+(a)\rangle \otimes |\psi_+(b)\rangle, \quad |w_1\rangle = |\psi_+(b)\rangle \otimes |\psi_+(a)\rangle, \\ |v_4\rangle &= |\psi_-(a)\rangle \otimes |\psi_-(b)\rangle, \quad |w_4\rangle = |\psi_-(b)\rangle \otimes |\psi_-(a)\rangle. \end{aligned} \tag{2.54}$$

Ferner gilt $|v_2\rangle = |v_3\rangle = |w_2\rangle = |w_3\rangle = 0$. Als Orthonormalbasis von V wird

$$\begin{aligned} |u_1\rangle &= \tfrac{1}{2}\gamma\big[\,|v_1\rangle + |v_4\rangle\,\big] = \gamma\big[\,|++\rangle + ab\,|--\rangle\,\big], \\ |u_2\rangle &= \tfrac{1}{2}\beta\big[\,|v_1\rangle - |v_4\rangle\,\big] = \beta\big[b\,|+-\rangle + a\,|-+\rangle\,\big], \end{aligned} \tag{2.55}$$

mit $\beta = \sqrt{a^2+b^2}^{\,-1}$, $\gamma = \sqrt{1+a^2b^2}^{\,-1}$, gewählt, und $V^\perp$ wird durch die Orthonormalbasis

$$\big|v_1^\perp\big\rangle = \gamma\big[ab\,|++\rangle - |--\rangle\,\big],\ \big|v_2^\perp\big\rangle = \beta\big[b\,|-+\rangle - a\,|+-\rangle\,\big] \tag{2.56}$$

generiert. Da sowohl die Vektoren $|v_1\rangle, |v_4\rangle$ bzw. $|w_1\rangle, |w_4\rangle$ bereits paarweise orthogonal sind, hat der Operator $\mathcal{P}_V$ die Gestalt

$$\mathcal{P}_V = \sum_{i=1,4} \frac{1}{\langle v_i\,|v_i\rangle}\,|w_i\rangle\langle v_i| = \begin{pmatrix} \gamma^2 & 0 & 0 & \gamma^2 ab \\ 0 & \beta^2 ab & \beta^2 b^2 & 0 \\ 0 & \beta^2 a^2 & \beta^2 ab & 0 \\ \gamma^2 ab & 0 & 0 & \gamma^2 a^2 b^2 \end{pmatrix}. \tag{2.57}$$

Die explizite Darstellung von $\mathcal{P}_V$ als Matrix ergibt sich analog aus der kanonischen Zuordnung der Zwei-Spin-Zustände mit Einheitsvektoren, wie im Falle $n = 1$ vorgeführt. Auch hier liegt für $a, b > 0$ und $A = 0$ bereits ein physikalisches Modell vor. Wegen der Orthogonalität von $|w_1\rangle, |w_2\rangle$ ist das Spektrum der DTM betraglich durch λ_0^N nach oben beschränkt.

Untersucht man für das allgemeinste A die Physikalitätsbedingung und die Forderung, daß die Bilder von $|u_i\rangle$ und $|v_i^\perp\rangle$ unter $\mathcal{R}$ ein Orthogonalsystem bilden, so ergeben sich folgende Parametersätze,

$$\alpha = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & \lambda_3 \end{pmatrix}, \quad \alpha^\perp = \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{pmatrix}, \tag{2.58}$$

mit der Einschränkung

$$\lambda_3 = \frac{\sqrt{a^2+b^2}(a^2-b^2)}{2ab}\lambda_2. \tag{2.59}$$

Die Vertexgewichte für dieses Modell können im Anhang B nachgeschlagen werden. Offensichtlich sind nur Gewichte von solchen Vertizes ungleich null, bei denen die Anzahl der ein- bzw. auslaufenden Pfeile gerade ist. Ferner gilt $\mathcal{R}(+,+\,|\,-,-) = \mathcal{R}(-,-\,|\,+,+)$, während die anderen durch Invertieren aller Pfeile ineinander übergehenden Vertexgewichte im allgemeinen nicht gleich sind. Die Hermitizität von $\mathcal{R}$ ergibt sich ebenfalls als Spezialfall, nämlich für $a = b$. Der feldfreie Fall wird gerade für $a = b = 1$ erreicht. Extremalität des Gewichtes λ_0^N durch lokale Zustände aus V wird dann offenbar durch

$$\begin{gathered} |\lambda_1| < \lambda_0, \\ \left(\frac{(a^2+b^2)(a^2-b^2)^2}{4a^2b^2} + 1\right){\lambda_2}^2 < \lambda_0 \end{gathered} \tag{2.60}$$

garantiert, insbesondere ist dann das Spektrum der DTM durch λ_0^N beschränkt.

Die Frage nach der Entartung des globalen Grundzustandes ist wegen der zweifachen lokalen Entartung des maximalen Gewichtes nicht mehr trivial. Jede beliebige Linearkombination der zwei Matrixeinträge von $m\,\overline{m}$ ist wieder ein lokaler Grundzustand, die Möglichkeit Linearkombinationen zu bilden ist aber auch die maximale Freiheit, die zur Verfügung steht. Sei $\mathcal{U}$ eine 2×2 Matrix, so wird diese Transformationsfreiheit durch

$$(m\,\overline{m})_{ii} \quad \longrightarrow \quad \sum_k \mathcal{U}_{ik}\,(m\,\overline{m})_{kk} = \mathcal{U}\,[m\,\overline{m}]_{ii} \tag{2.61}$$

ausgedrückt. Der $\mathcal{R}$-Operator hat auf das transformierte Matrixprodukt die Wirkung

$$\mathcal{R}\Big[\,\mathcal{U}\,[m\,\overline{m}]\,\Big] = \mathcal{U}\,[\overline{m}\,m]\,. \tag{2.62}$$

Trotz dieser lokalen Freiheit ist der globale Grundzustand der DTM nur zweifach entartet und eine Basis bilden etwa

$$|\Psi_{G_1}\rangle = |v_1\rangle^N \,, \quad |\Psi_{G_2}\rangle = |v_4\rangle^N \,. \tag{2.63}$$

$\mathcal{T}^{(\mathrm{N})} \quad =$

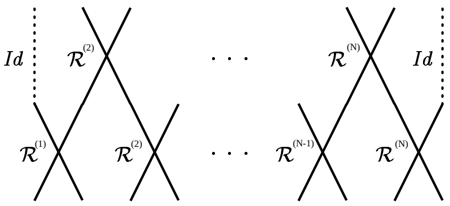


Abbildung 2.4: *Produkt von zwei Diagonal-zu-Diagonal-Transfermatrizen ohne periodische Randbedingungen.*

Für den Beweis wird zunächst für festes N der Operator $\mathcal{T}^{(\mathrm{N})}$ eingeführt, graphisch durch Abb. 2.4 dargestellt, oder formal als

$$\mathcal{T}^{(\mathrm{N})\{\beta\}}_{\{\alpha\}} = \sum_{k_2,\ldots,k_{2N-2}} \mathcal{R}\left(\alpha_1, \alpha_2 \,|\, \beta_1, k_2\right) \mathcal{R}\left(\alpha_{2N-1}, \alpha_{2N} \,|\, k_{2N-1}, \beta_{2N}\right)$$
$$\prod_{i=1}^{N-2} \mathcal{R}\left(\alpha_{2i+1}, \alpha_{2i+2} \,|\, k_{2i+1}, k_{2i+2}\right) \prod_{j=1}^{N-1} \mathcal{R}\left(k_{2j}, k_{2j+1} \,|\, \beta_{2j}, \beta_{2j+1}\right). \tag{2.64}$$

Es handelt sich offensichtlich im wesentlichen um das Produkt zweier Diagonal-zu-Diagonal-Transfermatrizen unter Eliminierung der periodischen Randbedingungen bis auf eine unitäre Transformation (Indexverschiebung).

Behauptung:
Für jedes N bilden die Einträge von $(m\,\overline{m})^N$ ein Erzeugendensystem der Zustände $|\psi\rangle$ mit der Eigenschaft

$$\frac{\left\langle \psi \,\middle|\, \mathcal{T}^{(\mathrm{N})\dagger}\mathcal{T}^{(\mathrm{N})} \,\middle|\, \psi \right\rangle}{\langle \psi \,|\psi\,\rangle} = 1. \tag{2.65}$$

Damit kann jedes $|\psi\rangle$ als

$$|\psi\rangle = \mathrm{Spur}\left[(m\,\overline{m})^N \mathcal{S}\right] \tag{2.66}$$

dargestellt werden, wenn $\mathcal{S}$ eine geeignete, aus Zahlen bestehende 2×2-Diagonalmatrix ist. Offenbar bilden Zustände mit der Eigenschaft (2.65) eine Obermenge der

Grundzustände.

Die Behauptung soll im folgenden durch vollständige Induktion über die Anzahl N der $\mathcal{R}$-Operatoren in der ersten Reihe von $\mathcal{T}^{(\mathrm{N})}$ bewiesen werden.

Beweis:

- *Induktionsverankerung:* $N = 1$

  Für $N = 1$ ist die Behauptung trivial, denn nach Konstruktion von $\mathcal{R}$ bilden die Zustände $(m\,\overline{m})_{ij}$ gerade ein Erzeugendensystem von V.

- *Induktionsvoraussetzung:*

  Die Behauptung sei für $\mathcal{T}^{(\mathrm{N-1})}$ erfüllt, d.h. der Raum der Zustände, die die behauptete Eigenschaft haben, ist zweidimensional und ein Erzeugendensystem (sogar eine Basis) wird durch die Zustände $|v_1\rangle^{(N-1)}$ und $|v_4\rangle^{(N-1)}$ gebildet.

- *Induktionsschritt:* $N-1 \longrightarrow N$

  Damit die Behauptung erfüllt werden kann, müssen alle lokalen $\mathcal{R}$-Operatoren schon das Gewicht λ_0 liefern. Wegen der Induktionsvoraussetzung durchläuft man bei Variation von U mit

  $$\mathrm{Spur}\left[(m\,\overline{m})^{N-1}\,\mathcal{U}\,[m\,\overline{m}]\right] \tag{2.67}$$

  den gesamten vierdimensionalen Raum, der dieser Anforderung für die erste Reihe der $\mathcal{R}$-Operatoren in $\mathcal{T}^{(\mathrm{N})}$ genügt. Die Anwendung der kompletten ersten Reihe auf dieses Matrixprodukt liefert

  $$\mathrm{Spur}\left[(\overline{m}\,m)^{N-1}\,\mathcal{U}\,[\overline{m}\,m]\right]. \tag{2.68}$$

  Der Zustand muß wiederum von jeder lokalen Einheit der zweiten Reihe von $\mathcal{T}^{(\mathrm{N})}$ mit dem maximalen Gewicht λ_0 abgebildet werden. Die Paar-Zustände, auf die $\mathcal{R}^{(2)}$ bis $\mathcal{R}^{(\mathrm{N-1})}$ der zweiten Reihe wirken, erfüllen nach Induktionsvoraussetzung diese Anforderung, was aber wegen der lokalen Form $m\,\overline{m}$ des Zustandes sowieso klar ist. Für die Identitäten an den Rändern stellt sich die Frage überhaupt nicht. Bei $\mathcal{R}^{(\mathrm{N})}$ ergibt sich jedoch eine Einschränkung für $\mathcal{U}$ (vgl Abb. 2.5).

  Da die beiden Zustände $\left((\overline{m}\,m)^{N-2}\,\overline{m}\right)_{ii} = \left(|\psi_\pm(b)\rangle \otimes |\psi_\pm(a)\rangle\right)^{N-2} \otimes |\psi_\pm(b)\rangle$ linear unabhängig sind, kann diese Bedingung getrennt an den Einträgen aus $m\,\mathcal{U}\,[\overline{m}\,m]$ untersucht werden. Explizit lauten diese Zustände

  $$\begin{aligned} &|\psi_+(a)\rangle \otimes \Big(\mathcal{U}_{11}\,|\psi_+(b)\rangle \otimes |\psi_+(a)\rangle + \mathcal{U}_{12}\,|\psi_-(b)\rangle \otimes |\psi_-(b)\rangle\Big), \\ &|\psi_-(a)\rangle \otimes \Big(\mathcal{U}_{21}\,|\psi_+(b)\rangle \otimes |\psi_+(a)\rangle + \mathcal{U}_{22}\,|\psi_-(b)\rangle \otimes |\psi_-(b)\rangle\Big). \end{aligned} \tag{2.69}$$

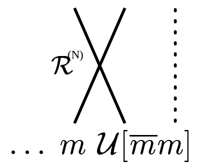


Abbildung 2.5: *Ausschnitt des Zustandes, auf den der Operator $\mathcal{R}^{(N)}$ der zweiten Reihe von $\mathcal{T}^{(N)}$ wirkt.*

Damit die Anteile des globalen Zustandes, auf die der N-te $\mathcal{R}$-Operator der nächsten Reihe wirkt, in dessen lokalem Grundzustandsraum V liegen, muß offensichtlich $\mathcal{U}_{12} = \mathcal{U}_{21} = 0$ oder kompakt

$$\mathcal{U}_{ik} = \delta_{ik} s_i \tag{2.70}$$

gelten, was genau

$$(m\,\overline{m})^{N-1}\,\mathcal{U}\,[\overline{m}\,m] = \begin{pmatrix} s_1\,|v_1\rangle^N & 0 \\ 0 & s_2\,|v_4\rangle^N \end{pmatrix} \tag{2.71}$$

bedeutet. Der Zustandsraum mit der behaupteten Eigenschaft für $\mathcal{T}^{(\mathrm{N})}$ ist also wieder zweidimensional, und die Einträge von $m\,\overline{m}$ spannen diesen gerade auf.

Wie oben bereits begründet, müssen alle Grundzustände notwendig von der Form

$$|\psi\rangle = \mathrm{Spur}\left[\,(m\,\overline{m})^N\,\mathcal{S}\right] \tag{2.72}$$

sein. Hier gilt jedoch bereits $T_{\mathrm{D}}\,|\psi\rangle = \lambda_0^N\,|\psi\rangle$, d.h. der globale Grundzustandsraum ist für beliebiges N zweidimensional.

Jeder Grundzustand ist also eine Linearkombination aus zwei einfachen Tensorprodukt-Zuständen. Damit können die Eigenschaften analog zum Modell mit $n = 1$ berechnet werden. Man erkennt ferner, daß $|\Psi_{G_1}\rangle$ identisch mit $|\Psi\rangle$ des vorigen Kapitels ist, die Eigenschaften sind folglich ebenfalls identisch. $|\Psi_{G_2}\rangle$ ensteht aus $|\Psi_{G_1}\rangle$ durch die Ersetzungen $a \to -a$ und $b \to -b$. Da alle Ergebnisse für $|\Psi_{G_1}\rangle$ nur von a^2, b^2 abhängen, gelten die Rechnungen ebenso für $|\Psi_{G_2}\rangle$ und somit auch für eine beliebige Linearkombination von $|\Psi_{G_1}\rangle$ und $|\Psi_{G_2}\rangle$.

Ein zu der Konstruktion für $n = 1$ analoger Beweis der Existenz einer Anregungslücke der DTM kann hier wegen der zweifachen lokalen Grundzustandsentartung nicht geführt werden. Für endliches N ist das Vorhandensein einer Lücke evident, eine asymptotische Entartung für $N \to \infty$ ist jedoch nicht ausgeschlossen. Sichere Aussagen über die freie Energie sind möglich, wenn das Modell forminvariant unter Rotation ist.

Dazu wird zunächst die Wirkung einer Drehung auf das Gitter untersucht. Eine Rotation um 90° nach links bzw. rechts entspricht dem Übergang

$$\mathcal{R}\,(\mu,\alpha\,|\,\beta,\nu) \quad\longrightarrow\quad \mathcal{R}\,(-\beta,\mu\,|\,\nu,-\alpha) \quad \text{bzw.} \quad \mathcal{R}\,(\alpha,-\nu\,|\,-\mu,\beta)\,. \tag{2.73}$$

Es sei $\widetilde{\mathcal{R}}$ das Modell, das aus $\mathcal{R}$ durch die Verwendung der Parameter $\widetilde{a},\widetilde{b},\widetilde{\lambda}_0,\widetilde{\lambda}_1,\widetilde{\lambda}_2$ hervorgeht. Damit das gedrehte Vertexmodell dieselbe funktionale Gestalt wie das ursprünglich konstruierte Modell hat, ist

$$\mathcal{R}\,(\mu,\alpha\,|\,\beta,\nu) = \widetilde{\mathcal{R}}\,(-\beta,\mu\,|\,\nu,-\alpha) \quad \text{bzw.} \quad \widetilde{\mathcal{R}}\,(\alpha,-\nu\,|\,-\mu,\beta) \tag{2.74}$$

für alle μ,α,β,ν zu fordern. Die Gleichungen sind hochgradig nichtlinear in den Parametern $a,b,\widetilde{a},\widetilde{b}$. Das System dieser Gleichungen kann gelöst, d.h. es können Parameter $\widetilde{a},\widetilde{b},\widetilde{\lambda}_0,\widetilde{\lambda}_1,\widetilde{\lambda}_2$ gefunden werden, wenn

$$\lambda_1 = \lambda_0\Phi_1(a,b),\ \lambda_2 = \lambda_0\Phi_2(a,b) \ \ \text{(links)} \tag{2.75}$$

bzw.

$$\lambda_1 = \lambda_0\Phi_1(b,a),\ \lambda_2 = \lambda_0\Phi_2(b,a) \ \ \text{(rechts)} \tag{2.76}$$

gilt, wobei

$$\begin{aligned} \Phi_1(a,b) &= \frac{2ab(1-a^4)}{\beta(b^4-a^4)(1+a^4)+2a^2(1-a^2b^2)} \\ \Phi_2(a,b) &= \frac{\beta^2\big(1-a^4\big)\big(4a^2b^2+\beta(b^4-a^4)(b^2-a^2)\big)}{\beta(b^4-a^4)(1+a^4)+2a^2(1-a^2b^2)} \end{aligned} \tag{2.77}$$

für $a \neq 1$ und $b \neq 1$ sowie

$$\Phi_1(1,1) = -\Phi_2(1,1). \tag{2.78}$$

Numerisch wurde überprüft, daß gleichzeitig (2.60) erfüllbar ist und alle Vertexgewichte positiv sind. In diesen Fällen entsteht bei einer 90°-Rotation ein formgleiches Modell, wobei $\lambda_0 \to \lambda_0$, $\lambda_1 \to \lambda_1$, $\lambda_2 \to \lambda_2$, $a \to b$ und $b \to a$. Die neue DTM $\widetilde{T}_{\text{D}}$ hat damit dieselben Eigenschaften wie T_{D}, insbesondere gilt $\widetilde{\Lambda}_{\text{max}} = \lambda_0^N$.

Abschließend soll die Konstruktion des parentalen Vertexmodells dieses Abschnitts mit der des Falles $n=1$ in Verbindung gebracht werden. Der (einzige) lokale Grundzustand für $n=1$ ist in dem durch die Zustände $|u_1\rangle\,,|u_2\rangle$ aufgespannten Raum enthalten. Folglich ist die exakt lösbare Linie des Acht-Vertex-Modells ein Randpunkt der Modellklasse für $n=1$, nämlich insofern, daß dort im orthogonalen Fall für einen Zustand $|v^\perp\rangle$ aus $V^\perp$ die Bedingung $\big|\big|\mathcal{R}\,|v^\perp\rangle\big|\big| = \lambda_0$ erfüllt ist oder für $a=b$ ein Eigenwert der $\alpha^\perp$-Matrix gleich λ_0 wird. Vom Blickpunkt des Kap. 2.2 aus läßt sich vermuten, daß der globale Grundzustand am Rand der Parametermannigfaltigkeit entartet. Hier konnte gezeigt werden, daß diese Entartung genau zweifach ist. Der Eigenwert eines weiteren Zustandes nähert sich dem maximalen Eigenwert und entartet mit diesem exakt auf dem Rand des Parameterraumes von Kap. 2.2.

Die Grenzfälle $(a, b) \to (0,0), (0,\infty), (\infty, 0), (\infty,\infty)$ sind identisch mit denen des vorigen Kapitels, da dann $|\Psi_{G_1}\rangle = |\Psi_{G_2}\rangle = |\Psi_G\rangle$ gilt.

2.3.1 Unordnungslinien des feldfreien Acht-Vertex-Modells

Die hermitesche Unterklasse des soeben konstruierten Modells ist genau dann feldfrei, wenn $a = b = 1$ gilt. Die Vertexgewichte lauten dann

$$\begin{aligned}
\mathcal{R}(+,+\,|\,+,+) = \mathcal{R}(-,-\,|\,-,-) &= \tfrac{1}{2}(\lambda_0+\lambda_1) &= w_a, \\
\mathcal{R}(+,-\,|\,-,+) = \mathcal{R}(-,+\,|\,+,-) &= \tfrac{1}{2}(\lambda_0-\lambda_2) &= w_b, \\
\mathcal{R}(+,-\,|\,+,-) = \mathcal{R}(-,+\,|\,-,+) &= \tfrac{1}{2}(\lambda_0+\lambda_2) &= w_c, \\
\mathcal{R}(+,+\,|\,-,-) = \mathcal{R}(-,-\,|\,+,+) &= \tfrac{1}{2}(\lambda_0-\lambda_1) &= w_d.
\end{aligned} \tag{2.79}$$

Gemäß der üblichen Notation für das Acht-Vertex-Modell ohne externes Feld sind die Gewichte nach den Typen a, b, c, d geordnet. Offensichtlich hat man für die Positivität der Vertexgewichte und die Beschränkung des Spektrums der DTM nach (2.60)

$$|\lambda_i| < \lambda_0 \tag{2.80}$$

zu wählen. Fordert man zusätzlich die Forminvarianz unter Rotation des Gitters, ist, wie zuvor dargelegt, $\lambda_2 = -\lambda_1$ zu setzen. Unter dieser Voraussetzung kann also das Ergebnis $f = -k_B T \ln \lambda_0$ gefolgert werden.

Offenbar gilt $w_a + w_d = w_b + w_c = \lambda_0$. Nach [1] befindet man sich bei dieser Eigenschaft der Vertexgewichte in einem Bereich totaler Unordnung und die freie Energie ergibt sich als $f = -k_B T \ln \frac{1}{2}(w_a + w_c + w_b + w_d)$, was mit den hier gewonnenen Ergebnissen exakt übereinstimmt und auch ohne die durch die Rotationssymmetrie gegebenen Einschränkungen erfüllt ist. Dies ist ein Indiz dafür, daß man die Richtigkeit des Zusammenhangs zwischen $\Lambda_{\max}$ und der freien Energie im thermodynamischen Limes auch unter schwächeren Voraussetzungen annehmen kann.

2.4 $(q = 3)$–Modelle auf dem Quadratgitter

2.4.1 Konstruktion des parentalen Vertexmodells

Die Bond-Zustände seien durch $|1\rangle = |-\rangle$, $|2\rangle = |0\rangle$, und $|3\rangle = |+\rangle$ gegeben, um direkt die Verbindung zu $(S = 1)$-Systemen herzustellen. Der $\mathcal{R}$-Operator hat $3^4 = 81$ Einträge, und ein parentales Vertexmodell für $q = 3$ ist damit eine Unterklasse des allgemeinsten 81-Vertex-Modells. Die zugrunde liegenden Matrizen sind

$$\begin{aligned} m &= \begin{pmatrix} |0\rangle & a\,|+\rangle \\ a\,|-\rangle & |0\rangle \end{pmatrix}, \\ \overline{m} &= \begin{pmatrix} |0\rangle & b\,|+\rangle \\ b\,|-\rangle & |0\rangle \end{pmatrix}, \end{aligned} \tag{2.81}$$

mit kontinuierlichen Parametern a und b, die hier als reell und größer gleich null angenommen werden. Die Zustands-Matrizen entsprechen bis auf die Ersetzungen $\sqrt{a} \to ia$ bzw. $\sqrt{b} \to ib$ den in [6] verwendeten. Die aus $m\,\overline{m}$ und $\overline{m}\,m$ entstehenden Zwei-Spin-Zustände sind Eigenzustände zum Paar-Spin-Operator, was der S_z-Erhaltung in Quantensystemen entspricht und einen invarianten Unterraum zum Operator, der eine totale Spin-Umkehr auf dem Paar-Spin-Raum erzeugt, bilden:

$$m\,\overline{m} = \begin{pmatrix} |00\rangle + ab\,|+-\rangle & b\,|0+\rangle + a\,|+0\rangle \\ a\,|-0\rangle + b\,|0-\rangle & |00\rangle + ab\,|-+\rangle \end{pmatrix}, \tag{2.82}$$

$$\overline{m}\,m = \begin{pmatrix} |00\rangle + ab\,|+-\rangle & a\,|0+\rangle + b\,|+0\rangle \\ b\,|-0\rangle + a\,|0-\rangle & |00\rangle + ab\,|-+\rangle \end{pmatrix}. \tag{2.83}$$

Dadurch wird es möglich, unabhängig von a und b feldfreie Vertexmodelle zu erzeugen. Der $\mathcal{P}$-Operator muß auf V folgende Wirkung haben:

$$\begin{aligned} |v_1\rangle &= |00\rangle + ab\,|+-\rangle &\longrightarrow\quad |w_1\rangle &= |00\rangle + ab\,|+-\rangle\,, \\ |v_2\rangle &= b\,|0+\rangle + a\,|+0\rangle &\longrightarrow\quad |w_2\rangle &= a\,|0+\rangle + b\,|+0\rangle\,, \\ |v_3\rangle &= a\,|-0\rangle + b\,|0-\rangle &\longrightarrow\quad |w_3\rangle &= b\,|-0\rangle + a\,|0-\rangle\,, \\ |v_4\rangle &= |00\rangle + ab\,|-+\rangle &\longrightarrow\quad |w_4\rangle &= |00\rangle + ab\,|-+\rangle\,. \end{aligned} \tag{2.84}$$

Eine Orthonormalbasis des Raumes $V^{\perp}$ bildet etwa

$$\begin{aligned} |v_1^{\perp}\rangle &= \gamma\big[\,|+-\rangle + |-+\rangle - ab\,|00\rangle\,\big], \\ |v_2^{\perp}\rangle &= \beta\big[a\,|0+\rangle - b\,|+0\rangle\,\big], \\ |v_3^{\perp}\rangle &= \beta\big[a\,|0-\rangle - b\,|-0\rangle\,\big], \\ |v_4^{\perp}\rangle &= |--\rangle\,, \\ |v_5^{\perp}\rangle &= |++\rangle\,, \end{aligned} \tag{2.85}$$

mit $\beta = \sqrt{a^2+b^2}^{\,-1}$, $\gamma = \sqrt{2+a^2b^2}^{\,-1}$, und es sei durch

$$\begin{aligned} |u_1\rangle &= \tfrac{1}{\sqrt{2}ab}\big[\,|v_1\rangle - |v_4\rangle\,\big], \\ |u_2\rangle &= \beta\,|v_2\rangle\,, \\ |u_3\rangle &= \beta\,|v_3\rangle\,, \\ |u_4\rangle &= \tfrac{1}{\sqrt{2}}\gamma\big[\,|v_1\rangle + |v_4\rangle\,\big] \end{aligned} \tag{2.86}$$

eine Orthonormalbasis von V gegeben. Der Operator $\mathcal{P}_V$ wird nun folgendermaßen konstruiert. Man nehme zunächst einen beliebigen Operator auf dem Zwei-Spin-Raum, der bekanntlich 81 freie Parameter enthält. Nach Wahl von $\left|v_1^\perp\right\rangle$ bis $\left|v_5^\perp\right\rangle$ und der gegebenen Zustände $|v_1\rangle$ bis $|v_4\rangle$ bekommt man aus den Bedingungen $\mathcal{P}_V\,|v_i\rangle = |w_i\rangle$ sowie $\mathcal{P}_V\left|v_i^\perp\right\rangle = 0$ ein lineares Gleichungssystem mit 81 linear unabhängigen Gleichungen. Die eindeutige Lösung dieses Systems liefert sofort den gewünschten Operator. Der Erfolg dieser Konstruktion geht natürlich mit dem aus der linearen Algebra bekannten Satz einher, daß jede lineare Abbildung auf einer Basis bereits vollständig definiert ist. Im Gegensatz zum $(q = 2)$–Modell des vorhergehenden Abschnitts kann durch geeignete Wahl von a, b nicht erreicht werden, daß die Matrixelemente von P_V bezüglich der Basis der kanonischen Zwei-Spin-Zustände größer oder gleich null sind. Daher wird die spezielle Wahl $A = 0$ kein physikalisches Modell liefern.

Eine genauere Untersuchung der Bedingung $\mathcal{R}\,(\mu,\alpha\,|\,\beta,\nu) \geq 0$ liefert folgenden Satz von kontinuierlichen Parametern. Die Parameter α_{ij} und $\alpha_{ij}^\perp$ werden dabei wegen $d = 4$ und $k = 5$ als 4×5- bzw. 5×5-Matrizen zusammengefaßt.

$$
\begin{aligned}
\alpha &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -\lambda_{10} & \lambda_{13} \\ 0 & \lambda_{16} & 0 & \lambda_8 & \lambda_4 \\ 0 & 0 & \lambda_{18} & \lambda_2 & \lambda_6 \\ \lambda_1 & 0 & 0 & \lambda_{12} & \lambda_{15} \end{pmatrix}, \\
\alpha^\perp &= \begin{pmatrix} \lambda_0 - \frac{ab}{\sqrt{2}}\lambda_1 & 0 & 0 & \lambda_{11} & \lambda_{14} \\ 0 & \lambda_{17} & 0 & -\lambda_9 & -\lambda_5 \\ 0 & 0 & \lambda_{19} & -\lambda_3 & -\lambda_7 \\ 0 & 0 & 0 & \lambda_{20} & \lambda_{21} \\ 0 & 0 & 0 & \lambda_{22} & \lambda_{23} \end{pmatrix}
\end{aligned}
\tag{2.87}
$$

Die daraus entstehenden Vertex-Gewichte sind im Anhang C explizit aufgeführt. Zusätzlich müssen eine Reihe von Ungleichungen erfüllt werden, was ebenfalls im Anhang diskutiert wird.

Um die Hermitizität von $\mathcal{R}$ oder den orthogonalen Fall zu erreichen, muß insbesondere $\lambda_1 = 0$ gesetzt werden. Im ersten Fall folgt dies aus $\alpha = 0$, im zweiten wegen $|v_1\rangle \equiv |w_1\rangle$ und $|v_2\rangle \equiv |w_2\rangle$. Damit besitzt die Matrix $\alpha^\perp$ mit Sicherheit den Eigenwert λ_0, so daß die Entartung des lokalen Grundzustandsraumes ansteigt. Somit kann zwar garantiert werden, daß der größte Eigenwert der DTM gleich λ_0^N ist, die angesetzten Matrixzustände sind jedoch nur noch begrenzt zur Vorhersage von Eigenschaften der Grundzustände brauchbar.

Die hermitesche Unterklasse des Modells soll nun genauer betrachtet werden. Man hat dazu

$$\begin{gathered} a = b, \\ \lambda_i = 0 \quad (i \neq 17, 19, 20, \ldots, 23), \\ \lambda_{22} = \lambda_{21} \end{gathered} \tag{2.88}$$

zu wählen. Folglich verbleiben fünf freie Parameter. Die Eigenwerte der $\alpha^\perp$-Matrix sind

$$\lambda_0,\ \lambda_{17},\ \lambda_{19},\ \frac{\lambda_{20} + \lambda_{23}}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\lambda_{20} - \lambda_{23}}{2}\right)^2 + \lambda_{21}^2}. \tag{2.89}$$

Insgesamt wird die Positivität und die Bedingung $\Lambda_{\max} = \lambda_0^N$ daher garantiert durch

$$\begin{gathered} |\lambda_{17}|\,, |\lambda_{19}| \le \lambda_0, \\ 0 \le \lambda_{20}, \lambda_{21}, \lambda_{23} \le \lambda_0 \text{ mit } \left|\tfrac{\lambda_{20}+\lambda_{23}}{2} \pm \sqrt{\left(\tfrac{\lambda_{20}-\lambda_{23}}{2}\right)^2 + \lambda_{21}^2}\right| \le \lambda_0. \end{gathered} \tag{2.90}$$

In Kap. 1.2 wurden Kriterien angegeben, bei deren Gültigkeit die freie Energie ohne Annahmen im thermodynamischen Limes berechnet werden kann. Hier läßt sich die Möglichkeit nutzen, eine untere Schranke für die Zustandssumme anzugeben.

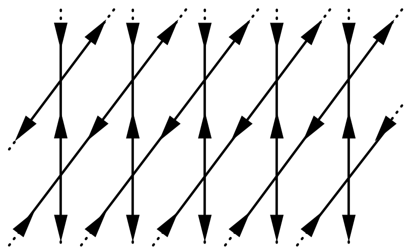


Abbildung 2.6: *Konfiguration mit dem globalen Gewicht λ_0^{MN}. Pfeile, die nach oben bzw. unten zeigen, repräsentieren die Zustände $|+\rangle$ bzw. $|-\rangle$. Die periodischen Randbedingungen (vgl. Abb. 1.4) erfordern, daß M gerade ist.*

Die in Abb. 2.6 dargestellte (antiferroelektrische) Spin-Konfiguration hat wegen $\mathcal{R}(+,-\,|\,+,-) = \mathcal{R}(-,+\,|\,-,+) = \lambda_0$ das globale Gewicht λ_0^{MN}. Die Zustandssumme ist gerade die Summe der Gewichte aller Konfigurationen. Weil nur nichtnegative Beiträge aufsummiert werden, kann man daher sofort

$$Z \ge \lambda_0^{MN} \tag{2.91}$$

schließen. Unter Berücksichtung von $\Lambda_{\max} = \lambda_0^N$ gelingt die Abschätzung aus Kap. 1.2 mit der Funktion $h(N,M) \equiv 1$ und dem wichtigen Ergebnis $f = -k_B T \ln \lambda_0$ im thermodynamischen Limes.

Die Vertexgewichte sind im hermiteschen Fall unabhängig vom Zustandsparameter a. Damit ist nach Konstruktion des Modells aber für jedes a der Zustand $|\Psi_G(a)\rangle = \text{Spur} \prod_{i=1}^{2N} m$ ein Grundzustand des Systems. Insbesondere sind in dieser Schar die Zustände $\prod^{\otimes} |00\rangle$ und $\prod^{\otimes} |+-\rangle + \prod^{\otimes} |-+\rangle$ mit langreichweitiger Ordnung enthalten, nämlich als Grenzfälle $a \to 0$ bzw. $a \to \infty$. Dies ergibt eine zu [6] analoge Berechnung der Korrelationslänge des Zustandes $|\Psi_G(a)\rangle$ mithilfe der Transfermatrix-Methode: $\xi^{-1} = 2 \ln \left| \frac{1+a^2}{1-a^2} \right|$.

Für fest gewähltes N ist der Zustand $|\Psi_G(a)\rangle$ von der Form

$$|\Psi_G(a)\rangle = \sum_{\mu=0}^{N} a^{2\mu} |\chi_\mu\rangle , \tag{2.92}$$

wobei $|\chi_0\rangle, \ldots, |\chi_N\rangle$ linear unabhängige Vektoren sind. Dies kann durch vollständige Induktion leicht gezeigt werden. Bei Wahl einer Sequenz $0 < a_0 < a_1 < \ldots < a_N$ sind die Vektoren $|\Psi_G(a_0)\rangle, \ldots |\Psi_G(a_N)\rangle$ ebenfalls linear unabhängig, denn es ist

$$\det \begin{pmatrix} 1 & a_0^2 & a_0^4 & \ldots & a_0^{2N} \\ 1 & a_1^2 & a_1^4 & \ldots & a_1^{2N} \\ & \vdots & & \vdots & \\ 1 & a_N^2 & a_N^4 & \ldots & a_N^{2N} \end{pmatrix} = \prod_{\mu>\nu} \left(a_\mu^2 - a_\nu^2 \right) > 0 \tag{2.93}$$

(vgl. VANDERMONDEsche Determinante [16]). Daraus schließt man sofort, daß der Entartungsgrad des globalen Grundzustands mindestens linear mit N wächst.

Zudem ist $\prod^{\otimes} |+-\rangle - \prod^{\otimes} |-+\rangle$ ein Eigenzustand von T_{D} zum Eigenwert $-\lambda_0^N$. Da M für die Abschätzung der Zustandssumme sowieso gerade sein muß, liefert auch dieser Zustand stets das globale Gewicht $+\lambda_0^{MN}$ und ist folglich energetisch mit den Zuständen $|\Psi_G(a)\rangle$ entartet.

Im Rahmen der hier vorgestellten Methode sind keine strengen Ergebnisse für $\lambda_1 \neq 0$ möglich. Man kann jedoch annehmen, daß auch dann in gewissen Bereichen der übrigen λ-Parameter $\Lambda_{\max} = \lambda_0^N$ gilt. Gestützt wird diese Annahme durch die exakte Berechnung der Eigenwerte der DTM für $N = 2$. Da (2.91) gültig bleibt, ändert sich nichts am Ergebnis für die freie Energie.

2.4.2 Ergebnisse für das 19-Vertex-Modell

Ausgehend von der hermiteschen Unterklasse des konstruierten ($q = 3$)-Modells wird nun gefordert, daß nur solche Vertexgewichte verschieden von null, die die sogenannte Eisregel erfüllen,

$$\alpha + \mu = \beta + \nu. \tag{2.94}$$

Anschaulich bedeutet dies soviel wie Linienerhaltung an den Vertizes [1] und ist eng verknüpft mit der S_z-Erhaltung korrespondierender Spin-1 Quanten-Ketten. Zusätzlich werden beim 19-Vertex-Modell folgende Symmetrien verlangt [13, 14]:

Feldfreiheit:	$\mathcal{R}\,(\mu,\alpha\,\vert\,\beta,\nu) = \mathcal{R}\,(-\mu,-\alpha\,\vert\,-\beta,-\nu)$
Spiegel-Symmetrien:	$\mathcal{R}\,(\mu,\alpha\,\vert\,\beta,\nu) = \mathcal{R}\,(\alpha,\mu\,\vert\,\nu,\beta) = \mathcal{R}\,(\beta,\nu\,\vert\,\mu,\alpha)$

Dadurch verbleiben nur sieben unabhängige Vertexgewichte nämlich

$$\begin{aligned}
w_a &= \mathcal{R}\,(+,+\,|\,+,+)\,, \\
w_b &= \mathcal{R}\,(+,-\,|\,-,+)\,, \\
w_c &= \mathcal{R}\,(+,-\,|\,+,-)\,, \\
w_e &= \mathcal{R}\,(+,\,0\,|\,+,\,0)\,, \\
w_g &= \mathcal{R}\,(+,-\,|\,0,\,0)\,, \\
w_p &= \mathcal{R}\,(+,\,0\,|\,0,+)\,, \\
w_o &= \mathcal{R}\,(\,0,\,0\,|\,0,\,0)\,.
\end{aligned} \tag{2.95}$$

Ein Vergleich mit den Vertexgewichten des hermiteschen Modells liefert die Einschränkungen

$$\lambda_{23} = \lambda_{20},\ \lambda_{19} = \lambda_{17},\ \lambda_{21} = \lambda_{22} = 0. \tag{2.96}$$

Mit den neu definierten Parametern $\eta = \frac{1}{2}(\lambda_0 + \lambda_{17})$ und $\zeta = \lambda_{20}$ lauten die Gewichte

$$\begin{array}{lll}
w_a = \zeta, & w_b = 0, & w_c = \lambda_0 \\
w_e = \eta, & w_g = 0, & w_p = \lambda_0 - \eta \\
w_o = \lambda_0. & &
\end{array} \tag{2.97}$$

Der Parameterbereich erstreckt sich nach (2.90) über

$$0 \leq \eta, \zeta \leq \lambda_0. \tag{2.98}$$

2.5 Algebraische Methode

Neben der Konstruktion von exakt lösbaren Vertexmodelle, ausgehend von vorgegebenen Zuständen, ist auch ein anderer Zugang denkbar: Für einen vorgegebenen

$\mathcal{R}$-Operator macht man einen Matrixprodukt-Ansatz und versucht die freien Parameter des Ansatzes zu bestimmen. Dieser Weg ist aus dem Bereich der stochastischen Prozesse bekannt.

Zur Erläuterung des Prinzips werde ein $(q = 2)$–Modell gewählt. Für ein vorgegebenes Vertexmodell mit den Gewichten $\mathcal{R}\,(\mu, \alpha \,|\, \beta, \nu)$ seien bei fixiertem n die Matrizen aus Ein-Spin-Zuständen durch

$$\begin{aligned} m_{ij} &= e_{ij}\,|-\rangle + d_{ij}\,|+\rangle \\ \overline{m}_{ij} &= \overline{e}_{ij}\,|-\rangle + \overline{d}_{ij}\,|+\rangle \end{aligned} \tag{2.99}$$

mit $4n^2$ Parametern definiert. Man fordert erneut

$$\mathcal{R}\big[m\,\overline{m}\big] = \lambda_0\,\overline{m}\,m. \tag{2.100}$$

Die DTM des zweidimensionalen Vertexmodells bzw. die lokale Einheit $\mathcal{R}$ entspricht exakt dem den Update generierenden Operator bei paralleler Dynamik (Untergitter-Paralleler-Update) in eindimensionalen, stochastischen Modellen, während die Anwendung der Reihen-Transfermatrix zum geordnet sequentiellen Update korrespondiert [9–12]. Das lokale Kriterium (2.1) wird nun als Algebra für die im Ansatz von m und $\overline{m}$ verwendeten Parameter interpretiert. Dazu faßt man die Parameter zu Matrizen zusammen,

$$(E)_{ij} = e_{ij}, \quad \big(\overline{E}\big)_{ij} = \overline{e}_{ij}, \quad (D)_{ij} = d_{ij}, \quad \big(\overline{D}\big)_{ij} = \overline{d}_{ij}. \tag{2.101}$$

Mit dieser Notation schreibt sich (2.100) als

$$\mathcal{R}\left[\begin{pmatrix} E \\ D \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} \overline{E} \\ \overline{D} \end{pmatrix}\right] = \lambda_0 \begin{pmatrix} \overline{E} \\ \overline{D} \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} E \\ D \end{pmatrix}, \tag{2.102}$$

wobei hier $\mathcal{R}$ über $\mathcal{R}_{\beta+(\nu+5)/2,\mu+(\alpha+5)/2} = \mathcal{R}\,(\mu, \alpha \,|\, \beta, \nu)$ als 4×4-Matrix definiert ist. Die erste der insgesamt vier Gleichungen lautet also beispielsweise

$$\mathcal{R}_{1,1}E\overline{E} + \mathcal{R}_{1,2}E\overline{D} + \mathcal{R}_{1,3}D\overline{E} + \mathcal{R}_{1,4}D\overline{D} = \lambda_0\,\overline{E}E. \tag{2.103}$$

Gesucht sind nun nichttriviale Lösungen, was das Lösen quadratischer Gleichungen für die Parameter bedeutet. Anschließend muß man überprüfen, ob das Spektrum der DTM durch den Wert λ_0^N beschränkt ist, was die möglichen Lösungen oder die Parameter des Modells einschränken wird. Spätestens hier stößt man jedoch auf ähnliche Probleme wie bisher.

Diese Idee soll hier nicht weiter diskutiert werden, der Vollständigkeit halber aber erwähnt worden sein.

Kapitel 3

Dreidimensionale Systeme

3.1 Vertexprodukt-Zustände

Um dreidimensionale Modelle mit einer zu der oben an zweidimensionalen vorgeführten analogen Methode zu untersuchen, benötigt man Zustände, die in einer Ebene angesiedelt sind und auf die die DTM wirkt. Hierzu bietet sich eine auf höhere Dimensionen verallgemeinerte Form der Matrixprodukt-Zustände an, die mit der graphischen Repräsentation dieser schon vorbereitet wurde.

Auch hier kann damit ein globaler Zustand konstruiert werden, der einerseits Produktstruktur aufweist, andererseits interessantere Korrelationen als einfache Tensorproduktzustände zeigt. Die die Ein-Spin-Zustände darstellenden Vertizes haben nun soviele Beine, wie es in der Zustandsebene nächste Nachbarn gibt. Die Anzahl der verschiedenen Stellungen der Pfeile an deren Beinen korrespondiert zu den möglichen Werten der Matrixindizes im Fall der Matrixprodukt-Zustände. Eine Multiplikation von Vertex-Zuständen, also das Bilden von Vertexprodukt-Zuständen geschieht ebenfalls analog durch das Aneinandersetzen geeigneter Graphen und Summation über die inneren Pfeile.

3.2 Das $(z = 4)$–Gitter

Dieses Gitter soll wiederum aus Vertizes, die Boltzmanngewichte repräsentieren, aufgebaut werden. Vorgegeben seien drei Typen von $\mathcal{R}$-Operatoren, nämlich $\mathcal{R}^A$, $\mathcal{R}^B$ und $\mathcal{R}^C$, mit der jeweiligen graphischen Darstellung Abb. 3.1, die in der xy- (Typ A), der zx- (Typ B) bzw. der yz-Ebene (Typ C) liegen sollen.

Daraus konstruiert man in folgender Weise eine dreidimensionale Struktur: Man bildet Ketten $\ldots ABABABAB \ldots$, die in x-Richtung liegen, und verbindet diese durch Vertizes vom Typ C zu Ebenen in xy-Richtung. Die Ebenen werden dann um jeweils einen Platz in Richtung der Flächendiagonale verschoben aufeinander

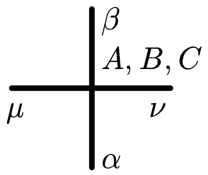
$\mathcal{R}^{A,B,C}\,(\mu,\alpha\,|\beta,\nu) \quad \longleftrightarrow$ 

Abbildung 3.1: *Vertizes des* $(z=4)$*–Gitters.*

geschichtet und die freien Enden der $\mathcal{R}^B$- und $\mathcal{R}^C$-Operatoren verbunden, was auf ein Gitter mit der Koordinationszahl vier führt. In z-Richtung wiederholt sich die Struktur alle zwei Ebenen, d.h. die geraden bzw. die ungeraden Lagen sind identisch.

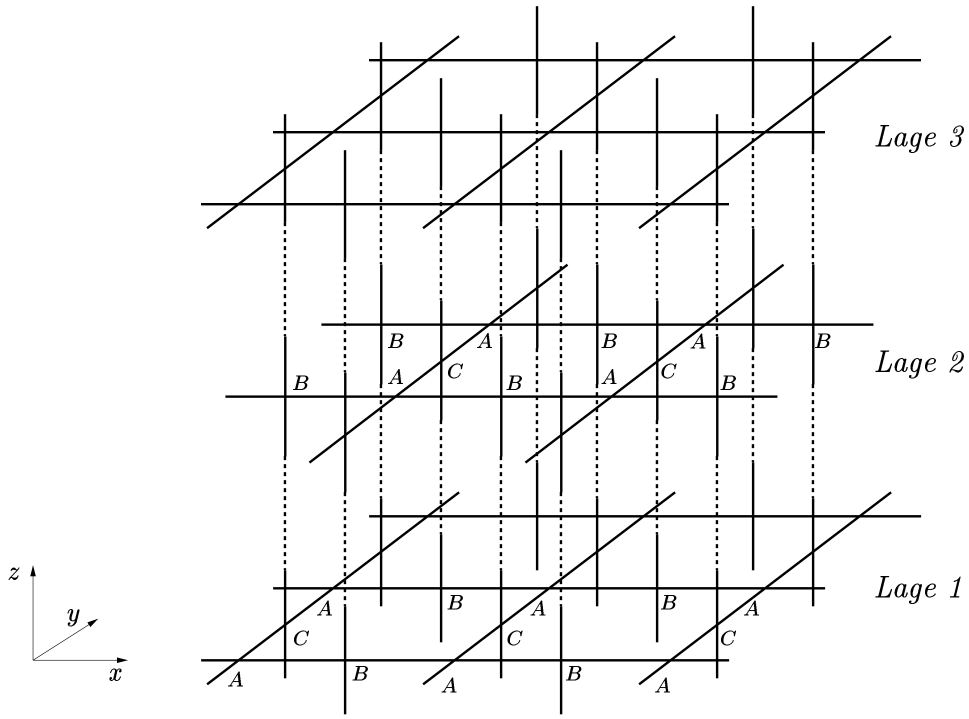


Abbildung 3.2: *Das* $(z=4)$*–Gitter in drei Dimensionen.*

Das Gitter kann ebenfalls als *bcc*-Gitter mit der dreiatomigen Basis (A,B,C) betrachtet werden, wobei für jedes Atom NN-Wechselwirkung erlaubt ist. Eine Scherung des Gitters, durch die die DTM konstruiert wurde, ist im dreidimensionalen Fall wenig anschaulich. Alternativ kann man in zwei Dimensionen den Schnitt der Bonds mit einer um eine halbe Gitterkonstante verschobenen Flächendiagonale, in drei Dimensionen einer in Richtung der Raumdiagonalen verschobene Ebene, deren Flächennormale eine Raumdiagonale ist, betrachten. Führt man dies für das soeben konstruierte Gitter durch, so bilden die Schnittpunkte ein hexagonales Gitter. Das so entstehende zweidimensionale Punktgitter stellt gerade die Struktur des zweidimensionalen Zustands dar, auf den die DTM wirkt. Da die Koordinationszahl des hexagonalen Gitters drei ist, werden Vertex-Zustände verwendet, die drei Beine haben. Die oben definierten $\mathcal{R}$-Operatoren wirken jeweils auf Paar-Spin-Zustände. Unterscheidet man die Bond-Zustände nach der Achse, auf der sie definiert sind, so genügen drei verschiedene Vertex-Zustände, um den gesamten zweidimensionalen Zustand, auf dem die DTM operiert, zu erzeugen.

$$\left|Z^x_{i_1,i_2,i_3}\right\rangle =$$

$$\left|Z^y_{i_1,i_2,i_3}\right\rangle =$$

$$\left|Z^z_{i_1,i_2,i_3}\right\rangle =$$

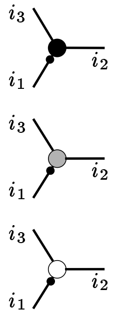


Abbildung 3.3: *Vertex-Zustände für das hexagonale Gitter.*

Das mit dem ersten Index bezeichnete Bein ist mit einer zusätzlichen Marke versehen, die beiden anderen sind dann im mathematisch positiven Sinn mit zyklischen Indizes durchzunumerieren. Die Verknüpfung von zwei derartigen Vertizes ist wie im zweidimensionalen Fall als Summe über die inneren Pfeile, also der Pfeile auf der Verbindung zwischen den Vertizes definiert, wobei die Indizes jeweils n verschiedene Werte annehmen können. Für den Fall $n = 2$ beispielsweise ist

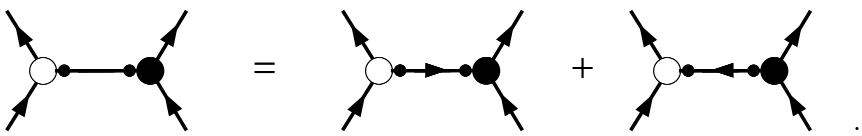


Abbildung 3.4: *Gesetz für die Bildung von Vertexprodukt-Zuständen.*

Auch hier gestattet die Struktur der DTM, ein lokales Kriterium als Ausgangspunkt für die Konstruktion parentaler Vertexmodelle zu benutzen. Um die Zuordungen $\mathcal{R}^A$, $\mathcal{R}^B$, $\mathcal{R}^C$ mit den Zuständen Z^x, Z^y, Z^z zu fixieren, sei als Schnittebene diejenige Diagonalebene gewählt, zu der der Vektor $(1,1,1)$ orthogonal ist.

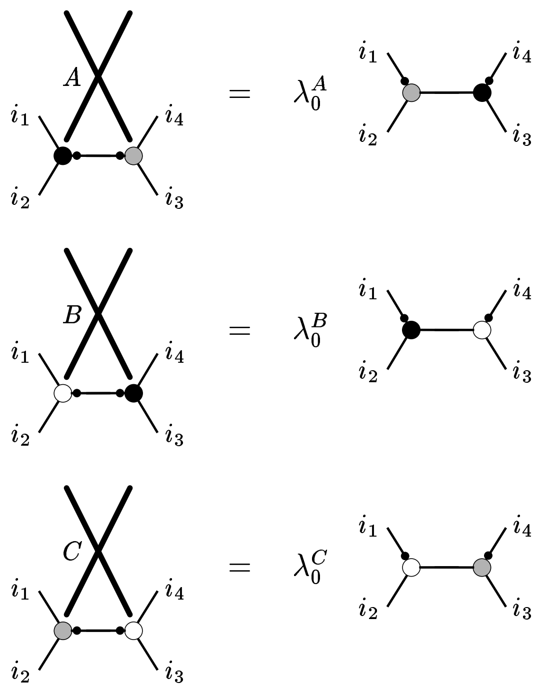


Abbildung 3.5: *Bedingungen für $\mathcal{R}^A$, $\mathcal{R}^B$ und $\mathcal{R}^C$.*

Die Bedingungen, die die $\mathcal{R}$-Matrizen erfüllen sollen, sind graphisch durch Abb. 3.5 gegeben, formal schreiben sich diese z.B. für $\mathcal{R}^A$ als

$$\mathcal{R}^A \left(\sum_{\rho=1}^{n} \left| Z^x_{\rho,i_1,i_2} \right\rangle \otimes \left| Z^y_{n-\rho+1,i_3,i_4} \right\rangle \right) = \lambda_0^A \left(\sum_{\rho=1}^{n} \left| Z^y_{i_1,i_2,\rho} \right\rangle \otimes \left| Z^x_{i_4,n-\rho+1,i_3} \right\rangle \right) \tag{3.1}$$

mit den vier externen Indizes i_1,i_2,i_3,i_4. In der graphischen Notation des Kriteriums sei das Bein der $\mathcal{R}$-Matrix, das den Index μ trägt, jeweils links. Die beiden anderen Bedingungen entstehen analog durch Benutzung der Tripel (B,z,x) und (C,y,z) anstelle von (A,x,y). Auf jedem Sechseck des hexagonalen Zustandsgitters wirkt nun jede der drei $\mathcal{R}$-Matrizen genau einmal, so daß insgesamt Abb. 3.6 gilt.

Mithilfe dieses Kriteriums konstruiert man einen Eigenzustand der DTM. Da sich die Struktur der Zustandsebene nur alle drei Lagen wiederholt, ist es einfacher, chirale Randbedingungen in allen Raumrichtungen zu wählen. Eine komplette DTM ist dann das Produkt dreier Matrizen T'_{D}, T''_{D}, T'''_{D} mit jeweils reiner Produktstruktur, die sich nur um Translation der $\mathcal{R}$-Matrizen in der Diagonalebene unterscheiden.

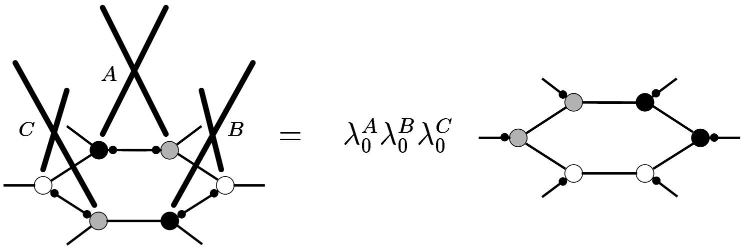


Abbildung 3.6: *Wirkung von $\mathcal{R}^A \otimes \mathcal{R}^B \otimes \mathcal{R}^C$ auf einem vollständigen Sechseck.*

Man füllt das gesamte Zustandsgitter mit den den drei verschiedenen Untergitter richtig zugeordneten Vertex-Zuständen auf. Danach wird über sämtliche Pfeilkonfigurationen auf den Verbindungslinien nach den Regeln für die Bildung von Vertexprodukt-Zuständen summiert. Die Zustandsebene kann dann als aus elementaren Einheiten, in diesem Fall Sechsecke (Abb. 3.7), aufgebaut betrachtet werden, wobei die Beine i_1, i_2, i_3 als Eingänge, die Beine j_1, j_2, j_3 als Ausgänge fungieren.

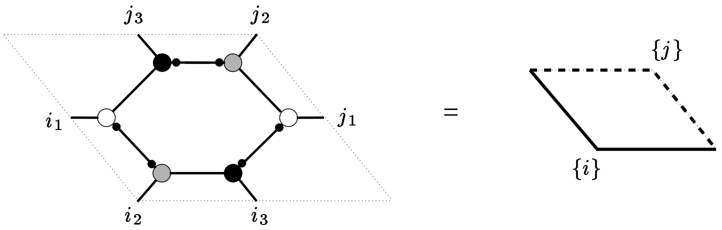


Abbildung 3.7: *Elementare Einheit des Zustandsgitters.*

Der gesamte enstehende "Cluster-Zustand" sieht damit wie in Abb. 3.8 gezeigt aus, und hat die Sätze $\{I\}$ von Eingangs- sowie $\{J\}$ von Ausgangsindizes, die jeweils die Vereinigung der entsprechenden Indizes der Elementarstrukturen sind. An den Grenzen der elementaren Einheiten im Inneren des Clusters ist über die Indizes gemäß den Regeln der Bildung von Vertexprodukt-Zuständen zu summieren.

Im letzten Schritt hat man die periodischen Randbedingungen zu implementieren. Dabei werden korrespondierende Indizes $i \in I$ und $j \in J$ verbunden und ebenfalls über alle gemeinsamen Pfeilkonfigurationen summiert. Man erhält schließlich den Zustand

$$|\Psi_G\rangle = \sum_{\{I\}} \Xi_{\{I\}}^{\{I\}} =: \mathrm{Spur}\ \Xi, \tag{3.2}$$

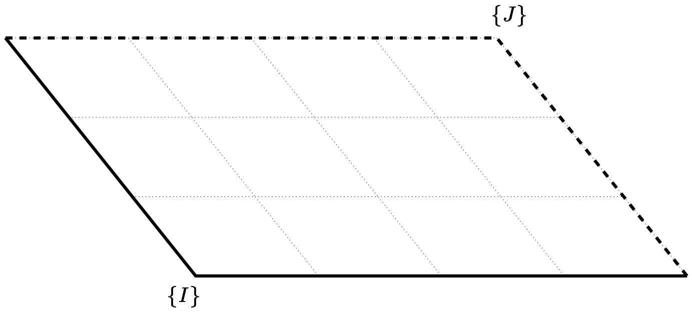
$\Xi_{\{I\}}^{\{J\}} \quad =$ 

Abbildung 3.8: *Der Cluster-Zustand für eine bestimmte Größe des Zustandsgitters.*

was äquivalent zur Spurbildung in zweidimensionalen Systemen ist. Der Mechanismus in Abb. 3.6 ergibt $T'_{\text{D}}T''_{\text{D}}T'''_{\text{D}} \left|\Psi_G\right\rangle = \left(\lambda_0^A\lambda_0^B\lambda_0^C\right)^{3N} \left|\Psi_G\right\rangle$, wenn N die Anzahl der vollständigen Sechsecke der Zustandsebene ist.

Sind λ_0^A, λ_0^B, und λ_0^C derart, daß $\left(\lambda_0^A\lambda_0^B\lambda_0^C\right)^{3N}$ der betraglich größte Eigenwert der DTM ist, ergibt sich für die freie Energie des Systems pro Gitterplatz im thermodynamischen Limes offenbar $f = -k_B T \frac{1}{3} \ln\left(\lambda_0^A\lambda_0^B\lambda_0^C\right)$, falls die üblichen Voraussetzungen aus Kap. 1.2 gelten. Geht man ferner davon aus, daß die betraglich größten Gewichte der Operatoren $\mathcal{R}^A$, $\mathcal{R}^B$ und $\mathcal{R}^C$ identisch sind, d.h. daß $\lambda_0^A = \lambda_0^B = \lambda_0^C = \lambda_0$ gilt, so vereinfacht sich die freie Energie pro Gitterplatz im thermodynamischen Limes zu $f = -k_B T \ln \lambda_0$.

Es geht neben der Physikalität des Modells wieder darum, den betraglich größten Eigenwert der DTM abzuschätzen. Für dreidimensionale Systeme ist T_{D} ein "zweidimensionaler Operator", wirkt also auf Zustände, die auf einer Ebene lokalisiert sind.

Für den Extremalitätsbeweis ist kein τ-Operator erforderlich, da hier mit ausschließlich chiralen Randbedingungen gearbeitet wird (vgl. Abb. 1.3). Wegen der Eigenschaft der Operatornorm,

$$||T_{\text{D}}|| \leq ||T'_{\text{D}}|| \cdot ||T''_{\text{D}}|| \cdot ||T'''_{\text{D}}||\,, \tag{3.3}$$

können für die Extremalität alle drei Teiloperatoren getrennt betrachtet werden.

Falls die drei $\mathcal{R}$-Operatoren hermitesch sind oder der orthogonale Fall vorliegt, kann der Beweis nun vollkommen analog geführt werden. Folglich liegen alle Eigenwerte von T_{D} betraglich unterhalb von $\left|\lambda_0^A\lambda_0^B\lambda_0^C\right|$, wenn der betraglich größte Eigenwert von $\alpha_A^\perp$, $\alpha_B^\perp$ bzw. $\alpha_C^\perp$ kleiner oder gleich $\left|\lambda_0^A\right|$, $\left|\lambda_0^B\right|$ bzw. $\left|\lambda_0^C\right|$ ist.

3.3 $(q=2)$–Systeme auf dem $(z=4)$–Gitter

Ein einfaches Beispiel dieser Art läßt sich sofort aus den über zweidimensionale Systeme erhaltenen Ergebnissen konstruieren. Für $n=1$ seien die drei verschiedenen Zustände definiert als

$$\begin{aligned} |Z^x\rangle &= |+\rangle + a\,|-\rangle\,, \\ |Z^y\rangle &= |+\rangle + b\,|-\rangle\,, \\ |Z^z\rangle &= |+\rangle + c\,|-\rangle\,. \end{aligned} \tag{3.4}$$

Ist $\mathcal{R}(a,b,\{\alpha,\alpha^\perp\})$ der $\mathcal{R}$-Operator des oben behandelten zweidimensionalen $(q=2)$–Modells auf dem Quadratgitter mit $n=1$, so hat man hier mit

$$\begin{aligned} \mathcal{R}^A &= \tfrac{\lambda_0^A}{\lambda_0}\mathcal{R}(a,b,\{\alpha^A,\alpha^{A,\perp}\}), \\ \mathcal{R}^B &= \tfrac{\lambda_0^B}{\lambda_0}\mathcal{R}(c,a,\{\alpha^B,\alpha^{B,\perp}\}), \\ \mathcal{R}^C &= \tfrac{\lambda_0^C}{\lambda_0}\mathcal{R}(b,c,\{\alpha^C,\alpha^{C,\perp}\}) \end{aligned} \tag{3.5}$$

bereits ein dreidimensionales parentales Vertexmodell, wobei die $\mathcal{R}$-Operatoren entweder hermitesch oder orthogonal gewählt werden können. Unter diesen Voraussetzungen sind folgende Fakten offensichtlich:

(a) $\Lambda_{\text{max}} = \left(\lambda_0^A\lambda_0^B\lambda_0^C\right)^{3N}$ ist der maximale Eigenwert von $T_{\text{D}} = T'_{\text{D}}T''_{\text{D}}T'''_{\text{D}}$,

(b) $|\Psi_G\rangle = \text{Spur}\ \Xi$ ist eindeutiger Grundzustand, d.h. Eigenzustand von T_{D} zum Eigenwert Λ_{max},

(c) der Betrag des Eigenwertes des ersten angeregten Zustands hat im thermodynamischen Limes eine Lücke zu Λ_{max}.

Alle dazu notwendigen Beweise können wegen der einfachen Tensorprodukt-Struktur genau wie im zweidimensionalen Fall geführt werden. Daraus erhält man das entscheidende Ergebnis $f = -k_BT\frac{1}{3}\ln\left(\lambda_0^A\lambda_0^B\lambda_0^C\right)$ für das unendlich große System.

Eine vollständige lokale Einheit der $T_{\text{D}}^{(\cdot)}$ besteht aus jeweils einem Operator vom Typ A, B bzw. C und wirkt auf eine elementare Struktur des Zustandsgitters, hier also ein Sechseck. Das gesamte dreidimensionale Gitter kann aus dieser lokalen Gruppe aufgebaut werden, man könnte also von einer Art Basis sprechen, oder das Tensorprodukt $\mathcal{R}^A\otimes\mathcal{R}^B\otimes\mathcal{R}^C$ als effektiven Vertex des Gitters betrachten. In diesem Bild handelt es sich also um ein 16^3-Vertexmodell mit z.B. 19 kontinuierlichen Parametern im hermiteschen Fall.

Ohne weitere Analyse ist klar, daß Korrelationsfunktionen in der Zustandsebene konstant sind und sämtlich Erwartungswerte mit denen des zweidimensionalen Modells übereinstimmen. Für die drei Untergitter müssen dabei die richtigen Parameter a, b, c verwendet werden.

Die $\mathcal{R}$-Operatoren aus Kap. 2.3 können ebenfalls in (3.5) verwendet werden, da die beiden Grundzustände $|\Psi_{G_1}\rangle$ und $|\Psi_{G_2}\rangle$ einfache Tensorprodukte sind. Weil auch hier keine Aussagen über Anregungslücken der DTM möglich sind, muß man sich wiederum auf eine geeignete Unterklasse beschränken. Das Modell ist genau dann forminvariant unter Rotationen, wenn die Diagonal-zu-Diagonal-Transfermatrizen bezüglich aller Raumdiagonalen formgleich sind.

Es muß nun untersucht werden, in welcher Weise sich das Gitter bei Drehungen verhält. Die Zustandsebene des gedrehten Modells steht nicht senkrecht auf der ursprünglichen, sondern schließt mit dieser den Tetraeder-Winkel ein. Eine 90°-Drehung um die z-Achse durch einen Vertex vom Typ A in positiver Richtung beispielsweise hat folgenden Effekt,

$$\left.\begin{array}{l} \mathcal{R}^A(\mu,\alpha\,|\,\beta,\nu) \\ \mathcal{R}^B(\mu,\alpha\,|\,\beta,\nu) \\ \mathcal{R}^C(\mu,\alpha\,|\,\beta,\nu) \end{array}\right\} \longrightarrow \left\{\begin{array}{l} \mathcal{R}^A(-\beta,\mu\,|\,\nu,-\alpha) \\ \mathcal{R}^C(\alpha,\mu\,|\,\nu,\beta) \\ \mathcal{R}^B(\alpha,-\nu\,|\,-\mu,\beta) \end{array}\right. , \tag{3.6}$$

und ergibt das Modell bezüglich der Raumdiagonalen $(-1,1,1)$. Drehungen, die auf die übrigen Raumdiagonalen führen, ergeben ähnliche Abbildungsvorschriften. Jede Drehung überführt einen Vertex-Typ in seine eigene gedrehte Form (im Beispiel A). Die beiden anderen Typen werden ausgetauscht, wobei der eine zusätzlich entgegengesetzt gedreht (im Beispiel C), der andere entlang einer Diagonalen gespiegelt wird. Bei Rotation auf drei übrigen Raumdiagonalen wird jeder Vertex-Typ einmal diagonal gespiegelt, nach links und nach rechts gedreht.

Damit das Modell bei Drehungen auf andere Raumdiagonalen forminvariant bleibt, müssen also $\mathcal{R}$-Operatoren $\widetilde{\mathcal{R}}^A$, $\widetilde{\mathcal{R}}^B$, $\widetilde{\mathcal{R}}^C$ mit entsprechenden neuen Sätzen von Parametern gefunden werden, die den Bedingungen

$$\begin{array}{rcl} \mathcal{R}^A(\mu,\alpha\,|\,\beta,\nu) & = & \widetilde{\mathcal{R}}^A(-\beta,\mu\,|\,\nu,-\alpha) \\ \mathcal{R}^B(\mu,\alpha\,|\,\beta,\nu) & = & \widetilde{\mathcal{R}}^C(\alpha,\mu\,|\,\nu,\beta) \\ \mathcal{R}^C(\mu,\alpha\,|\,\beta,\nu) & = & \widetilde{\mathcal{R}}^B(\alpha,-\nu\,|\,-\mu,\beta) \end{array} \tag{3.7}$$

genügen, und entsprechend für zwei andere Drehungen. Es seien $(\lambda_0^A,\lambda_1^A,\lambda_2^A)$, $(\lambda_0^B, \lambda_1^B,\lambda_2^B)$ bzw. $(\lambda_0^C,\lambda_1^C,\lambda_2^C)$ die λ-Parameter der drei Vertex-Typen A, B bzw. C. Gemäß der Betrachtungen des zweidimensionalen Modells erfordert die Forminvarianz unter Drehung auf drei unabhängige Raumdiagonalen

$$\begin{aligned} \lambda_1^A &= \lambda_0^A\,\Phi_1(a,b), & \lambda_2^A &= \lambda_0^A\,\Phi_2(a,b), \\ \lambda_1^B &= \lambda_0^B\,\Phi_1(c,a), & \lambda_2^B &= \lambda_0^B\,\Phi_2(c,a), \\ \lambda_1^C &= \lambda_0^C\,\Phi_1(b,c), & \lambda_2^C &= \lambda_0^C\,\Phi_2(b,c), \end{aligned} \tag{3.8}$$

wobei die Paare (a,b), (b,c) und (c,a) die Relationen $\Phi_1(x,y) = \Phi_1(y,x)$ sowie $\Phi_2(x,y) = \Phi_2(y,x)$ erfüllen müssen, falls $x \neq 1$ und $y \neq 1$. Die Wertepaare, die die Gleichheit der beiden Φ-Funktionen unter Vertauschung der Argumente sichern, sind gerade die Nullstellen des Polynoms

$$p(x,y) = x^6 + y^6 - 4x^5y - 4xy^5 + 7x^4y^2 + 7x^2y^4 - 8x^3y^3 + 4x^2y^2. \tag{3.9}$$

Gültige Parameter a, b, c sind damit reell positive Lösungen von

$$p(a,b) = p(b,c) = p(c,a) = 0. \tag{3.10}$$

Durch die drei Gleichungen werden jeweils zweidimensionale Untermannigfaltigkeiten des durch a, b, c aufgespannten Parameterraumes definiert. Lösungen von (3.10) sind also genau die Schnittpunkte dieser drei Untermannigfaltigkeiten.

Für $a = b = c = 1$ gelten nach Definition der Φ_i die Beziehungen $\lambda_2^A = -\lambda_1^A$, $\lambda_2^B = -\lambda_1^B$, $\lambda_2^C = -\lambda_1^C$.

3.4 $(q=4)$–Systeme auf dem $(z=4)$–Gitter

Die Ein-Spin-Zustände für das hexagonale Zustandsgitter seien durch die in Abb. 3.9 dargestellten Zuordnungen gegeben, wobei $n = 2$ gewählt wurde. Die Zuordnungen sind im wesentlichen identisch mit den in [8] gewählten.

Dabei sollen $|\overline{3}\rangle$, $|\overline{1}\rangle$, $|1\rangle$, $|3\rangle$ die Zustände zu den klassischen Spin-Werten $-3/2$, $-1/2$, $1/2$ und $3/2$ darstellen. Die Zuordnungen genügen bis auf die Vorfaktoren offenbar der Regel *Spin = Anzahl der auslaufenden Pfeile* – $\frac{3}{2}$, was dazu führt, daß die entstehenden Zwei-Spinzustände, auf die die $\mathcal{R}$-Matrizen wirken, invariante Unterräume zum Spin-Umkehr-Operator auf dem Paar-Spin-Raum bilden [7, 8]. Dies entspricht genau wie im zweidimensionalen Fall der S_z-Erhaltung in Quantensystemen. Aus diesem Grunde kann natürlich im folgenden auf die Markierung des ersten Beines der Vertizes verzichtet werden. Auch das Kriterium für die $\mathcal{R}$-Matrizen (vgl. Abb. 3.5) wird dadurch vereinfacht.

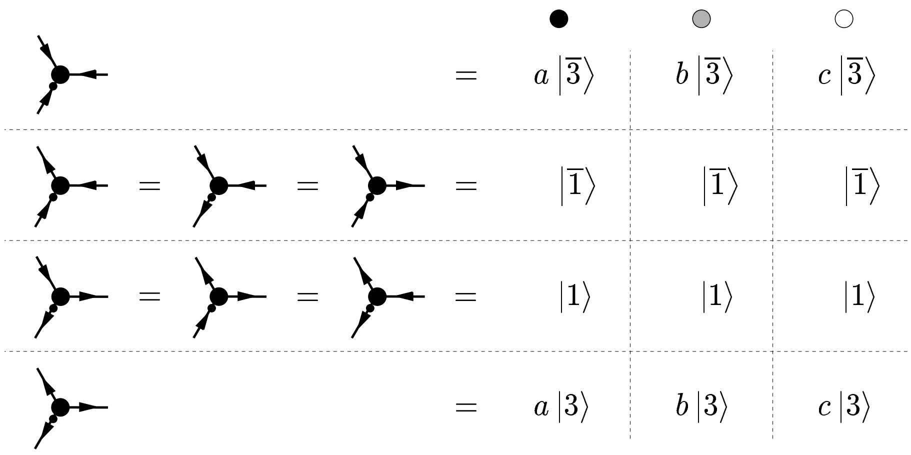


Abbildung 3.9: *Zuordnung der Vertizes.*

Die drei $\mathcal{R}$-Matrizen des parentalen Vertexmodells, die durch diese Zustände definiert werden, sind alle formgleich, nämlich

$$\begin{aligned}
\mathcal{R}^A &= \lambda_0^A\, \mathcal{R}(a, b, \{\alpha^A, \alpha^{A,\perp}\}), \\
\mathcal{R}^B &= \lambda_0^B\, \mathcal{R}(c, a, \{\alpha^B, \alpha^{B,\perp}\}), \\
\mathcal{R}^C &= \lambda_0^C\, \mathcal{R}(b, c, \{\alpha^C, \alpha^{C,\perp}\}).
\end{aligned} \tag{3.11}$$

Der maximale Eigenwert von $\mathcal{R}$ ist damit gleich eins. Folglich genügt die Untersuchung eines einzelnen Modelles, etwa die Konstruktion von $\mathcal{R}^A$.

Konkret soll hier wiederum nur die hermitesche Unterklasse betrachtet werden, d.h. insbesondere $a = b = c$ und folglich $Z^x = Z^y = Z^z$. Im Gegensatz zu Kap. 2.4 sind die aus zwei Vertexzuständen gebildeten 16 Paar-Spin-Zustände nicht alle linear unabhängig, sondern spannen einen nur neundimensionalen Raum auf. Es liegen jedoch keine komplizierten Abhängigkeiten vor, die Zustände sind entweder linear unabhängig oder identisch, was eine direkte Folge der topologischen Eigenschaften der Vertex-Zustände ist. Gemäß der früheren Notation sind

$$\begin{aligned}
|v_1\rangle &= |w_1\rangle = a\left|\overline{1}\,\overline{3}\right\rangle + a\left|\overline{3}\,\overline{1}\right\rangle, \\
|v_2\rangle &= |w_2\rangle = a\,|1\,3\rangle + a\,|3\,1\rangle, \\
|v_3\rangle &= |w_3\rangle = a\left|1\,\overline{3}\right\rangle + \left|\overline{1}\,\overline{1}\right\rangle, \\
|v_4\rangle &= |w_4\rangle = a\left|\overline{1}\,3\right\rangle + |1\,1\rangle, \\
|v_5\rangle &= |w_5\rangle = a^2\left|3\,\overline{3}\right\rangle + \left|1\,\overline{1}\right\rangle, \\
|v_6\rangle &= |w_6\rangle = a^2\left|\overline{3}\,3\right\rangle + \left|\overline{1}\,1\right\rangle, \\
|v_7\rangle &= |w_7\rangle = \left|\overline{1}\,\overline{1}\right\rangle + a\left|\overline{3}\,1\right\rangle, \\
|v_8\rangle &= |w_8\rangle = |1\,1\rangle + a\left|3\,\overline{1}\right\rangle, \\
|v_9\rangle &= |w_9\rangle = \left|1\,\overline{1}\right\rangle + \left|\overline{1}\,1\right\rangle,
\end{aligned} \tag{3.12}$$

und eine Orthonormalbasis von $V^\perp$ ist gegeben durch

$$\begin{aligned}
\left|v_1^\perp\right\rangle &= \tfrac{1}{\sqrt{2}}\left(\left|\overline{1}\,\overline{3}\right\rangle - \left|\overline{3}\,\overline{1}\right\rangle\right), \\
\left|v_2^\perp\right\rangle &= \tfrac{1}{\sqrt{2}}\left(|1\,3\rangle - |3\,1\rangle\right), \\
\left|v_3^\perp\right\rangle &= \tfrac{1}{\sqrt{2+a^2}}\left(a\,|1\,1\rangle - \left|\overline{1}\,3\right\rangle - \left|3\,\overline{1}\right\rangle\right), \\
\left|v_4^\perp\right\rangle &= \tfrac{1}{\sqrt{2+a^2}}\left(a\left|\overline{1}\,\overline{1}\right\rangle - \left|1\,\overline{3}\right\rangle - \left|\overline{3}\,1\right\rangle\right), \\
\left|v_5^\perp\right\rangle &= \tfrac{1}{\sqrt{2+2a^4}}\left(a^2\left|\overline{1}\,1\right\rangle - a^2\left|1\,\overline{1}\right\rangle + \left|3\,\overline{3}\right\rangle - \left|\overline{3}\,3\right\rangle\right), \\
\left|v_6^\perp\right\rangle &= \left|\overline{3}\,\overline{3}\right\rangle, \\
\left|v_7^\perp\right\rangle &= |3\,3\rangle.
\end{aligned} \tag{3.13}$$

Eine Orthonormalbasis von V wird im hermiteschen Fall wegen $\alpha = 0$ nicht benötigt.

Das parentale Vertexmodells wird vollkommen identisch wie die zweidimensionalen konstruiert. Wegen $|v_i\rangle = |w_i\rangle$ ist einfach $\mathcal{P}_V = \sum_i \frac{1}{\langle v_i|v_i\rangle}|v_i\rangle\langle v_i|$. Auch hier erhält man für die spezielle Wahl $A = 0$ kein physikalisches Modell, da nicht alle Matrixelemente von $\mathcal{P}_V$ in der kanonischen Zwei-Spin-Basis größer oder gleich null sind.

Untersucht man die Bedingung, daß alle Vertexgewichte größer oder gleich null sein müssen, erhält man unter Einbeziehung der Hermitizität folgenden Parametersatz:

$$\alpha^\perp = \begin{pmatrix} 2\lambda_1-1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2\lambda_2-1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \lambda_3 & \lambda_5 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \lambda_5 & \lambda_4 \end{pmatrix} \tag{3.14}$$

mit den Nebenbedingungen

$$0 \le \lambda_i \le 1. \tag{3.15}$$

Die entsprechenden Vertexgewichte sind im Anhang D verzeichnet. Dort werden auch mögliche Symmetrien des Modells untersucht. Die Eigenwerte der $\alpha^{\perp}$-Matrix sind also

$$1, 1, 1, 2\lambda_1 - 1, 2\lambda_2 - 1, \frac{\lambda_3 + \lambda_4}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\lambda_3 - \lambda_4}{2}\right)^2 + \lambda_5^2} \tag{3.16}$$

und sind betraglich kleiner als eins zu halten, woraus insgesamt $\Lambda_{\text{max}} = \left(\lambda_0^A \lambda_0^B \lambda_0^C\right)^{3N}$ folgt.

Die lokale Grundzustandsentartung ist für das hermitesche Modell nicht mehr neunfach, sondern es existieren 12 lokale Grundzustände. Zudem sind die Vertexgewichte unabhängig vom Zustandsparameter a. Die komplette Schar der Zustände $|\Psi_G(a)\rangle$ bildet damit einen Unterraum der Grundzustände. Die Eigenschaften des Zustandes $|\Psi_G(a)\rangle$ wurden in [8] untersucht. Demnach befindet man sich für $a < a_c$ ($a_c^2 \approx 6.46$) in einer ungeordneten Phase mit exponentiell abfallenden Korrelationen, im Falle $a > a_c$ hat man es mit einer Néel-artigen Ordnung zu tun, bei der Korrelationen algebraisch abfallen. Da alle Zustände das gleiche Gewicht, aber grundlegend verschiedene Eigenschaften haben, sind die Vertexprodukt-Zustände daher für weitere Untersuchungen der Eigenschaften dieses Vertexmodells nicht geeignet.

Die freie Energie kann dennoch berechnet werden. Die Vertexgewichte erlauben offensichtlich einfache Konfigurationen auf dem Gitter, die auf das Gewicht eins führen. Zum Beispiel können wegen $\mathcal{R}\,(1,1\,|\,1,1) = 1$ alle Ein-Spin-Zustände gleich $|1\rangle$ gewählt werden (vgl. Abb. 3.10).

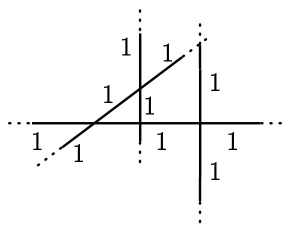


Abbildung 3.10: *Spin-Konfiguration mit Gewicht* $\left(\lambda_0^A \lambda_0^B \lambda_0^C\right)^{MN}$ *(N=Anzahl der vollständigen Sechsecke der Zustandsebene, M=Anzahl der Diagonalebenen). M ist als Vielfaches von drei zu wählen.*

Folglich gilt $Z \geq \left(\lambda_0^A \lambda_0^B \lambda_0^C\right)^{MN}$, und die Abschätzung der Zustandssumme (Kap. 1.2) gelingt mit $h \equiv 1$. Als zentrales Ergebnis erhält man $f = -k_B T \frac{1}{3} \ln\left(\lambda_0^A \lambda_0^B \lambda_0^C\right)$ im thermodynamischen Limes.

3.5 Systeme auf dem einfach kubischen Gitter

Das oben besprochene ($z = 4$)–Gitter hat mehrere Vorteile, die es zu einem geeigneten Objekt für das Studium dreidimensionaler Vertexmodelle werden lassen. Da vier eine relativ kleine Koordinationszahl in drei Dimensionen darstellt, ist auch das Zustandsgitter für die DTM in diesem Sinne einfach. Wie oben gesehen, erhält man nämlich eine hexagonale Struktur, die mit drei nächsten Nachbarn dieser Anforderung genügt, da dies die minimale Anzahl von nächsten Nachbarn in zwei Dimensionen ist. Das zu untersuchende lokale Kriterium beschränkt sich auf nur zwei Gitterplätze.

Höhere Koordinationszahlen des dreidimensionalen Gitters führen aber unweigerlich auch zu komplizierteren Gittern, auf denen die Eigenzustände der DTM angesiedelt sind, so daß man hier lokale Kriterien vorfindet, die mehr als zwei Gitterplätze einbeziehen.

Es soll nun das einfach kubische Gitter untersucht werden. Der Zustandsraum der DTM wird analog zum Minimal-Gitter dadurch konstruiert, daß man den Schnitt der Bonds mit einer Ebene, deren Normale eine Raumdiagonale ist, bildet. Als Ergebnis dieser Konstruktion erhält man ein Kagomé-Gitter mit der Koordinationszahl vier. Folglich lassen sich Eigenzustände der DTM durch Vertex-Zustände mit vier Beinen konstruieren. Im allgemeinsten Fall wählt man für jede Raumrichtung des dreidimensionalen Ausgangsgitters einen Typ eines Ein-Spin-Zustandes, so daß auch hier drei verschiedene Vertex-Zustände genügen, die gemäß Abb. 3.11 auf dem Kagomé-Gitter zu plazieren sind.

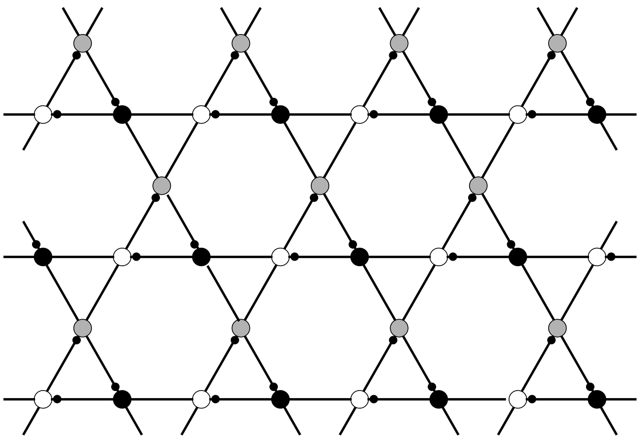


Abbildung 3.11: *Zustandsgitter der DTM des einfach kubischen Gitters.*

Der Punkt markiere wieder das mit eins benannte Bein des Vertex-Zustandes, die restlichen Beine seien zyklisch, im mathematisch positiven Sinne durchnumeriert.

Den graphischen Symbolen sind die Zustände Z^x, Z^y und Z^z mit Ausnahme der Anzahl der Indizes in gleicher Weise wie oben zugeordnet.

Die Vertizes eines dreidimensionalen, kubischen Gitter haben sechs Beine und die Boltzmanngewichte seien durch diese folgendermaßen repräsentiert.

$\mathcal{R}\,(\mu,\sigma,\alpha\,|\beta,\kappa,\nu) \quad \longleftrightarrow$

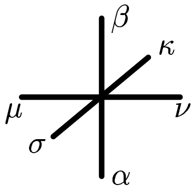


Abbildung 3.12: *Vertex des einfach kubischen Gitters.*

Die $\mathcal{R}$-Matrix soll wie in Abb. 3.13 dargestellt auf dem Zustandsgitter operieren. Per definitionem wirke das μ-Bein auf den Zustand Z^x und entsprechend σ auf Z^y

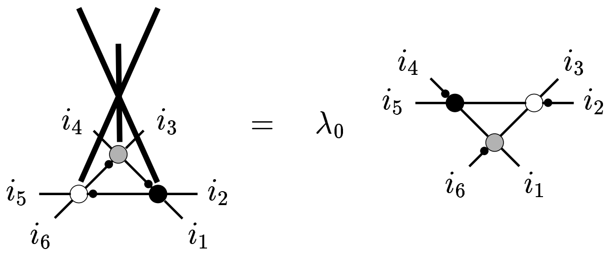


Abbildung 3.13: *Bedingung für die $\mathcal{R}$-Matrix.*

sowie α auf Z^z. Dieses Kriterium für $\mathcal{R}$ liefert gerade wieder einen Eigenzustand der DTM zum Eigenwert λ_0^N, wenn $3N$ die Anzahl der Gitterpunkte des Zustandsgitters ist. Der zugehörige Eigenzustand wird analog zum $(z = 4)$-Gitter als Spur über den Cluster-Zustand konstruiert. Sofern λ_0^N maximaler Eigenwert ist und die in Kap. 1.2 gegebenen Voraussetzungen erfüllt sind, gilt $f = -k_B T \ln \lambda_0$ im thermodynamischen Limes. Formal kann das lokale Kriterium als

$$\begin{aligned} \mathcal{R} \quad & \left(\sum_{\rho,\sigma,\tau=1}^{n} \left| Z^x_{\rho,\sigma,i_1,i_2} \right\rangle \otimes \left| Z^y_{\tau,n-\rho+1,i_3,i_4} \right\rangle \otimes \left| Z^z_{n-\sigma+1,n-\tau+1,i_5,i_6} \right\rangle \right) \\ & = \lambda_0 \left(\sum_{\rho,\sigma,\tau=1}^{n} \left| Z^z_{i_2,i_3,\rho,\sigma} \right\rangle \otimes \left| Z^y_{i_6,i_1,\tau,n-\rho+1} \right\rangle \otimes \left| Z^x_{i_4,i_5,n-\sigma+1,n-\tau+1} \right\rangle \right) \end{aligned} \tag{3.17}$$

geschrieben werden. Die zugrunde liegenden Drei-Spin-Zustände tragen die sechs externen Indizes i_1 bis i_6. Die Änderung der Topologie der Graphen für die Drei-Spin-Zustände bei Anwendung des lokalen $\mathcal{R}$-Operators erinnert dabei an die Yang-Baxter-Gleichung (siehe z.B. [2]). Für den Extremalitätsbeweis wird hier ein neuer Operator τ benötigt, der die in Abb. 3.14 dargestellte Eigenschaft haben muß.

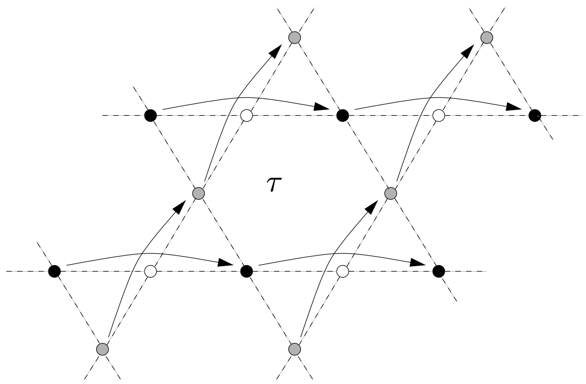


Abbildung 3.14: *Wirkung des τ-Operator für das einfach kubische Gitter in drei Dimensionen auf die Ausgangsindizes der DTM, falls diese in z-Richtung wirkt.*

3.5.1 $(q = 2)$–Systeme auf dem einfach kubischen Gitter

Da die Vertizes des Gitters sechs Beine besitzen, führt $q = 2$ auf eine Unterklasse des 64-Vertex-Modells. Die einfachst mögliche Wahl der Zustände ist auch hier wieder der Fall $n = 1$ mit

$$\begin{aligned} |Z^x\rangle &= |+\rangle + a\,|-\rangle\,, \\ |Z^y\rangle &= |+\rangle + b\,|-\rangle\,, \\ |Z^z\rangle &= |+\rangle + c\,|-\rangle\,. \end{aligned} \tag{3.18}$$

Anders als zuvor wirkt die $\mathcal{R}$-Matrix nun jedoch auf Drei-Spin-Zustände. Der Operator $\mathcal{P}_V$ ergibt sich als $\mathcal{P}_V = \frac{1}{\langle v|v\rangle}\,|w\rangle\langle v|$ und hat die explizite Form

$$\mathcal{P}_V = \gamma^2 \begin{pmatrix} ac & c \\ a & 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} b^2 & b \\ b & 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} ac & a \\ c & 1 \end{pmatrix} \tag{3.19}$$

wobei $\gamma = \sqrt{(1+a^2)(1+b^2)(1+c^2)}^{\,-1}$, $a, b, c > 0$ ist. Da $\mathcal{P}_V$ folglich nur positive Einträge hat, bekommt man offensichtlich ein 64-Vertex-Modell, das hier nicht explizit aufgeführt wird.

Die hermitesche Unterklasse besitzt 29 kontinuierliche Parameter. Davon stammen 28 aus der symmetrischen 7×7-Matrix $\alpha^{\perp}$, die so zu wählen sind, daß der betraglich größte Eigenwert $\alpha^{\perp}$ kleiner oder gleich λ_0 ist. Der letzte Parameter ist der Zustandsparameter $a = b = c$. Wählt man die λ-Parameter so, daß alle Eigenwerte von $\alpha^{\perp}$ echt kleiner als λ_0 sind, ist $|\Psi_G\rangle = \text{Spur}\ \Xi$ nach dem Satz von PERRON eindeutig. Ferner beweist man wie früher die Existenz einer Anregungslücke, die im thermodynamischen Limes bestehen bleibt. Die freie Energie pro Gitterplatz ist damit $f = -k_B T \ln \lambda_0$.

Der orthogonale Fall kann ebenfalls realisiert werden, insbesondere ist also die Wahl von verschiedenen a, b, c möglich. Ein Abzählen der Freiheitsgrade anhand der Orthogonalitätsrelationen führt hier auf 31 kontinuierliche Parameter.

Im Hinblick auf Symmetrien des Modells kann untersucht werden, wie sich Vertexgewichte unter Rotationen verhalten. Die Vorschrift bei 90°-Drehung um die z-Achse in positiver Richtung beispielsweise lautet

$$\mathcal{R}\,(\mu, \sigma, \alpha \,|\, \beta, \kappa, \nu) \quad \longrightarrow \quad \mathcal{R}\,(-\kappa, \mu, \alpha \,|\, \beta, \nu, -\sigma)\,. \tag{3.20}$$

Bei jeder möglichen Drehung um eine der kanonischen Achsen bleibt ein Indexpaar unberührt, nämlich dasjenige entlang der Drehachse. Die übrigen Indizes werden entsprechend einer Rotation in der Ebene, zu der die Drehachse Normale ist, modifiziert. Sowohl im hermiteschen als auch im orthogonalen Fall lassen sich komplizierte Untermannigfaltigkeiten des Parameterraumes finden, auf denen das Vertexmodell homogen ist. Ebenfalls realisierbar ist die feldfreie Situation.

Kapitel 4

Schlußbetrachtungen

4.1 Zusammenfassung

In dieser Arbeit wurden exakte Ergebnisse für klassische Gittermodelle durch einen Zugang auf der Basis von Transfermatrizen erzielt. Das vorgestellte Verfahren zur Konstruktion exakt lösbarer Vertexmodelle beruht auf der Eigenschaft der Diagonal-zu-Diagonal-Transfermatrix (DTM), in ein Produkt aus lokalen Operatoren zu zerfallen. Die eigentliche Struktur des Gitters, d.h. die Verbindung der Vertizes wird tatsächlich erst im Produkt der Diagonal-zu-Diagonal-Transfermatrizen, das für die Berechnung thermodynamischer Größen erforderlich ist, sichtbar. Konkret besteht das Verfahren aus den Schritten:

(a) Vorgabe von Ein-Spin-Zustands-Matrizen m, $\overline{m}$,

(b) Konstruktion des allgemeinsten lokalen $\mathcal{R}$-Operators mit der Eigenschaft

$$\mathcal{R}\big[m\,\overline{m}\big] = \lambda_0\,\overline{m}\,m \quad (\lambda_0 > 0)\,,$$

was auf einen globalen Eigenzustand

$$|\Psi_G\rangle = \mathrm{Spur}\,(m\,\overline{m})^N$$

der DTM zum Eigenwert ${\lambda_0}^N$ führt.

(c) Überprüfung der Physikalität des Modells, d.h. Positivität der Vertexgewichte $\mathcal{R}\,(\mu,\alpha\,|\,\beta,\nu) \geq 0$,

(d) Überprüfung der Extremalität des Eigenwertes $\Lambda_{\max} = \lambda_0^N$ der DTM,

(e) Beweis der Existenz einer Anregungslücke, einer unteren Schranke der Zustandssumme oder Versuch der Realisierung einer 90°-Symmetrie als Voraussetzung für die Gültigkeit von

$$-\frac{f}{k_B T} = \lim_{N \to \infty} \frac{\ln \Lambda_{\max}}{N} = \ln \lambda_0$$

im thermodynamischen Limes.

(f) Eventuelle Bestimmung des Entartungsgrades von $|\Psi_G\rangle$ und Berechnung von thermodynamischen Erwartungswerten.

Es wurde zunächst für verschiedene zwei- und dreidimensionale Systeme das Zustandsgitter für die DTM konstruiert und das entsprechende lokale Kriterium aufgestellt. Folgende Modelle wurden konkret betrachtet und zum Teil genauer untersucht.

Zwei Dimensionen:

- Zwei-Zustands-Vertexmodell auf dem Quadratgitter ohne und mit Entartung des Grundzustandes:
  Alle an $\mathcal{R}$ gestellten Anforderungen können gleichzeitig erfüllt werden, so daß das Konzept hier brauchbare Ergebnisse liefert. Neben der freien Energie können thermodynamische Erwartungswerte berechnet werden. Es sind Aussagen über das Acht-Vertex-Modell möglich, die mit bekannten Resultaten übereinstimmen.

- Drei-Zustands-Vertexmodell auf dem Quadratgitter mit 2×2-Matrix-Zuständen:
  Es wurde hier ein neues Modell gefunden und gelöst. Das System enthält eine lösbare Linie des 19-Vertex-Modells. Die hier verwendeten, in Spin-1 Quantensytemen erfolgreich eingesetzten Matrixzustände, erweisen sich für die Anwendung bei klassischen Systemen als schwieriger handhabbar. Das Modell besitzt keinen eindeutigen Grundzustand, und die Matrixzustände können lediglich zur Angabe einer unteren Schranke für den Entartungsgrad benutzt werden.

Drei Dimensionen:

- Zwei-Zustands-Vertexmodell auf dem $(z = 4)$–Gitter mit trivialen Vertex-Zuständen:
  Es wurden Modelle konstruiert und gelöst. Neben der freien Energie konnten hier auch thermodynamische Erwartungswerte berechnet werden.

- Vier-Zustands-Vertexmodell auf dem $(z = 4)$–Gitter mit $2 \times 2 \times 2$-Vertex-Zuständen:

Hier wurde ein Vertexmodell gefunden und gelöst. Der Grundzustand ist nicht eindeutig, so daß Eigenschaften des Modells nicht von den Vertexzuständen abgeleitet werden können.

- Zwei-Zustands-Vertexmodell auf dem einfach kubischen Gitter mit trivialen Vertex-Zuständen:
  Das 64-Vertex-Modell kann auf einer Untermannigfaltigkeit des Parameterraumes gelöst und thermodynamische Erwartungswerte können berechnet werden.

Obwohl das für die Konstruktion parentaler Vertexmodelle benutze lokale Kriterium Abb. 2.1 in dieser Arbeit mit dem Auffinden von Unordnungslinien motiviert wurde, ist dieser Ansatz sehr verwandt mit dem Konzept optimaler Grundzustände bei Quantensystemen [6, 7]. Dort wird ausgehend von Matrixzuständen ein Hamiltonoperator durch die Forderung konstruiert, daß in diesem Zustand lokal schon minimale Energien vorliegen und sich alle anderen lokalen Anregungen über diesem Minimum befinden. Grundsätzlich führt aber jeder Matrix-Zustand auf ein quantenmechanisches Modell und lediglich die Bestimmung des Entartungsgrades des Grundzustandes kann Probleme bereiten. Die "Kunst" besteht vor allem darin, solche Zustände zu finden, die physikalisch interessante Modelle liefern.

In dieser Arbeit wurde deutlich, daß die Situation für klassische Systeme wesentlich komplexer ist. Aufgrund der Struktur der DTM kann zwar ebenfalls ein lokales Kriterium benutzt werden, lokal liegen aber keine echten Eigenwertprobleme vor. Zusätzlich ist im Gegensatz zum quantenmechanischen Fall zu fordern, daß die Boltzmanngewichte reell und positiv sind. Diese Anforderung konkurriert mit der für die Abschätzbarkeit der Eigenwerte von T_{D} notwendigen Bedingung, daß $\mathcal{R}$ hermitesch ist oder der orthogonale Fall vorliegt, und genau die Einträge des Matrixprodukt-Zustandes Eigenzustände zum maximalen lokalen Eigenwert sein müssen.

Ein weiteres Problem kommt für Ergebnisse im thermodynamischen Limes hinzu. Die Konstruktion schließt asymptotische Entartung des maximalen Eigenwertes nicht aus, so daß die Gültigkeit des übliche Zusammenhangs zwischen freier Energie und maximalem Eigenwert nicht trivial ist. Eine Antwort auf diese Frage konnte mithilfe der unter (e) genannten Punkte gefunden werden.

Die Entartung des Grundzustandes spielt bei den klassischen Systemen im Hinblick auf die Berechnung der freien Energie nur eine untergeordnete Rolle. Da die Dimension des Zustandsraumes, auf den die Transfermatrix wirkt, um eins niedriger als die des Konfigurationsraumes ist, führt selbst exponentiell hohe Entartung des Grundzustandes nicht auf Beiträge zur freien Energie durch Restentropie.

Die mit der vorgestellten Methode konstruierten Modelle zeigen keine Phasenübergänge. Dies ist eine direkte Folge davon, daß die freie Energie eine analytische Funktion der Parameter des Modells ist. An den Rändern der Parametermannigfaltigkeiten kann nichtanalytisches Verhalten vorliegen, was aber, durch das Konstruktionsprinzip bedingt, verborgen bleibt.

Zusammenfassend kann daher festgestellt werden, daß die Anwendungsmöglichkeiten von Matrixprodukt-Zuständen für klassische Spin-Systeme bzw. Vertexmodelle eher als beschränkt eingeschätzt werden müssen.

4.2 Offene Fragen und Ausblicke

Beim ($q = 3$)-Modell auf dem zweidimensionalen Quadratgitter konnte für den interessanteren Fall $\lambda_1 \neq 0$ der maximale Eigenwert der DTM nicht berechnet werden. Daher sind insbesondere keine Aussagen über die freie Energie möglich. Exakte Berechnungen der Eigenwerte scheitern für $N > 2$ aufgrund der zur Verfügung stehenden Rechenkapazität. Zur weiteren Analyse bieten sich hier numerische Methoden an.

Mithilfe von Monte-Carlo-Simulationen ist es möglich, die Zustände mit dem höchstem thermodynamischen Gewicht zu analysieren und Korrelationslängen zu ermitteln. Damit können diese eingesetzt werden, um eventuell vorliegendes kritisches Verhalten auf den Rändern der Parametermannigfaltigkeiten zu untersuchen.

Von besonderem Interesse sind auch zu den Vertexmodellen korrespondierende Quantensysteme. Für die zweidimensionalen Systeme sind dies Quantenketten, für die dreidimensionalen klassischen Modelle erhielte man zweidimensionale Quantensysteme. Es ist allerdings zu erwarten, daß die Hamiltonoperatoren im allgemeinen langreichweitige Wechselwirkungen enthalten.

Wie weiter oben bereits festgestellt erweist sich das lokale Kriterium als mit bei der Lösung stochastischer Modelle verwendeten Methoden verwandt. Genauer entspricht die Wirkung der DTM exakt dem Untergitter-Parallelen-Update, während die Reihen-Transfermatrix den geordnet sequentiellen Update beschreibt [9–12]. Bei der Behandlung stochastischer Modelle spielt die Gleichung (2.102) eine zentrale Rolle, die vollkommen äquivalent zu dem für die Vertexmodelle verwendeten Kriterium ist. Es sind lediglich andere Bedingungen an $\mathcal{R}$ zu stellen: Die Forderung nach Extremalität des Eigenwertes wird durch $\sum_{\beta,\nu} \mathcal{R}\,(\mu, \alpha \,|\, \beta, \nu) = 1$ ersetzt, was der Wahrscheinlichkeitserhaltung entspricht. Wie auch im Falle der Vertexmodelle ist nicht die Konstruktion des allgemeinsten lokalen Operators bei vorgegebenen Variationszuständen, sondern das Erfüllen der zusätzlichen Bedingungen problematisch.

Bis heute sind keine exakten Ergebnisse für zweidimensionale stochastische Modelle bekannt. Eventuell lassen sich mit dem Konstruktionsprinzip für dreidimensionale Vertexmodelle, wie in dieser Arbeit vorgeführt, solche ausgehend von Vertexprodukt-Zuständen finden und damit exakte Aussagen über physikalische Größen wie Dichten und Ströme machen.

Anhang A

$q = 2$ auf dem $2D$-Quadratgitter $(n = 1)$

Die 16 Vertexgewichte des parentalen Vertexmodells bei der allgemeinsten Darstellung im Fall $n = 1$ lauten unter Verwendung der Abkürzungen

$$\beta = \sqrt{1+b^2}^{-1}, \quad \gamma = \sqrt{(1+a^2)(1+b^2)}^{-1}$$

wie folgt:

$$\begin{aligned}
\mathcal{R}(-,-\,|\,-,-) &= \beta\gamma ab\lambda_1 - \gamma^2 ab^2\lambda_3 + \beta^2\lambda_4 - \beta\gamma b\lambda_6 \\
&\qquad - \beta\gamma b\lambda_{10} + \gamma^2 b^2\lambda_{12} + \gamma^2 a^2 b^2\lambda_0 \\
\mathcal{R}(-,+\,|\,-,-) &= -\beta\gamma ab^2\lambda_1 - \gamma^2 ab\lambda_3 - \beta^2 b\lambda_4 - \beta\gamma\lambda_6 \\
&\qquad + \beta\gamma b^2\lambda_{10} + \gamma^2 b\lambda_{12} + \gamma^2 a^2 b\lambda_0 \\
\mathcal{R}(+,-\,|\,-,-) &= \beta\gamma ab\lambda_2 + \gamma^2 a^2 b^2\lambda_3 + \beta^2\lambda_5 + \beta\gamma ab\lambda_6 \\
&\qquad - \beta\gamma b\lambda_{11} - \gamma^2 ab^2\lambda_{12} + \gamma^2 ab^2\lambda_0 \\
\mathcal{R}(+,+\,|\,-,-) &= -\beta\gamma ab^2\lambda_2 + \gamma^2 a^2 b\lambda_3 - \beta^2 b\lambda_5 + \beta\gamma a\lambda_6 \\
&\qquad + \beta\gamma b^2\lambda_{11} - \gamma^2 ab\lambda_{12} + \gamma^2 ab\lambda_0 \\
\mathcal{R}(-,-\,|\,-,+) &= -\beta\gamma a\lambda_1 - \gamma^2 ab\lambda_3 - \beta^2 b\lambda_4 + \beta\gamma b^2\lambda_6 \\
&\qquad - \beta\gamma\lambda_{10} + \gamma^2 b\lambda_{12} + \gamma^2 ab^2\lambda_0 \\
\mathcal{R}(-,+\,|\,-,+) &= -\beta\gamma ab\lambda_1 - \gamma^2 ab\lambda_3 + \beta^2 b^2\lambda_4 + \beta\gamma b\lambda_6 \\
&\qquad + \beta\gamma b\lambda_{10} + \gamma^2\lambda_{12} + \gamma^2 ab\lambda_0 \\
\mathcal{R}(+,-\,|\,-,+) &= \beta\gamma a\lambda_2 + \gamma^2 a^2 b\lambda_3 - \beta^2 b\lambda_5 - \beta\gamma ab^2\lambda_6 \\
&\qquad - \beta\gamma\lambda_{11} - \gamma^2 ab\lambda_{12} + \gamma^2 b^2\lambda_0 \\
\mathcal{R}(+,+\,|\,-,+) &= -\beta\gamma ab\lambda_2 + \gamma^2 a^2\lambda_3 + \beta^2 b^2\lambda_5 - \beta\gamma ab\lambda_6 \\
&\qquad + \beta\gamma b\lambda_{11} - \gamma^2 a\lambda_{12} + \gamma^2 b\lambda_0
\end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
\mathcal{R}\,(-,-\,|\,+,-) &= \beta\gamma b\lambda_1 + \gamma^2 b^2\lambda_3 + \beta^2\lambda_7 - \beta\gamma b\lambda_9 \\
&\qquad + \beta\gamma ab\lambda_{10} - \gamma^2 ab^2\lambda_{12} + \gamma^2 a^2 b\lambda_0 \\
\mathcal{R}\,(-,+\,|\,+,-) &= -\beta\gamma b^2\lambda_1 - \gamma^2 b\lambda_3 - \beta^2 b\lambda_7 - \beta\gamma\lambda_9 \\
&\qquad - \beta\gamma ab^2\lambda_{10} - \gamma^2 ab\lambda_{12} + \gamma^2 a^2\lambda_0 \\
\mathcal{R}\,(+,-\,|\,+,-) &= \beta\gamma b\lambda_2 + \gamma^2 ab^2\lambda_3 + \beta^2\lambda_8 + \beta\gamma ab\lambda_9 \\
&\qquad + \beta\gamma ab\lambda_{11} + \gamma^2 a^2 b^2\lambda_{12} + \gamma^2 ab\lambda_0 \\
\mathcal{R}\,(+,+\,|\,+,-) &= \beta\gamma b^2\lambda_2 + \gamma^2 ab\lambda_3 - \beta^2 b\lambda_8 + \beta\gamma a\lambda_9 \\
&\qquad - \beta\gamma ab^2\lambda_{11} + \gamma^2 a^2 b\lambda_{12} + \gamma^2 a\lambda_0 \\
\mathcal{R}\,(-,-\,|\,+,+) &= \beta\gamma\lambda_1 - \gamma^2 b\lambda_3 - \beta^2 b\lambda_7 + \beta\gamma b^2\lambda_9 \\
&\qquad + \beta\gamma a\lambda_{10} - \gamma^2 ab\lambda_{12} + \gamma^2 ab\lambda_0 \\
\mathcal{R}\,(-,+\,|\,+,+) &= -\beta\gamma b\lambda_1 - \gamma^2\lambda_3 + \beta^2 b^2\lambda_7 + \beta\gamma b\lambda_9 \\
&\qquad - \beta\gamma ab\lambda_{10} - \gamma^2 a\lambda_{12} + \gamma^2 a\lambda_0 \\
\mathcal{R}\,(+,-\,|\,+,+) &= \beta\gamma\lambda_2 + \gamma^2 ab\lambda_3 - \beta^2 b\lambda_8 - \beta\gamma ab^2\lambda_9 \\
&\qquad + \beta\gamma a\lambda_{11} + \gamma^2 a^2 b\lambda_{12} + \gamma^2 b\lambda_0 \\
\mathcal{R}\,(+,+\,|\,+,+) &= -\beta\gamma b\lambda_2 + \gamma^2 a\lambda_3 + \beta^2 b^2\lambda_8 - \beta\gamma ab\lambda_9 \\
&\qquad - \beta\gamma ab\lambda_{11} + \gamma^2 a^2\lambda_{12} + \gamma^2\lambda_0
\end{aligned}
$$

Anhang B

$q = 2$ auf dem $2D$-Quadratgitter mit zweifacher Entartung

Mit den Abkürzungen

$$\beta = \sqrt{a^2 + b^2}^{-1}, \quad \gamma = \sqrt{1 + a^2 b^2}^{-1}$$

erhält man die Vertexgewichte

$$\begin{aligned}
\mathcal{R}\,(-,-\,|\,-,-) &= \gamma^2\,(a^2 b^2 \lambda_0 + \lambda_2) \\
\mathcal{R}\,(+,+\,|\,+,+) &= \gamma^2\,(\lambda_0 + a^2 b^2 \lambda_2) \\
\mathcal{R}\,(+,+\,|\,-,-) &= \gamma^2 ab\,(\lambda_0 - \lambda_2) \\
\mathcal{R}\,(-,-\,|\,+,+) &= \gamma^2 ab\,(\lambda_0 - \lambda_2) \\
\mathcal{R}\,(-,+\,|\,-,+) &= \beta^2 ab \lambda_0 + \big(\beta^2 b^2 + \tfrac{1}{2}\beta(a^2 - b^2)\big)\,\lambda_1 \\
\mathcal{R}\,(+,-\,|\,+,-) &= \beta^2 ab \lambda_0 + \big(\beta^2 a^2 - \tfrac{1}{2}\beta(a^2 - b^2)\big)\,\lambda_1 \\
\mathcal{R}\,(+,-\,|\,-,+) &= \beta^2 b^2 \lambda_0 - \big(\beta^2 ab + \tfrac{1}{2}\tfrac{a}{b}\beta(a^2 - b^2)\big)\,\lambda_1 \\
\mathcal{R}\,(-,+\,|\,+,-) &= \beta^2 a^2 \lambda_0 - \big(\beta^2 ab - \tfrac{1}{2}\tfrac{b}{a}\beta(a^2 - b^2)\big)\,\lambda_1
\end{aligned}$$

Anhang C

$q = 3$ auf dem $2D$-Quadratgitter

C.1 Vertexgewichte und Parameterbereiche

Mit den Abkürzungen

$$\beta = \sqrt{a^2 + b^2}^{-1}, \quad \gamma = \sqrt{2 + a^2 b^2}^{-1} \tag{C.1}$$

lauten die Vertexgewichte

$$\begin{aligned}
\mathcal{R}\,(-,-\,|\,-,-\,) &= \lambda_{20} \\
\mathcal{R}\,(+,+\,|\,-,-\,) &= \lambda_{21} \\
\mathcal{R}\,(-,-\,|\,-,\,0\,) &= \beta\,(a\lambda_2 + b\lambda_3) \\
\mathcal{R}\,(\,0,-\,|\,-,\,0\,) &= \beta^2\,(b^2\lambda_0 - ab\lambda_{19} + a^2\lambda_{18}) \\
\mathcal{R}\,(-,\,0\,|\,-,\,0\,) &= \beta^2\,(ab\lambda_0 + b^2\lambda_{19} - ab\lambda_{18}) \\
\mathcal{R}\,(+,+\,|\,-,\,0\,) &= \beta\,(a\lambda_6 + b\lambda_7) \\
\mathcal{R}\,(-,-\,|\,-,+\,) &= \tfrac{1}{\sqrt{2}}\,(\gamma ab\lambda_{12} + \lambda_{10}) + \gamma\lambda_{11} \\
\mathcal{R}\,(-,+\,|\,-,+\,) &= \lambda_0 \\
\mathcal{R}\,(+,+\,|\,-,+\,) &= \tfrac{1}{\sqrt{2}}\,(\gamma ab\lambda_{15} - \lambda_{13}) + \gamma\lambda_{14} \\
\mathcal{R}\,(-,-\,|\,0,-\,) &= \beta\,(b\lambda_2 - a\lambda_3) \\
\mathcal{R}\,(\,0,-\,|\,0,-\,) &= \beta^2\,(ab\lambda_0 + a^2\lambda_{19} + ab\lambda_{18}) \\
\mathcal{R}\,(-,\,0\,|\,0,-\,) &= \beta^2\,(a^2\lambda_0 - ab\lambda_{19} - b^2\lambda_{18}) \\
\mathcal{R}\,(+,+\,|\,0,-\,) &= \beta\,(b\lambda_6 - a\lambda_7) \\
\mathcal{R}\,(-,-\,|\,0,\,0\,) &= \gamma\left(\sqrt{2}\lambda_{12} - ab\lambda_{11}\right) \\
\mathcal{R}\,(-,+\,|\,0,\,0\,) &= \tfrac{1}{\sqrt{2}}\lambda_1 \\
\mathcal{R}\,(\,0,\,0\,|\,0,\,0\,) &= \lambda_0 - \tfrac{1}{\sqrt{2}}ab\lambda_1
\end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
\mathcal{R}\,(+,-\mid 0,\,0\,) &= \tfrac{1}{\sqrt{2}}\lambda_1 \\
\mathcal{R}\,(+,+\mid 0,\,0\,) &= \gamma\left(\sqrt{2}\lambda_{15} - ab\lambda_{14}\right) \\
\mathcal{R}\,(-,-\mid 0,+) &= \beta\,(b\lambda_8 - a\lambda_9) \\
\mathcal{R}\,(+,\,0\mid 0,+) &= \beta^2\,(a^2\lambda_0 - ab\lambda_{17} - b^2\lambda_{16}) \\
\mathcal{R}\,(\,0,+\mid 0,+) &= \beta^2\,(ab\lambda_0 + a^2\lambda_{17} + ab\lambda_{16}) \\
\mathcal{R}\,(+,+\mid 0,+) &= \beta\,(b\lambda_4 - a\lambda_5) \\
\mathcal{R}\,(-,-\mid +,-) &= \tfrac{1}{\sqrt{2}}\,(\gamma ab\lambda_{12} - \lambda_{10}) + \gamma\lambda_{11} \\
\mathcal{R}\,(+,-\mid +,-) &= \lambda_0 \\
\mathcal{R}\,(+,+\mid +,-) &= \tfrac{1}{\sqrt{2}}\,(\gamma ab\lambda_{15} + \lambda_{13}) + \gamma\lambda_{14} \\
\mathcal{R}\,(-,-\mid +,\,0\,) &= \beta\,(a\lambda_8 + b\lambda_9) \\
\mathcal{R}\,(+,\,0\mid +,\,0\,) &= \beta^2\,(ab\lambda_0 + b^2\lambda_{17} - ab\lambda_{16}) \\
\mathcal{R}\,(\,0,+\mid +,\,0\,) &= \beta^2\,(b^2\lambda_0 - ab\lambda_{17} + a^2\lambda_{16}) \\
\mathcal{R}\,(+,+\mid +,\,0\,) &= \beta\,(a\lambda_4 + b\lambda_5) \\
\mathcal{R}\,(-,-\mid +,+) &= \lambda_{22} \\
\mathcal{R}\,(+,+\mid +,+) &= \lambda_{23}
\end{aligned}
$$

Es handelt sich also um ein 31-Vertexmodell. Folgende Relationen sind für die Positivität der Gewichte zu erfüllen.

$$
\begin{array}{rcccl}
0 & \leq & \lambda_1 & \leq & \frac{\sqrt{2}}{ab}\lambda_0 \\
-\frac{a}{b}\lambda_2 & \leq & \lambda_3 & \leq & \frac{b}{a}\lambda_2, \quad \lambda_2 \geq 0 \\
-\frac{a}{b}\lambda_4 & \leq & \lambda_5 & \leq & \frac{b}{a}\lambda_4, \quad \lambda_4 \geq 0 \\
-\frac{a}{b}\lambda_6 & \leq & \lambda_7 & \leq & \frac{b}{a}\lambda_6, \quad \lambda_6 \geq 0 \\
-\frac{a}{b}\lambda_8 & \leq & \lambda_9 & \leq & \frac{b}{a}\lambda_8, \quad \lambda_8 \geq 0 \\
\gamma\sqrt{2}\,|\lambda_{10}| & \leq & \lambda_{11} & \leq & \frac{\sqrt{2}}{ab}\lambda_{12} \\
\gamma\sqrt{2}\,|\lambda_{13}| & \leq & \lambda_{14} & \leq & \frac{\sqrt{2}}{ab}\lambda_{15} \\
\max\left(-\frac{b^2}{a^2}\lambda_0 + \frac{b}{a}\lambda_{17}, -\lambda_0 - \frac{a}{b}\lambda_{17}\right) & \leq & \lambda_{16} & \leq & \min\left(\frac{a^2}{b^2}\lambda_0 - \frac{a}{b}\lambda_{17}, \lambda_0 + \frac{b}{a}\lambda_{17}\right) \\
\max\left(-\frac{b^2}{a^2}\lambda_0 + \frac{b}{a}\lambda_{19}, -\lambda_0 - \frac{a}{b}\lambda_{19}\right) & \leq & \lambda_{18} & \leq & \min\left(\frac{a^2}{b^2}\lambda_0 - \frac{a}{b}\lambda_{19}, \lambda_0 + \frac{b}{a}\lambda_{19}\right) \\
0 & \leq & \lambda_{20} & & \\
0 & \leq & \lambda_{21} & & \\
0 & \leq & \lambda_{22} & & \\
0 & \leq & \lambda_{23} & &
\end{array}
$$

Hier existieren offensichtlich für alle Parameter nichtleere Intervalle.

C.2 Hermitesche Unterklasse des Modells

Aussagen über $\Lambda_{\max}$ gelingen in hermiteschen Fall.

$$
\begin{aligned}
\mathcal{R}\,(-,-\,|\,-,-) &= \lambda_{20} \\
\mathcal{R}\,(+,+\,|\,+,+) &= \lambda_{23} \\
\mathcal{R}\,(+,+\,|\,-,-) &= \mathcal{R}\,(-,-\,|\,+,+) = \lambda_{21} \\
\mathcal{R}\,(+,-\,|\,+,-) &= \mathcal{R}\,(-,+\,|\,-,+) = \lambda_{0} \\
\mathcal{R}\,(\,0,-\,|\,-,\,0\,) &= \mathcal{R}\,(-,\,0\,|\,0,-) = \tfrac{1}{2}\,(\lambda_0 - \lambda_{19}) \\
\mathcal{R}\,(\,0,+\,|\,+,\,0\,) &= \mathcal{R}\,(+,\,0\,|\,0,+) = \tfrac{1}{2}\,(\lambda_0 - \lambda_{17}) \\
\mathcal{R}\,(-,\,0\,|\,-,\,0\,) &= \mathcal{R}\,(\,0,-\,|\,0,-) = \tfrac{1}{2}\,(\lambda_0 + \lambda_{19}) \\
\mathcal{R}\,(+,\,0\,|\,+,\,0\,) &= \mathcal{R}\,(\,0,+\,|\,0,+) = \tfrac{1}{2}\,(\lambda_0 + \lambda_{17}) \\
\mathcal{R}\,(\,0,\,0\,|\,0,\,0\,) &= \lambda_0
\end{aligned}
$$

Es verbleiben 15 Vertizes mit 6 Parametern.

C.3 Feldfreie Unterklasse des Modells

Durch die einschränkende Wahl

$$
\begin{array}{rclcrcl}
\lambda_4 &=& \lambda_2 & \qquad & \lambda_{13} &=& \lambda_{10} \\
\lambda_5 &=& \lambda_3 & & \lambda_{14} &=& \lambda_{11} \\
\lambda_8 &=& \lambda_6 & & \lambda_{15} &=& \lambda_{12} \\
\lambda_9 &=& \lambda_7 & & \lambda_{18} &=& \lambda_{16} \\
\lambda_{22} &=& \lambda_{21} & & \lambda_{19} &=& \lambda_{17} \\
\lambda_{23} &=& \lambda_{20} & & & &
\end{array}
$$

wird der feldfreie Fall realisiert. Es verbleiben 16 verschiedene Vertexgewichte mit 14 Parametern.

Anhang D

$q = 4$ auf dem $(z = 4)$–Gitter

D.1 Vertexgewichte

Die Vertexgewichte lauten

$$
\begin{aligned}
\mathcal{R}\left(\overline{3},\overline{3}\,\middle|\,\overline{3},\overline{3}\right) &= \lambda_3 \\
\mathcal{R}\left(3,3\,|\,3,3\right) &= \lambda_4 \\
\mathcal{R}\left(3,3\,\middle|\,\overline{3},\overline{3}\right) &= \mathcal{R}\left(\overline{3},\overline{3}\,|\,3,3\right) = \lambda_5 \\
\mathcal{R}\left(\overline{3},\overline{1}\,\middle|\,\overline{3},\overline{1}\right) &= \lambda_1 \\
\mathcal{R}\left(3,1\,|\,3,1\right) &= \lambda_2 \\
\mathcal{R}\left(\overline{1},\overline{3}\,\middle|\,\overline{3},\overline{1}\right) &= 1-\lambda_1 \\
\mathcal{R}\left(1,3\,|\,3,1\right) &= 1-\lambda_2 \\
\mathcal{R}\left(\overline{3},1\,\middle|\,\overline{3},1\right) &= \mathcal{R}\left(3,\overline{1}\,\middle|\,3,\overline{1}\right) = 1 \\
\mathcal{R}\left(\overline{3},3\,\middle|\,\overline{3},3\right) &= \mathcal{R}\left(3,\overline{3}\,\middle|\,3,\overline{3}\right) = 1 \\
\mathcal{R}\left(\overline{1},1\,\middle|\,\overline{1},1\right) &= \mathcal{R}\left(1,\overline{1}\,\middle|\,1,\overline{1}\right) = 1 \\
\mathcal{R}\left(\overline{1},3\,\middle|\,\overline{1},3\right) &= \mathcal{R}\left(1,\overline{3}\,\middle|\,1,\overline{3}\right) = 1, \\
\mathcal{R}\left(\overline{3},\overline{1}\,\middle|\,\overline{1},\overline{3}\right) &= 1-\lambda_1 \\
\mathcal{R}\left(3,1\,|\,1,3\right) &= 1-\lambda_2 \\
\mathcal{R}\left(\overline{1},\overline{3}\,\middle|\,\overline{1},\overline{3}\right) &= \lambda_1 \\
\mathcal{R}\left(1,3\,|\,1,3\right) &= \lambda_2 \\
\mathcal{R}\left(\overline{1},\overline{1}\,\middle|\,\overline{1},\overline{1}\right) &= \mathcal{R}\left(1,1\,|\,1,1\right) = 1
\end{aligned}
$$

wobei

$$0 \leq \lambda_i \leq 1$$

zu wählen sind. Das Modell besitzt 22 von null verschiedene Gewichte, die durch fünf kontinuierliche Parameter bestimmt sind.

D.2 Symmetrien des Modells

Feldfreier Fall:

Durch die einschränkende Wahl

$$\lambda_1 = \lambda_2, \quad \lambda_3 = \lambda_4$$

wird der feldfreie Fall realisiert. Es verbleiben drei Parameter.

Eis-Regel:

Sollen nur solche Vertexgewichte von Null verschieden sein, deren Indizes die Relation

$$\mu + \alpha = \beta + \nu$$

erfüllen, so ist

$$\lambda_5 = 0$$

zu setzen.

90°-Symmetrie:

Ein formgleiches, gedrehtes Modell existiert für keine Wahl der λ-Parameter.

Literaturverzeichnis

[1] R.J. Baxter, *Exactly Solved Models in Statistical Mechanics*, Academic Press (1982)

[2] L.A. Takhtajan, *Introduction to algebraic Bethe ansatz*, Lecture Notes in Physics **242**, Springer Verlag (1985)

[3] M. Suzuki, *Transfer-matrix Method and Monte Carlo simulations in quantum spin systems*, Phys. Rev. **B 31**, 2957 (1985)

[4] P. Ruján, *Order and Disorder Lines in Systems with Competing Interactions*, J. Stat. Phys. **29**, 231+247 (1982)

[5] M.T. Batchelor and J.M.J. van Leeuwen, *Disorder Solutions of Lattice Spin Models*, Physica **A 154**, 365 (1982)

[6] A. Klümper, A. Schadschneider and J. Zittartz, *Matrix Product Ground States for One-Dimensional Spin-1 Quantum Antiferromagnets*, Europhys. Lett. **24** (4), 293 (1993)

[7] H. Niggemann, *Optimale Grundzustände von Quanten-Antiferromagneten in ein und zwei Dimensionen*, Diplomarbeit 1995, Universität zu Köln

[8] H. Niggemann, A. Klümper and J. Zittartz, *Quantum phase transition in spin-$\frac{3}{2}$ systems on the hexagonal lattice - optimum ground state approach*, preprint cond-mat/9702178 (1997)

[9] N. Rajewsky, A. Schadschneider and M. Schreckenberg, *The asymmetric exclusion model with sequential update*, J. Phys. A: Math. Gen **29** (1996) L305-L309

[10] N. Rajewsky, *Exact Results on One-Dimensional Stochastic Processes*, Dissertation 1996, Universität zu Köln

[11] A. Honecker and I. Peschel, *Matrix-Product States for a One-Dimensional Lattice Gas with Parallel Dynamics*, preprint cond-mat/9606053 (1996)

[12] F.H.L. Essler and V. Rittenberg, *Representations of the Quadratic Algebra and Partially Asymmetric Diffusion with Open Boundaries*, J. Phys. **A 29**, 3375 (1996)

[13] A. Klümper, S. Matveenko and J. Zittartz, *Exact solution of new integrable nineteen-vertex models and quantum spin-1 chains*, Z.Phys. **B 96** (1995) 401

[14] M. Idzumi, T. Tokihiro and M. Arai, *Solvable nineteen-vertex models and quantum spin chains of spin one*, J.Phys. **I 4** (1994) 1151

[15] F.R. Gantmacher, *Matrizenrechnung II*, VEB Deutscher Verlag der Wissenschaften, Berlin 1966

[16] H.-J. Kowalsky, *Lineare Algebra*, De Gruyter, Berlin 1970

Danksagung

Zunächst möchte ich mich ganz herzlich bei Prof. Dr. J. Zittartz bedanken, der mir die Durchführung dieser Diplomarbeit ermöglicht hat.

Mein Dank gilt ebenfalls besonders Herrn Priv.–Doz. Dr. A. Klümper für die hervorragende fachliche Betreuung.

Außerdem bedanke ich mich bei Herrn Dr. A. Schadschneider und Herrn Dipl. Phys. H. Niggemann, die immer für klärende Gespräche zur Verfügung standen.

Weiterhin möchte ich meine Zimmerkollegen, insbesondere Herrn Dr. N. Rajewsky, nicht unerwähnt lassen, die mir vor allem durch das freundliches Klima und Hilfsbereitschaft die Arbeit in schwierigen Phasen erleichtert haben.

Natürlich sollen auch meine Kommilitonen C. Ronnewinkel und P. Stahl gewürdigt werden, die sich tatkräftig am Korrekturlesen beteiligt haben.

Schließlich gilt mein besonderer Dank auch meinen Eltern, meiner Schwester Anke und meinem Opi, die mir stets seelischen Beistand geleistet haben.

Hiermit erkläre ich, daß ich meine Diplomarbeit selbständig angefertigt und keine anderen als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel benutzt sowie Zitate kenntlich gemacht habe.

50937 Köln, den

....

Unterschrift