

**Ein neuer Zugang zum Sine-Gordon-Modell
und
Korrelationsfunktionen der massiven XXZ-Kette**

Dissertation

zur Erlangung des Grades eines
Doktors der Naturwissenschaften
des Fachbereichs C - Mathematik und Naturwissenschaften
(Fachgruppe Physik)
der Bergischen Universität Wuppertal

vorgelegt von

Christian Trippe

März 2010

Diese Dissertation kann wie folgt zitiert werden:

urn:nbn:de:hbz:468-20100266

[<http://nbn-resolving.de/urn/resolver.pl?urn=urn%3Anbn%3Ade%3Ahbz%3A468-20100266>]

Inhaltsverzeichnis

1. Einleitung	1
2. Grundlagen	7
2.1. Yang-Baxter-Algebra und Yang-Baxter-Gleichung	7
2.2. Transfermatrix	8
2.2.1. Algebraischer Betheansatz	9
2.3. Quantentransfermatrix	11
I. Ein neuer Zugang zum Sine-Gordon-Modell	15
3. Das Sine-Gordon-Modell als Kontinuumslimit des 6-Vertex-Modells	17
3.1. Dispersionsrelationen auf dem Gitter und im Kontinuum	20
4. Nichtlineare Integralgleichungen für das Sine-Gordon-Modell	27
4.1. Thermodynamik	27
4.2. Endliche Länge im Kontinuum	31
5. Korrelationsfunktionen des Sine-Gordon-Modells	33
5.1. Herleitung der Vielfachintegraldarstellung	35
5.2. Korrelationsfunktionen am Punkt freier Fermionen	38
II. Korrelationsfunktionen der massiven XXZ-Kette	43
6. Hamiltonoperator und Zugang zu den Korrelationsfunktionen	45
6.1. Hamiltonoperator und Dichtematrix	45
6.2. Integralgleichungen für die massive XXZ-Kette	47
7. Thermodynamisches Verhalten der Korrelationsfunktionen	53
8. Grenzfälle der massiven XXZ-Kette	59
8.1. Paramagnet	59
8.2. Ising-Kette	60
8.3. Tripelpunkt der XXZ-Kette	62
8.4. Grenzfall $T=0$ in der Umgebung des Tripelpunktes	68
8.5. Tieftemperaturverhalten in der Umgebung des Tripelpunktes	70
9. Zusammenfassung	75

Anhang	77
A. Technische Details zu den Integralgleichungen des Sine-Gordon-Modells	79
A.1. Nichtlineare Integralgleichungen für die Thermodynamik aus dem 6-Vertex-Modell	79
A.2. Nichtlineare Integralgleichungen als Grenzfall der XYZ-Kette	83
B. Herleitung der Integralgleichungen für die massive XXZ-Kette	89
C. Technische Details zu den Grenzfällen der massiven XXZ-Kette	97
C.1. Ising-Kette	97
C.2. Störungsrechnung für den Hamiltonoperator der XXZ-Kette	98
C.3. Skalenlimes und $T=0$ -Grenzfall für große Anisotropie	99
Literaturverzeichnis	103

Abbildungsverzeichnis

2.1.	Graphische Beschreibung der R -Matrix	8
2.2.	Graphische Darstellung der Transfermatrix $t(\lambda)$	9
2.3.	Graphische Darstellung der Transfermatrix $\bar{t}(\lambda)$	11
2.4.	Graphische Darstellung des approximierten statistischen Operators $\rho_{N,L}$ und Definition der Quantentransfermatrix	13
3.1.	Zum Sine-Gordon-Modell gehörendes gestaggertes Gitter	19
3.2.	Dispersionsrelation für <i>bare excitations</i> auf dem Gitter in Gittervariablen	22
3.3.	Dispersionsrelation für <i>bare excitations</i> auf dem Gitter in Kontinuumsvariablen	23
3.4.	Dispersionsrelation für <i>dressed excitations</i> auf dem Gitter in Gittervariablen	25
3.5.	Dispersionsrelation für <i>dressed excitations</i> auf dem Gitter in Kontinuumsvariablen	25
4.1.	Die spezifische Wärme für das Sine-Gordon-Modell für $m = 1$ und verschiedene Kopplungen	30
5.1.	Die kanonische Kontur \mathcal{C} für das kritische 6-Vertex-Modell mit $0 < \gamma < \pi/2$	35
5.2.	Die kanonische Kontur im Fall freier Fermionen	40
7.1.	Phasendiagramm des Grundzustands der XXZ-Kette	53
7.2.	$\langle \sigma_1^z \sigma_n^z \rangle - \langle \sigma_1^z \rangle \langle \sigma_n^z \rangle$ und $\langle \sigma_1^x \sigma_n^x \rangle - \langle \sigma_1^x \rangle \langle \sigma_n^x \rangle$ für unterschiedliche Werte der Temperatur T/J bei fester Anisotropie $\Delta = 2$ für $n = 2, 3, 4$	54
7.3.	$\langle \sigma_1^z \sigma_4^z \rangle - \langle \sigma_1^z \rangle \langle \sigma_4^z \rangle$ für verschiedene tiefe Temperaturen T/J und feste Anisotropie $\Delta = 2$. Die Magnetfelder liegen in der Nähe der kritischen Felder.	55
7.4.	$\langle \sigma_1^z \sigma_n^z \rangle - \langle \sigma_1^z \rangle \langle \sigma_n^z \rangle$ und $\langle \sigma_1^x \sigma_n^x \rangle - \langle \sigma_1^x \rangle \langle \sigma_n^x \rangle$ für unterschiedliche Werte des Magnetfeldes h/J bei fester Anisotropie $\Delta = 2$ für $n = 2, 3, 4$	56
7.5.	$\langle \sigma_1^z \sigma_4^z \rangle - \langle \sigma_1^z \rangle \langle \sigma_4^z \rangle$ für verschiedene Magnetfelder h/J als Funktion der Temperatur bzw. der Anisotropie Δ	57
8.1.	Die Zweipunktfunktion $\langle \sigma_1^z \sigma_3^z \rangle - \langle \sigma_1^z \rangle \langle \sigma_3^z \rangle$ für große Werte der Anisotropie, festes J und verschiedene Magnetfelder h/J	62
8.2.	Phasendiagramm des Grundzustands der XXZ-Kette in der $h-1/\Delta$ -Ebene für festes J und große Anisotropie Δ	63
8.3.	Einpunktfunktion $\langle \sigma^z \rangle$ der XXZ-Kette in der Nähe des Tripelpunktes für $T \rightarrow 0$ ($T = 0.0001$)	66
8.4.	Einpunktfunktion $\langle \sigma^z \rangle$ der XXZ-Kette für $T \rightarrow 0$ ($T = 0.0001$). Die Linien zeigen $\langle \sigma^z \rangle = 0.05, 0.1, \dots, 0.8$	66
8.5.	Die Einpunktfunktion $\langle \sigma^z \rangle$ für große Anisotropien, festes J und verschiedene Magnetfelder h/J	67

8.6.	Die verbundenen Korrelationsfunktionen für zwei und drei Nachbarplätze in Abhängigkeit von der Temperatur für verschiedene Magnetfelder bei $\Delta = 1000$ und die asymptotischen Werte für $T = 0$	70
8.7.	Die asymptotischen Werte der Korrelationsfunktionen aus Gleichung (8.27) als Funktion des reskalierten magnetischen Feldes α . Zusätzlich ist der normalisierte Fermipunkt c als Funktion von α zu sehen.	71
8.8.	Die longitudinalen Korrelationsfunktionen für kurze Abstände auf dem Gitter als Funktion der Temperatur für verschiedene Anisotropien und $\alpha = 0.5$	72
8.9.	Die longitudinalen Korrelationsfunktionen für kurze Abstände auf dem Gitter als Funktion der Temperatur für verschiedene Anisotropien und $\alpha = -1.5$	73
B.1.	Die kanonische Kontur \mathcal{C} für die massive XXZ-Kette, d.h. $\Delta = \text{ch}(\eta) > 1$	91

1. Einleitung

Für die Beschreibung der Natur ist es notwendig, Systeme mit vielen wechselwirkenden Teilchen zu betrachten. Das bekannteste Beispiel hierfür ist ein Festkörper, der sich in mikroskopischer Beschreibung als ein Gitter mit Ionen an den Vertices und auf den Verbindungen sitzenden oder frei beweglichen Elektronen verstehen lässt. Die Schwierigkeit der Behandlung eines solchen Systems mit vielen wechselwirkenden Teilchen besteht darin, dass selbst für den Fall eines endlichen Einteilchen-Hilbertraumes die Dimension des Hilbertraumes des N -Teilchen-Problems exponentiell mit der Anzahl der Teilchen N wächst. Zur Beschreibung der Thermodynamik ist es notwendig, die Spur des statistischen Operators zu berechnen. Dies erfordert im Allgemeinen die Kenntnis aller Eigenwerte eines quantenmechanischen Systems. Daher werden hierfür normalerweise Näherungsverfahren benötigt, in denen das Vielteilchenproblem durch ein effektives Einteilchenproblem beschrieben wird. Dies kann beispielsweise, wie in der Molekularfeldtheorie, durch eine Mittlung von Nachbarwechselwirkungen erfolgen. Komplexere Systeme können ausgehend von einem Einteilchenmodell störungstheoretisch behandelt werden. Dieses Vorgehen versagt aber, sobald kollektive Phänomene auftreten. Dies ist zum Beispiel bei Phasenübergängen, wie beispielsweise dem Metall-Isolator-Übergang, der Fall. Es gibt aber Modelle, die eine exakte Lösung erlauben und somit unter anderem das Studium von Phasenübergängen ermöglichen. Solche Modelle werden als integrabel bezeichnet. Die Theorie exakt lösbarer Modelle versucht sich an der Behandlung solcher Systeme und damit an dem Verständnis der zugrunde liegenden Physik wechselwirkender Vielteilchensysteme.

Für die klassische Mechanik gibt es eine Definition von Integrabilität mittels Liouvilles Theorem. Dies ist für die Quantenmechanik nicht der Fall, dennoch gibt es auch dort integrable Modelle. Das historisch erste Beispiel ist die isotrope Spin-1/2 Heisenbergkette, für die Bethe 1931 in der Lage war, das komplette Spektrum zu bestimmen [9]. Mit seiner Methode, heutzutage Koordinatenbetheansatz genannt, konnte er zeigen, dass sich jeder Eigenwert des Hamiltonoperators einer Kette der Länge L durch $M \leq L/2$ komplexe Zahlen, die sogenannten Betheansatzzahlen, beschreiben lässt. Diese Betheansatzzahlen werden durch ein System von M gekoppelten algebraischen Gleichungen bestimmt. Diese Methode, so sie auch entgegen Bethes Plänen bis heute auf eindimensionale quantenmechanische Systeme beschränkt ist, bildet die Grundlage für das Gebiet integrierbarer quantenmechanischer Modelle. Glücklicherweise gibt es aber durchaus experimentelle Realisierungen solcher eindimensionaler Systeme. Ein neueres Beispiel hierfür ist das Polymer $[\text{Cu}(\mu - \text{C}_2\text{O}_4)(4 - \text{aminopyridine})_2(\text{H}_2\text{O})]_n$, das eine sehr gute Näherung der antiferromagnetischen isotropen Heisenbergkette darstellt [73]. In solchen dreidimensionalen Kristallen gibt es eindimensionale Unterstrukturen, d.h. die Wechselwirkung innerhalb einer solchen Kette ist deutlich stärker als die Wechselwirkung zwischen benachbarten Ketten. Die eindimensionale Substruktur bestimmt dann das Verhalten des dreidimensionalen Festkörpers.

Die nächste Anwendung fand der Bethe-Ansatz beim Bose-Gas mit einer Delta-Funktions-Wechselwirkung durch Lieb und Liniger [69]. Außerdem erweiterte Lieb den Betheansatz auf zweidimensionale klassische Modelle der statistischen Mechanik [65–68], genauer gesagt auf Spezialfälle des 6-Vertex-Modells. Die allgemeine Lösung für das 6-Vertex-Modell wurde kurz darauf von Sutherland gefunden [82]. Eine weitere Verallgemeinerung des Betheansatzes, der sogenannte verschachtelte

Betheansatz, fand durch Gaudin [36] und Yang [100] statt, die diesen auf Systeme mit inneren Freiheitsgraden anwendeten.

Eine wichtige Erkenntnis war die Tatsache, dass die Integrabilität quantenmechanischer Modelle darauf beruht, dass die Streumatrix des Vielteilchenproblems in Produkte der Streumatrizen zweier Teilchen faktorisiert. Damit dies möglich ist, muss die Streumatrix des Zweiteilchenproblems eine Selbstkonsistenzgleichung erfüllen, die Yang-Baxter-Gleichung. Diese Gleichung wird auch von den Boltzmannengewichten der exakt löslichen zweidimensionalen klassischen Modelle erfüllt. Dies hat zur Konsequenz, dass die logarithmische Ableitung der zugehörigen Transfermatrix für einen bestimmten Spektralparameter den Hamiltonoperator eines integrierbaren eindimensionalen quantenmechanischen Modells erzeugt. Beispiele finden sich in den Lehrbüchern [6, 63, 88]. Außerdem konnte Baxter zeigen, dass die von Onsager [72] für die Lösung des zweidimensionalen Ising-Modells verwendete Stern-Dreiecks-Relation äquivalent zur Yang-Baxter-Gleichung ist.

Die Identifizierung der Yang-Baxter-Gleichung als Grundlage der Integrabilität führte zur Entwicklung des algebraischen Betheansatzes. Zu diesem findet sich ein Review in [63]. Dieser verwendet, ausgehend von einer Lösung der Yang-Baxter-Gleichung, der sogenannten R -Matrix, rein algebraische Techniken zur Konstruktion der Eigenwerte und Eigenzustände der Transfermatrix und damit des Hamiltonoperators des zugehörigen quantenmechanischen Systems.

Die erste Beschreibung der Thermodynamik eines integrierbaren Modells erfolgte durch Yang und Yang für das Bose-Gas mit Delta-Funktions-Wechselwirkung [102, 103]. Diese Methode, heutzutage als thermodynamischer Betheansatz (TBA) bezeichnet, wurde von Gaudin [37] und Takahashi [87, 91] auf die (anisotrope) Heisenbergkette übertragen. Der thermodynamische Betheansatz verwendet die Beobachtung, dass die Betheansatzzahlen Strings in der komplexen Ebene bilden. Diese, als Stringhypothese bezeichnete Tatsache, erlaubt die Klassifikation aller Anregungen und damit aller Eigenwerte. Im thermodynamischen Limes lässt sich die freie Energie dann mit Hilfe von im Allgemeinen unendlich vielen gekoppelten nichtlinearen Integralgleichungen (NLIEs) beschreiben.

Eine alternative Methode der Beschreibung der Thermodynamik wurde von Klümper eingeführt [56, 57] und verwendet die Abbildung des statistischen Operators eines eindimensionalen quantenmechanischen Systems auf ein inhomogenes zweidimensionales klassisches Gitter, die sogenannte Trotter-Suzuki-Abbildung [83–85]. Dieses Gitter lässt sich mittels einer geeigneten Transfermatrix, der Quantentransfermatrix (QTM), beschreiben. Im thermodynamischen Limes trägt zur freien Energie nur der größte Eigenwert der Quantentransfermatrix bei [61]. Unter der Annahme einiger analytischer Eigenschaften des größten Eigenwertes konnte ein endlicher Satz gekoppelter nichtlinearer Integralgleichungen hergeleitet werden, der den größten Eigenwert und damit die freie Energie beschreibt. Diese nichtlinearen Integralgleichungen sind ähnlich zu denen, die den Grundzustand bei endlicher Länge des Systems beschreiben [59, 60]. Die Äquivalenz des Zugangs zur Thermodynamik mit Hilfe der Quantentransfermatrix und des thermodynamischen Betheansatzes wurde explizit für eine dritte Form nichtlinearer Integralgleichungen gezeigt [90]. Diese wurde von Takahashi vom thermodynamischen Betheansatz ausgehend eingeführt [89] und verwendet eine einzige Integralgleichung, die direkt den größten Eigenwert der Quantentransfermatrix beschreibt.

Obige Verfahren konnten auf verschiedene integrable Modelle angewendet werden, siehe beispielsweise [26].

Die freie Energie beschreibt die globalen thermodynamischen Eigenschaften eines Systems. Für viele physikalische Fragestellungen, wie zum Beispiel die Untersuchung von magnetischen Eigenschaften eines Festkörpers mittels Neutronenstreuung, sind aber lokale Eigenschaften von Bedeutung. Diese werden durch Korrelationsfunktionen beschrieben.

Selbst für integrable Modelle galt lange Zeit, dass die Korrelationsfunktionen nicht explizit berech-

net werden können, sondern nur über Näherungsverfahren zugänglich sind. Bei durch den Betheansatz lösbaren Modellen besteht allerdings die Möglichkeit, aus der Kenntnis des Spektrums Aussagen über die Asymptotik von Korrelationsfunktionen zu treffen. Für den Grundzustand ergibt sich die Asymptotik aus der Korrektur zur Energie für ein System endlicher Länge, bei endlicher Temperatur bestimmt der nächstgrößte Eigenwert die Korrelationslänge.

Dieser Zustand hat sich zumindest für die statischen Korrelationsfunktionen der XXZ-Kette in den letzten Jahren geändert. In den 1990er Jahren gelang es Jimbo et al. eine Darstellung der Dichtematrix, die die Korrelationsfunktionen auf einem endlichen Abschnitt der Kette beschreibt, mittels Vielfachintegralen für den Grundzustand der XXZ-Kette ohne Magnetfeld herzuleiten [44, 45]. Dies erfolgte mit Hilfe einer Funktionalgleichung für die Dichtematrix, der q-Knizhnik-Zamolodchikov-Gleichung. Danach gelang es Boos und Korepin [17], für die isotrope Heisenbergkette die Vielfachintegrale zu faktorisieren, d.h. als Produkte einfacher Integrale zu schreiben. Eine ähnliche Faktorisierung wurde danach für die Korrelationsfunktionen des Grundzustandes der massiven und kritischen XXZ-Kette durchgeführt [51, 90]. Außerdem gelang es Kitanine et al. das Magnetfeld in die Berechnung der Korrelationsfunktionen einzubeziehen [55]. Hierbei diente im Gegensatz zu den Arbeiten von Jimbo et al. der algebraische Betheansatz als Startpunkt der Berechnung. Nachdem von Göhmann et al. eine Vielfachintegraldarstellung für die Korrelationsfunktionen bei endlichem Magnetfeld und endlicher Temperatur gefunden wurde [38, 39], ließ sich die Faktorisierung dieser Vielfachintegrale für kurze Abstände auf dem Gitter auch auf diesen Fall erweitern [12]. Ebenso konnten die Korrelationsfunktionen für den Grundzustand der XXZ-Kette bei endlicher Länge bestimmt werden [20]. Die Darstellung durch Vielfachintegrale erlaubt eine effiziente Berechnung der Hochtemperaturentwicklung der Korrelationsfunktionen [97].

Nachdem es gelungen war, für verschiedene Korrelationsfunktionen die auftretenden Vielfachintegrale für kurze Abstände auf dem Gitter explizit zu faktorisieren, folgte eine genauere Untersuchung der zugrundeliegenden algebraischen Struktur der Korrelationsfunktionen der XXZ-Kette. Diese führte auf eine Serie von Veröffentlichungen von Boos, Jimbo, Miwa, Smirnov und Takeyama, in der die Faktorisierung aller statischen Korrelationsfunktionen der XXZ-Kette bewiesen wurde [11, 14, 16, 46]. Dies geschah durch Betrachtung eines allgemeinen 6-Vertex-Modells, welches für das zugehörige quantenmechanische System, die XXZ-Kette, auch Magnetfeld und endliche Temperatur einschließt. Der hier verwendete Begriff der Faktorisierung meint nicht nur, dass sich die Korrelationsfunktionen als Produkt einfacher Integrale schreiben lassen, sondern, dass sich alle Korrelationsfunktionen durch hinreichend allgemeine Ein- und Zweipunktfunktionen ausdrücken lassen. Der Unterschied besteht darin, dass im ersten Fall mit wachsendem Abstand auf dem Gitter prinzipiell eine beliebige Anzahl unterschiedlicher einfacher Integrale auftreten kann, während im zweiten Fall nur eine endliche Anzahl unabhängiger Funktionen alle Korrelationsfunktionen bestimmt.

Wie bereits erwähnt, ist der entscheidende Punkt bei obigem Zugang, dass nicht direkt die Spinkette, sondern das zugehörige 6-Vertex-Modell betrachtet wird. Dieses besitzt natürlicherweise sowohl auf den horizontalen als auch auf den vertikalen Linien Inhomogenitätsparameter. Zusätzlich kann ein Feld, welches die Unordnung beschreibt, eingeführt werden, ohne dass die Integrität verloren geht. In diesem Fall ist die Dichtematrix eines endlichen Abschnitts der XXZ-Kette direkt verallgemeinert zu einer Dichtematrix eines inhomogenen Systems. Die zugehörige Dichtematrix besitzt die Inhomogenitäten ν_j der vertikalen Linien und das die Unordnung beschreibende Feld α als äußere Parameter. Die Inhomogenitäten auf den horizontalen Linien erlauben die Temperatur in das System einzuführen, aber auch den Hamiltonoperator zu verändern [96]. Die entscheidende Beobachtung ist, dass sich alle Korrelationsfunktionen eines inhomogenen 6-Vertex-Modells mit Unordnung durch Polynome nur zweier Funktionen $\varphi(\nu; \alpha)$ und $\omega(\nu_1, \nu_2; \alpha)$ ausdrücken lassen.

Diese lassen sich wiederum mit Hilfe von Integralgleichungen beschreiben [11]. Die Bestimmung der Koeffizienten der Polynome ist ein rein algebraisches Problem und hängt mit einer speziellen Basis von Fermioperatoren zusammen [14, 16]. Die Bestimmung dieser Koeffizienten wird auch als algebraischer Anteil, die Berechnung der Funktionen ω und φ als physikalischer Anteil des Problems bezeichnet. Der Grund dafür ist, dass die physikalischen Parameter, wie Temperatur und Magnetfeld, nur über diese Funktionen in die Berechnung der Korrelationsfunktionen eingehen. Derzeit gibt es noch keinen effizienten Algorithmus, der die Bestimmung der Koeffizienten und damit im Allgemeinen die Lösung des algebraischen Anteils erlaubt, was die Berechenbarkeit der Korrelationsfunktionen auf kurze Abstände auf dem Gitter einschränkt. Für die kritische XXZ-Kette wurde in [10] eine für die numerische Behandlung effiziente Beschreibung des physikalischen Anteils der Korrelationsfunktionen mit Hilfe von Integralgleichungen hergeleitet.

Wie sich gezeigt hat, sind nicht nur Gittermodelle wie die Heisenbergkette mittels Betheansatz behandelbar, sondern auch Kontinuumstheorien. Neben dem bereits erwähnten Bose-Gas sind dies unter anderem das quantenmechanische Sine-Gordon-Modell, eine massive 1+1-dimensionale Quantenfeldtheorie, und das massive Thirring-Modell [92]. Diese sind, was die globalen Eigenschaften betrifft, äquivalent. Dies wurde zuerst von Coleman [19] und Mandelstam [71] gezeigt. Beresin und Sushko konnten die Eigenfunktionen des massiven Thirring-Modells direkt im Kontinuum für ein System endlicher Länge bestimmen [7]. Korepin wendete dies an, um im thermodynamischen Limes die Anregungen des massiven Thirring-Modells direkt im Kontinuum zu berechnen [62, 64]. Außerdem gibt es verschiedene Gittermodelle, die das Sine-Gordon-Modell bzw. das massive Thirring-Modell als Kontinuumsliches enthalten. Zum einen gibt es eine direkte Formulierung des Sine-Gordon-Modells auf dem Gitter, das sogenannte Gitter-Sine-Gordon-Modell [79], welches mittels des algebraischen Betheansatzes gelöst wurde. Außerdem konnte Luther zeigen [70], dass sich das Massenspektrum als Grenzfall der XYZ-Kette wiederfinden lässt, während Bergknoff und Thacker aus diesem Zugang mit Hilfe des Betheansatzes explizit den Hamiltonoperator diagonalisieren konnten. Später fanden Weiss und Schotte das massive Thirring-Modell auch als Kontinuumsliches eines inhomogenen 6-Vertex-Modells [98]. Dieser Zugang wurde von Destri und de Vega genauer untersucht [22].

Für das massive Thirring-Modell konnten Fowler und Zotos TBA-Gleichungen ausgehend von denen für die XYZ-Kette herleiten [33, 34, 104]. Aufgrund der Struktur der TBA-Gleichungen für das zugehörige 8-Vertex-Modell, bzw. im Limes des massiven Thirring-Modells des kritischen 6-Vertex-Modells, sind diese jedoch in ihrer Struktur abhängig von der Kopplungskonstanten des massiven Thirring-Modells. Daher finden sich nur ausgewählte Fälle in der Literatur [34, 50]. Darüber hinaus gibt es nichtlineare Integralgleichungen für den Grundzustand bei endlicher Länge [23, 24]. Letztere wurden unter anderem von Ravanini et al. sehr genau auf unterschiedliche Anregungen analysiert [5, 25, 29–31].

Ebenso wurden für das Sine-Gordon-Modell Korrelationsfunktionen untersucht. Beispielsweise konnte von Smirnov [80] und Babujian et al. [4] die Formfaktorentwicklung bestimmt werden. Des Weiteren konnten Essler et al. die Determinantendarstellung für Korrelationsfunktionen der XXZ-Kette [27] auf das Gitter-Sine-Gordon-Modell übertragen [28]. Dies war jedoch nur bedingt erfolgreich, abgesehen vom Punkt freier Fermionen, für den dies bereits zuvor ausgehend vom massiven Thirring-Modell gelungen war [42].

Nachdem es bei der Berechnung der Korrelationsfunktionen der XXZ-Kette zu drastischen Fortschritten gekommen war, stellte sich die Frage, ob die dort verwendeten Methoden auch auf den Kontinuumsliches der XXZ-Kette angewendet werden können. Dies gelang sowohl für den Grundzustand des Bose-Gases [52], als auch für die Thermodynamik [77], wo jeweils eine Darstellung der

Korrelationsfunktionen mit Hilfe von Vielfachintegralen gefunden wurde. Die Frage, ob dies auch für das Sine-Gordon-Modell möglich ist, war ein Motiv für diese Arbeit.

Kürzlich gelang es zudem Jimbo et al., den oben geschilderten Zugang zu Korrelationsfunktionen mit Hilfe der Funktionen ω und φ auf den konformen Limes anzuwenden [15] und das Ergebnis auf die Einpunktfunktionen des Sine-Gordon-Modells zu übertragen [47].

In dieser Arbeit werden zwei verschiedene Modelle betrachtet, zum einen das Sine-Gordon-Modell, zum anderen die massive XXZ-Kette. Sie ist daher in zwei Teile aufgeteilt. Zunächst werden in Kapitel 2 einige Grundlagen für die Behandlung des Sine-Gordon-Modells und der XXZ-Kette ausgehend vom 6-Vertex-Modell dargestellt. Danach wird im ersten Teil der Arbeit das Sine-Gordon-Modell betrachtet. In Kapitel 3 wird ein neuer Zugang zum Sine-Gordon-Modell über das 6-Vertex-Modell präsentiert, der die Berechnung thermodynamischer Eigenschaften erlaubt. Diese lassen sich mit den in Kapitel 4 gezeigten nichtlinearen Integralgleichungen berechnen. Schließlich wird in Kapitel 5 gezeigt, wie sich die Vielfachintegraldarstellung für Korrelationsfunktionen der XXZ-Kette auf das zum Sine-Gordon-Modell gehörende Gitter übertragen lässt, wobei der Kontinuumsliches nur am Punkt freier Fermionen durchführbar ist. Im zweiten Teil werden Korrelationsfunktionen der massiven XXZ-Kette behandelt, wobei hier der neue Zugang über die Funktionen ω und φ verwendet wird. Genauer gesagt wird im Kapitel 6 der physikalische Anteil betrachtet, d.h. diese Funktionen werden durch Integralgleichungen beschrieben, die eine effiziente numerische Behandlung erlauben. Im Anschluss daran werden in Kapitel 7 einige Korrelationsfunktionen beispielhaft gezeigt und der Verlauf der zugehörigen Kurven diskutiert. In Kapitel 8 werden verschiedene Grenzfälle der massiven XXZ-Kette diskutiert. Hierbei werden insbesondere auch Korrekturen zum Ising-Limes untersucht. Der kritische Punkt der Ising-Kette lässt sich als Tripelpunkt der XXZ-Kette auffassen. Schließlich werden in Kapitel 9 die Ergebnisse dieser Arbeit zusammengefasst und mögliche zukünftige Fragestellungen diskutiert.

Der Anhang beinhaltet hauptsächlich technische Details zu einigen Rechnungen, die aus den Hauptteilen ausgelagert wurden. Im Anhang A wird die Herleitung der nichtlinearen Integralgleichungen für das Sine-Gordon-Modell genauer dargestellt. Darüber hinaus wird dort auch gezeigt, wie sich diese alternativ aus dem Zugang über die XYZ-Kette herleiten lassen. Im Anhang B werden die Integralgleichungen, die den physikalischen Anteil der Korrelationsfunktionen der massiven XXZ-Kette bestimmen, hergeleitet, während sich in Kapitel C weitere Details zu den Rechnungen für den Grenzfall großer Anisotropie finden.

Im Zusammenhang mit dieser Dissertation sind drei Publikationen entstanden. Zum einen [93], die den physikalischen Anteil der Korrelationsfunktionen der massiven XXZ-Kette beschreibt und inhaltlich größtenteils die Kapitel 6 und 7 umfasst, während [94] sich mit dem Tripelpunkt der XXZ-Kette befasst und somit als Inhalt den größten Teil des Kapitels 8 enthält. Schließlich entstand noch [95], die den magnetokalorischen Effekt der XXZ-Kette zum Thema hat. Diese ist nicht Teil der Dissertation. Zur numerischen Berechnung der dort verwendeten Integralgleichungen für die massive XXZ-Kette wurde jedoch ein C++-Programm verwendet, das auf demjenigen beruht, welches zur Berechnung der Korrelationsfunktionen verwendet wurde.

2. Grundlagen

Der Zugang zu den in dieser Arbeit behandelten Modellen, dem Sine-Gordon-Modell und der XXZ-Kette, beruht auf dem 6-Vertex-Modell. Aus diesem Grund lassen sich viele grundlegende Eigenschaften parallel behandeln. Dies erfolgt, indem in diesem Kapitel im Allgemeinen ein inhomogenes 6-Vertex-Modell betrachtet wird und nur an Stellen, wo dies notwendig ist, die Inhomogenitäten spezifiziert werden.

2.1. Yang-Baxter-Algebra und Yang-Baxter-Gleichung

Die Grundlage der Integrabilität der in dieser Arbeit behandelten Modelle ist die Tatsache, dass die Transfermatrix des 6-Vertex-Modells eine Darstellung der Yang-Baxter-Algebra (YBA) ist. Diese soll nun kurz eingeführt werden und im nächsten Abschnitt die für den weiteren Verlauf wichtigen Darstellungen konstruiert werden. Für genaue Details sei auf das Lehrbuch [26] verwiesen. Die Yang-Baxter-Algebra ist eine assoziative quadratische Algebra mit Erzeugern $T_\beta^\alpha(\lambda)$, $\alpha, \beta = 1, \dots, d$; $\lambda \in \mathbb{C}$ mit der Relation

$$R(\lambda, \mu)T_1(\lambda)T_2(\mu) = T_2(\mu)T_1(\lambda)R(\lambda, \mu). \quad (2.1)$$

Hierbei wird die folgende Notation verwendet

$$T(\lambda) = \begin{pmatrix} T_1^1(\lambda) & \cdots & T_d^1(\lambda) \\ \vdots & & \vdots \\ T_1^d(\lambda) & \cdots & T_d^d(\lambda) \end{pmatrix}, \quad (2.2)$$

$$T_1(\lambda) = T(\lambda) \otimes I_d, \quad (2.3)$$

$$T_1(\lambda) = I_d \otimes T(\lambda). \quad (2.4)$$

Dabei ist I_d die $d \times d$ Einheitsmatrix und $R(\lambda, \mu)$ eine $d^2 \times d^2$ Matrix mit komplexwertigen Einträgen, die sogenannte R -Matrix. Diese fixiert die Struktur der Algebra. Eine hinreichende Bedingung für die Widerspruchsfreiheit der Algebra ist, dass die R -Matrix eine Lösung der Yang-Baxter-Gleichung (YBE) ist. Diese lautet in Komponentenform im Raum $\mathbb{C}^d \otimes \mathbb{C}^d \otimes \mathbb{C}^d$

$$R_{\alpha'\beta'}^{\alpha\beta}(\lambda, \mu)R_{\alpha''\gamma'}^{\alpha'\gamma}(\lambda, \nu)R_{\beta''\gamma''}^{\beta'\gamma'}(\mu, \nu) = R_{\beta'\gamma'}^{\beta\gamma}(\mu, \nu)R_{\alpha'\gamma''}^{\alpha\gamma'}(\lambda, \nu)R_{\alpha''\beta''}^{\alpha'\beta'}(\lambda, \mu). \quad (2.5)$$

Hierbei wird die Summenkonvention verwendet, die besagt, dass über doppelt auftretende Indizes summiert wird. Mit der Basis $e_{j_\alpha}^\beta$ von $\text{End}(\mathbb{C}^d)^{\otimes L}$, der kanonischen Einbettung der Standardbasis¹ e_α^β von $\text{End}(\mathbb{C}^d)$ in $\text{End}(\mathbb{C}^d)^{\otimes L}$, lässt sich die Darstellung

$$R_{jk}(\lambda, \mu) = R_{\beta\delta}^{\alpha\gamma}(\lambda, \mu)e_{j_\alpha}^\beta e_{k_\gamma}^\delta \quad (2.6)$$

¹ e_α^β hat nur in Zeile α und Spalte β mit 1 einen nicht verschwindenden Eintrag. Es gelten die folgenden Rechenregeln

$$(e_\beta^\alpha)^\gamma_\delta = \delta_\delta^\alpha \delta_\beta^\gamma, \quad e_\beta^\alpha e_\delta^\gamma = \delta_\delta^\alpha e_\beta^\gamma.$$

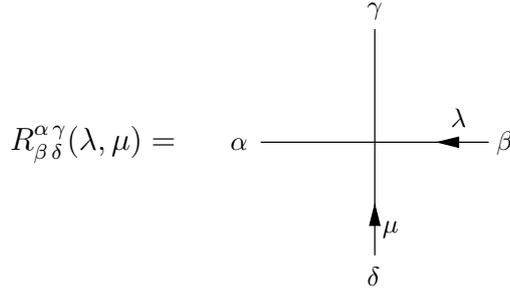


Abbildung 2.1.: Graphische Beschreibung der R -Matrix

der R -Matrix in $\text{End}(\mathbb{C}^d)^{\otimes L}$ einführen. Die Yang-Baxter-Gleichung (2.5) ist dann äquivalent zu

$$R_{12}(\lambda, \mu)R_{13}(\lambda, \nu)R_{23}(\mu, \nu) = R_{23}(\mu, \nu)R_{13}(\lambda, \nu)R_{12}(\lambda, \mu). \quad (2.7)$$

Alternativ lässt sich (2.1) auch schreiben als

$$\check{R}(\lambda, \mu) (T(\lambda) \otimes T(\mu)) = (T(\mu) \otimes T(\lambda)) \check{R}(\lambda, \mu). \quad (2.8)$$

Dabei ist die Matrix \check{R} definiert durch $\check{R}(\lambda, \mu) = PR(\lambda, \mu)$, wobei P den Permutationsoperator bezeichnet.

2.2. Transfermatrix

Grundlage der Konstruktion des 6-Vertex-Modells ist die zugehörige trigonometrische R -Matrix

$$R(\lambda, \mu) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & b(\lambda - \mu) & c(\lambda - \mu) & 0 \\ 0 & c(\lambda - \mu) & b(\lambda - \mu) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \begin{array}{l} b(\lambda) = \frac{\text{sh}(\lambda)}{\text{sh}(\lambda + \eta)} \\ c(\lambda) = \frac{\text{sh}(\eta)}{\text{sh}(\lambda + \eta)} \end{array}, \quad (2.9)$$

die eine Lösung der Yang-Baxter-Gleichung ist. Eine graphische Darstellung ist in Abbildung 2.1 gegeben. Im Folgenden wird unter Ausnutzung der Tatsache, dass $R(\lambda, \mu)$ eine Lösung der Yang-Baxter-Gleichung ist, eine Darstellung der Yang-Baxter-Algebra konstruiert. Hierzu wird eine L -Matrix am Platz j über

$$(L_j)_{\beta}^{\alpha}(\lambda, \mu) = R_{\beta\delta}^{\alpha\gamma}(\lambda, \mu)e_j^{\delta} \quad (2.10)$$

definiert. Durch Multiplikation der Yang-Baxter-Gleichung (2.5) mit $e_j^{\gamma''}$ ergibt sich

$$\check{R}(\lambda, \mu) (L_j(\lambda, \nu) \otimes L_j(\mu, \nu)) = (L_j(\mu, \nu) \otimes L_j(\lambda, \nu)) \check{R}(\lambda, \mu). \quad (2.11)$$

Damit ist L_j für alle $j = 1, \dots, L$ eine Darstellung der Yang-Baxter-Algebra, die als fundamentale Darstellung bezeichnet wird. Die Einträge der L -Matrizen sind wiederum 2×2 -Matrizen. Jedoch kommutieren die Einträge von L -Matrizen an verschiedenen Plätzen, da die Basiselemente $e_{j\beta}^{\alpha}$ für unterschiedliche Plätze miteinander vertauschen. Somit lässt sich das Tensorprodukt zweier L -Matrizen, die zu aufeinander folgenden Plätzen gehören, leicht berechnen zu

$$(L_{j+1}(\lambda, \nu_{j+1}) \otimes L_{j+1}(\mu, \nu_{j+1})) (L_j(\lambda, \nu_j) \otimes L_j(\mu, \nu_j)) = L_{j+1}(\lambda, \nu_{j+1})L_j(\lambda, \nu_j) \otimes L_{j+1}(\mu, \nu_{j+1})L_j(\mu, \nu_j). \quad (2.12)$$

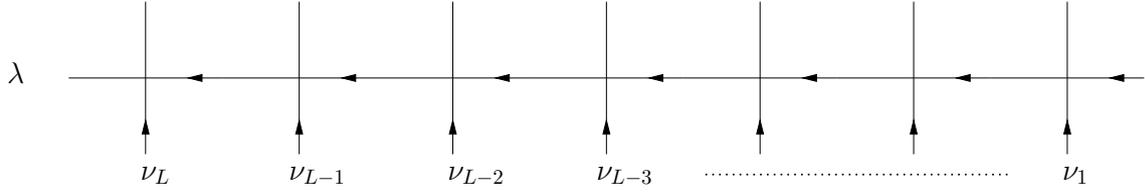


Abbildung 2.2.: Graphische Darstellung der Transfermatrix $t(\lambda)$ (2.14), die horizontalen Enden sind periodisch geschlossen.

Daraus folgt, dass das Tensorprodukt zweier Darstellungen wieder eine Darstellung der Yang-Baxter-Algebra ist. Diese Eigenschaft heißt Co-Multiplikation. Durch L -fache iterative Co-Multiplikation ergibt sich die sogenannte Monodromiematrix

$$T(\lambda) = L_L(\lambda, \nu_L) \cdots L_1(\lambda, \nu_1), \quad (2.13)$$

die ebenfalls eine Darstellung der Yang-Baxter-Algebra ist. Die Spur der Monodromiematrix

$$t(\lambda) = \text{tr}(T(\lambda)) \quad (2.14)$$

wird als Transfermatrix bezeichnet. Die Transfermatrizen $t(\lambda)$ mit $\lambda \in \mathbb{C}$ bilden per Konstruktion eine kommutierende Familie, d.h. $[t(\lambda), t(\mu)] = 0$ mit $\lambda, \mu \in \mathbb{C}$. Die graphische Darstellung ist in Abbildung 2.2 zu sehen.

2.2.1. Algebraischer Betheansatz

Im Folgenden soll kurz eine darstellungsfreie Formulierung des algebraischen Betheansatzes präsentiert werden. Für eine ausführlichere Darstellung sei auf das Lehrbuch [26] verwiesen. Die Monodromiematrix (2.13) wird hierbei als 2×2 Matrix mit matrixwertigen Einträgen aufgefasst,

$$T(\lambda) = \begin{pmatrix} A(\lambda) & B(\lambda) \\ C(\lambda) & D(\lambda) \end{pmatrix}. \quad (2.15)$$

Nun muss ein sogenanntes Pseudovakuum $|0\rangle$ gefunden werden, sodass die Monodromiematrix angewandt auf das Pseudovakuum eine (obere) Dreiecksform annimmt. Außerdem muss das Pseudovakuum ein Eigenvektor zu den Operatoren $A(\lambda)$ und $D(\lambda)$ sein. Zusammengenommen muss also gelten

$$\begin{aligned} A(\lambda)|0\rangle &= a(\lambda)|0\rangle, & D(\lambda)|0\rangle &= d(\lambda)|0\rangle, \\ C(\lambda)|0\rangle &= 0. \end{aligned} \quad (2.16)$$

$a(\lambda)$ und $d(\lambda)$ sind im Allgemeinen komplexwertige Funktionen und hängen von der Darstellung, d.h. in diesem Fall den Inhomogenitäten ν_j , ab.

Der Hilbertraum wird aufgespannt durch Vektoren der Form

$$|\{\mu\}\rangle = |\mu_1, \dots, \mu_M\rangle = B(\mu_1) \cdots B(\mu_M)|0\rangle. \quad (2.17)$$

Das Ziel des Betheansatzes ist es, die Transfermatrix zu diagonalisieren. In dieser Notation ist diese gegeben durch

$$t(\lambda) = \text{tr}(T(\lambda)) = A(\lambda) + D(\lambda). \quad (2.18)$$

Da Transfermatrizen für beliebige Spektralparameter paarweise kommutieren, existiert für alle Spektralparameter ein identischer Satz an Eigenvektoren. Damit ist das folgende Eigenwertproblem zu lösen

$$t(\lambda)|\{\mu\}\rangle = \Lambda(\lambda)|\{\mu\}\rangle. \quad (2.19)$$

Zunächst werden aus der Yang-Baxter-Algebra (2.8)

$$\check{R}(\lambda, \mu) (T(\lambda) \otimes T(\mu)) = (T(\mu) \otimes T(\lambda)) \check{R}(\lambda, \mu) \quad (2.20)$$

die folgenden Beziehungen

$$B(\lambda)B(\mu) = B(\mu)B(\lambda) \quad (2.21)$$

$$A(\lambda)B(\mu) = \frac{1}{b(\mu - \lambda)} B(\mu)A(\lambda) - \frac{c(\mu - \lambda)}{b(\mu - \lambda)} B(\lambda)A(\mu) \quad (2.22)$$

$$D(\lambda)B(\mu) = \frac{1}{b(\lambda - \mu)} B(\mu)D(\lambda) - \frac{c(\lambda - \mu)}{b(\lambda - \mu)} B(\lambda)D(\mu) \quad (2.23)$$

hergeleitet. Die Funktionen b und c sind in (2.9) definiert. Nun sollen die Vertauschungsrelationen zwischen der Transfermatrix $t(\lambda) = A(\lambda) + D(\lambda)$ und einem Produkt von B -Operatoren $B(\mu_1) \cdots B(\mu_M)$ bestimmt werden. Aus den obigen Relationen ergibt sich durch Iteration der folgende Ausdruck, der sich per Induktion beweisen lässt (siehe [26]),

$$\begin{aligned} t(\lambda) \prod_{k=1}^M B(\mu_k) &= \left(\prod_{k=1}^M B(\mu_k) \right) \left(A(\lambda) \prod_{k=1}^M \frac{1}{b(\mu_k - \lambda)} + D(\lambda) \prod_{k=1}^M \frac{1}{b(\lambda - \mu_k)} \right) \\ &+ \sum_{k=1}^M \left(B(\lambda) \prod_{\substack{l=1 \\ l \neq k}}^M B(\mu_l) \right) \frac{c(\lambda - \mu_k)}{b(\lambda - \mu_k)} \\ &\times \left(A(\mu_k) \prod_{\substack{l=1 \\ l \neq k}}^M \frac{1}{b(\mu_l - \mu_k)} - D(\mu_k) \prod_{\substack{l=1 \\ l \neq k}}^M \frac{1}{b(\mu_k - \mu_l)} \right). \end{aligned} \quad (2.24)$$

Damit der Vektor $|\{\mu\}\rangle$ ein Eigenvektor der Transfermatrix ist, muss der Ausdruck in der zweiten und dritten Zeile von (2.24) angewendet auf das Pseudovakuum verschwinden. Dies liefert die Betheansatzgleichungen

$$\frac{d(\mu_k)}{a(\mu_k)} = \prod_{\substack{l=1 \\ l \neq k}}^M \frac{b(\mu_k - \mu_l)}{b(\mu_k - \mu_l)}, \quad k = 1, \dots, M, \quad (2.25)$$

die die Betheansatzzahlen μ_k , auch Rapiditäten genannt, erfüllen müssen. Wird (2.24) auf das Pseudovakuum angewendet, so lässt sich der Eigenwert der Transfermatrix aus der ersten Zeile ablesen zu

$$\Lambda(\lambda) = a(\lambda) \prod_{k=1}^M \frac{1}{b(\mu_k - \lambda)} + d(\lambda) \prod_{k=1}^M \frac{1}{b(\lambda - \mu_k)}. \quad (2.26)$$

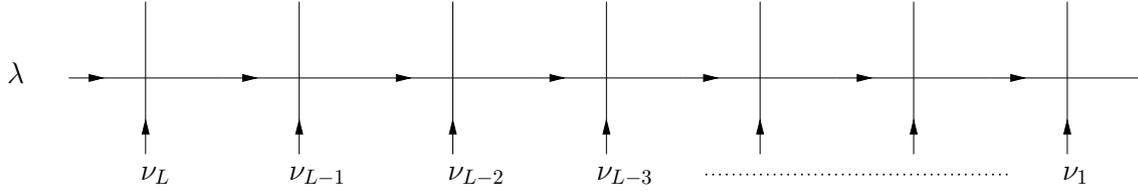


Abbildung 2.3.: Graphische Darstellung der Transfermatrix $\bar{t}(\lambda)$ (2.31), die horizontalen Enden sind periodisch geschlossen.

2.3. Quantentransfermatrix

In diesem Abschnitt soll die Quantentransfermatrix und damit der Zugang zur Thermodynamik, d.h. der Zustandssumme $Z = \text{tr}(e^{-\beta\mathcal{H}})$, eingeführt werden. Dazu wird der Zusammenhang zwischen der gewöhnlichen Transfermatrix und dem jeweiligen Hamiltonoperator benötigt, welcher für das Sine-Gordon-Modell in Kapitel 3 hergestellt wird. Der Hamiltonoperator der XXZ-Kette findet sich in Kapitel 6.1, für den Zusammenhang mit der Transfermatrix in der hier verwendeten Notation sei beispielsweise auf [38] verwiesen. In beiden Fällen erfolgt der Zugang zum Hamiltonoperator über die logarithmische Ableitung der Transfermatrix. Für das Sine-Gordon-Modell gilt

$$\mathcal{H}_{SG} = \lim_{\delta \rightarrow 0} \frac{i\gamma}{2\pi\delta} \frac{\partial}{\partial \lambda} \ln(t(\lambda + \theta)t(\lambda - \theta)) \big|_{\lambda=0} \quad (2.27)$$

mit den Inhomogenitäten $\nu_j = (-)^j \theta$. Hierbei bezeichnet δ die Gitterkonstante. Die Parameter γ und θ werden in Kapitel 3 definiert. Für die XXZ-Kette lautet der Zusammenhang

$$\mathcal{H}_{XXZ} = 2J \text{sh}(\eta) \frac{\partial}{\partial \lambda} \ln(t(\lambda)) \big|_{\lambda=0} \quad (2.28)$$

mit $\nu_j = 0$.

Zur Konstruktion der Quantentransfermatrix ist es notwendig, eine weitere Transfermatrix \bar{t} einzuführen, die in engem Bezug zur Transfermatrix t aus dem vorigen Abschnitt steht. Dazu wird die neue L -Matrix

$$(\bar{L}_j)_{\beta}^{\alpha}(\lambda, \mu) = R_{\delta\beta}^{\gamma\alpha}(\mu, \lambda) e_{j\gamma}^{\delta} \quad (2.29)$$

definiert. Diese ist ebenfalls eine Darstellung der Yang-Baxter-Algebra (2.8) allerdings zur R -Matrix \check{R}^{-1} . Damit lässt sich durch Co-Multiplikation eine Monodromiematrix

$$\bar{T}(\lambda) = \bar{L}_1(\lambda, \nu_1) \cdots \bar{L}_L(\lambda, \nu_L) \quad (2.30)$$

konstruieren, die ebenfalls eine Darstellung der Yang-Baxter-Algebra ist. Dies bedeutet insbesondere, dass auch für diese Monodromiematrix alle Rechnungen, insbesondere der algebraische Betheansatz, analog zur gewöhnlichen Transfermatrix durchgeführt werden können.

Die folgende Darstellung beschränkt sich auf das Sine-Gordon-Modell. Der Zugang zur XXZ-Kette ist analog, indem $\theta = 0$ gesetzt wird und auf den Kontinuumsliches verzichtet wird. Eine explizite Darstellung für die XXZ-Kette findet sich in [38], wo auch die Einbeziehung des Magnetfeldes erläutert wird.

Mit

$$\bar{t}(\lambda) = \text{tr} \bar{T}(\lambda) \quad (2.31)$$

ergibt sich insbesondere $t(\pm\theta)\bar{t}(\pm\theta) = 1$ und damit

$$\partial_\lambda \ln(t(\lambda))|_{\lambda=\pm\theta} = -\partial_\lambda \ln(\bar{t}(\lambda))|_{\lambda=\pm\theta}. \quad (2.32)$$

Die graphische Darstellung dieser Transfermatrix findet sich in Abbildung 2.3. Sie ergibt sich direkt, wenn zunächst die zugehörige Monodromiematrix \bar{T} aus Gleichung (2.30) transponiert wird. Damit ergibt sich für die approximierende Darstellung des statistischen Operators

$$\rho_{N,L} = [\bar{t}(\theta - i\tau)t(\theta + i\tau)\bar{t}(-\theta - i\tau)t(-\theta + i\tau)]^{N/4}, \quad (2.33)$$

wobei $\tau = -\frac{\beta\gamma}{N\pi\delta}$ und β die Inverse Temperatur bezeichnet. Im Grenzfall $N \rightarrow \infty$, dem sogenannten Trotter-Limes, folgt mit der Trotter-Suzuki-Formel

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \left(1 + \frac{X_N}{N}\right)^N = e^X, \quad (2.34)$$

wobei X_N gegen X konvergiert, dass $\rho_{N,L}$ gegen $e^{-\beta\mathcal{H}_L}$ geht. Hierbei bezeichnet \mathcal{H}_L den zu (2.27) gehörenden Hamiltonoperator auf einem Gitter der Länge L vor Durchführung des Kontinuumslimes. Um eine geeignete Darstellung des approximierten statistischen Operators zu erhalten, werden die Hilfsräume der Monodromiematrizen $T(\lambda)$ und $\bar{T}(\lambda)$, bezüglich derer die Spur gebildet wird, mit $\bar{1}, \bar{2}, \dots, \bar{N}$ indiziert. Somit gilt $t(\lambda) = \text{tr}_{\bar{j}} T_{\bar{j}}(\lambda)$ und $\bar{t}(\lambda) = \text{tr}_{\bar{j}} \bar{T}_{\bar{j}}(\lambda)$. Des Weiteren lassen sich die Monodromiematrizen in dieser Notation wie folgt durch R -Matrizen ausdrücken

$$T_{\bar{j}}(\lambda) = R_{\bar{j},L}(\lambda, \theta) R_{\bar{j},L-1}(\lambda, -\theta) \cdots R_{\bar{j},2}(\lambda, \theta) R_{\bar{j},1}(\lambda, -\theta), \quad (2.35)$$

$$\bar{T}_{\bar{j}}(\lambda) = R_{1,\bar{j}}(-\theta, \lambda) R_{2,\bar{j}}(\theta, \lambda) \cdots R_{L-1,\bar{j}}(-\theta, \lambda) R_{L,\bar{j}}(\theta, \lambda). \quad (2.36)$$

Damit ergibt sich unter der Voraussetzung, dass $N/4$ eine ganze Zahl ist

$$\begin{aligned} \rho_{N,L} &= \text{tr}_{\bar{1}, \dots, \bar{N}} \left[\bar{T}_{\bar{N}}(\theta - i\tau) T_{\bar{N}-1}(\theta + i\tau) \bar{T}_{\bar{N}-2}(-\theta - i\tau) T_{\bar{N}-3}(-\theta + i\tau) \cdots T_{\bar{1}}(-\theta + i\tau) \right] \\ &= \text{tr}_{\bar{1}, \dots, \bar{N}} \left[\bar{T}_{\bar{N}}(\theta - i\tau) T_{\bar{N}-1}^t(\theta + i\tau) \bar{T}_{\bar{N}-2}(-\theta - i\tau) T_{\bar{N}-3}^t(-\theta + i\tau) \cdots T_{\bar{1}}^t(-\theta + i\tau) \right] \\ &= \text{tr}_{\bar{1}, \dots, \bar{N}} \left[R_{1,\bar{N}}(-\theta, \theta - i\tau) \cdots R_{L,\bar{N}}(\theta, \theta - i\tau) \right. \\ &\quad R_{\bar{N}-1,1}^{t_1}(\theta + i\tau, -\theta) \cdots R_{\bar{N}-1,L}^{t_1}(\theta + i\tau, -\theta) \\ &\quad R_{1,\bar{N}-2}(-\theta, -\theta - i\tau) \cdots R_{L,\bar{N}-2}(\theta, -\theta - i\tau) \\ &\quad R_{\bar{N}-3,1}^{t_1}(-\theta + i\tau, -\theta) \cdots R_{\bar{N}-3,L}^{t_1}(\theta + i\tau, \theta) \\ &\quad \cdots \\ &\quad \left. R_{\bar{1},1}^{t_1}(-\theta + i\tau, -\theta) \cdots R_{\bar{1},L}^{t_1}(\theta + i\tau, \theta) \right] \\ &= \text{tr}_{\bar{1}, \dots, \bar{N}} \left[R_{1,\bar{N}}(-\theta, \theta - i\tau) R_{\bar{N}-1,1}^{t_1}(\theta + i\tau, -\theta) R_{1,\bar{N}-2}(-\theta, -\theta - i\tau) \right. \\ &\quad R_{\bar{N}-3,1}^{t_1}(-\theta + i\tau, -\theta) \cdots R_{\bar{1},1}^{t_1}(-\theta + i\tau, -\theta) \\ &\quad \cdots \\ &\quad R_{L,\bar{N}}(\theta, \theta - i\tau) R_{\bar{N}-1,L}^{t_1}(\theta + i\tau, \theta) R_{L,\bar{N}-2}(\theta, -\theta - i\tau) R_{\bar{N}-3,L}^{t_1}(-\theta + i\tau, \theta) \\ &\quad \left. \cdots R_{\bar{1},L}^{t_1}(-\theta + i\tau, \theta) \right] \\ &= \text{tr}_{\bar{1}, \dots, \bar{N}} \left[T_{\bar{1}}^{QTM}(-\theta) T_{\bar{2}}^{QTM}(\theta) \cdots T_{\bar{L}-1}^{QTM}(-\theta) T_{\bar{L}}^{QTM}(\theta) \right], \quad (2.37) \end{aligned}$$

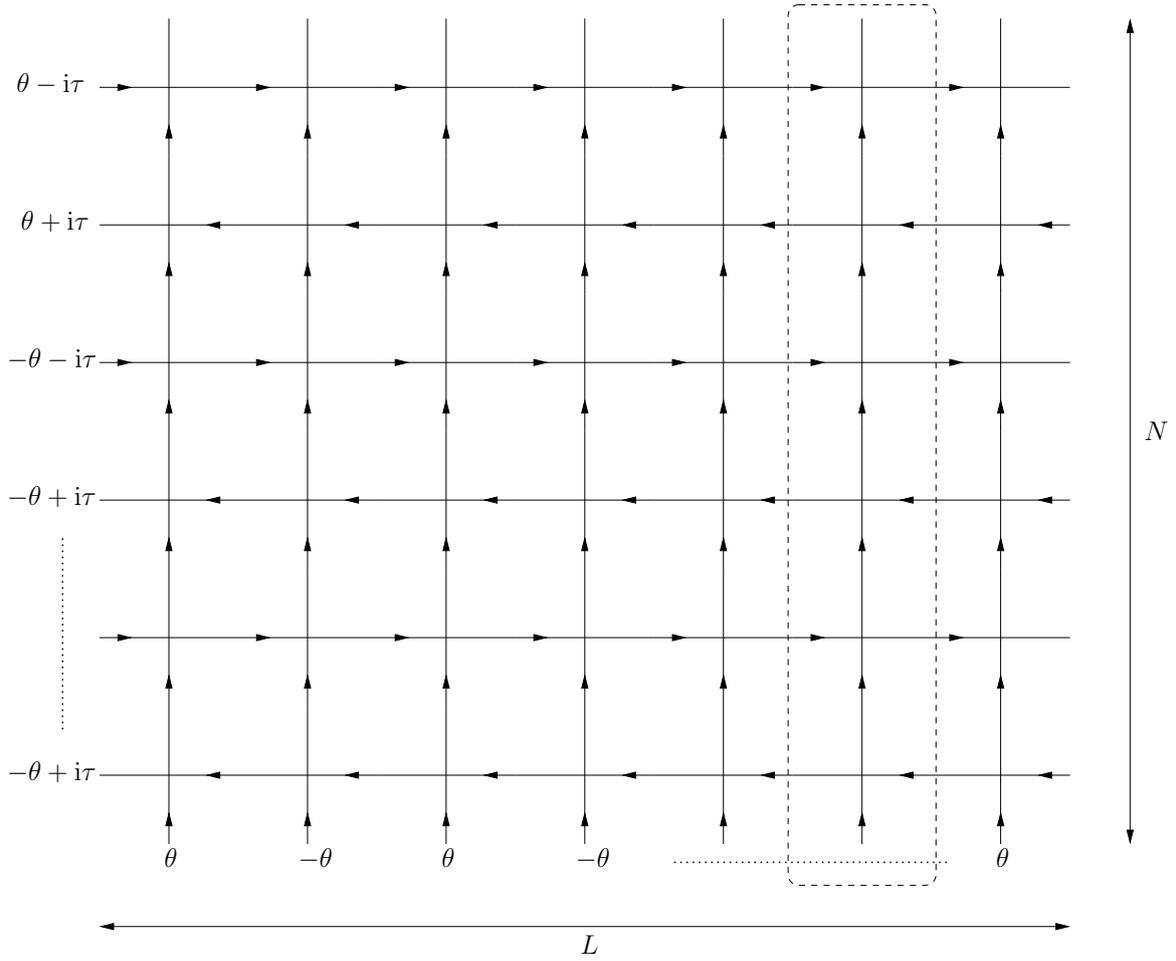


Abbildung 2.4.: Graphische Darstellung des approxiierten statistischen Operators $\rho_{N,L}$ und Definition der Quantentransfermatrix. Sowohl die horizontalen als auch die vertikalen Enden sind periodisch geschlossen.

wobei t_1 die Transposition im ersten Raum bezeichnet, also $R_{\beta\delta}^{t_1\alpha\gamma} = R_{\alpha\delta}^{\beta\gamma}$. In der letzten Zeile wurde die Definition der Quantenmonodromiematrix

$$T_j^{QTM}(\lambda) = R_{j,\bar{N}}(\lambda, \theta - i\tau) R_{\bar{N}-1,j}^{t_1}(\theta + i\tau, \lambda) R_{j,\bar{N}-2}(\lambda, -\theta - i\tau) R_{\bar{N}-3,j}^{t_1}(-\theta + i\tau, \lambda) \cdots \cdots R_{1,j}^{t_1}(-\theta + i\tau, \lambda) \quad (2.38)$$

verwendet. Die zugehörige Transfermatrix, die sogenannte Quantentransfermatrix, ist definiert durch

$$t^{QTM}(\lambda) = \text{tr}_j T_j^{QTM}(\lambda). \quad (2.39)$$

Diese Konstruktion lässt sich auch graphisch verstehen. Das zugehörige zweidimensionale Gitter zu $\rho_{N,L}$ ist in Abbildung 2.4 zu sehen. Die Multiplikation der Transfermatrizen erfolgt hierbei von oben nach unten, daher ist auch die Quantentransfermatrix, die mit dem gestrichelten Kästchen umrahmt ist, in dieser Reihenfolge zu lesen. Betrachtet man das Gitter aus dieser um 90° gedrehten Perspektive,

so wird nur eine Transfermatrix, nämlich die Quantentransfermatrix, zur Beschreibung des Gitters benötigt.

Die Zustandssumme lässt sich nun mit Hilfe der Quantentransfermatrix ausdrücken

$$Z_L = \lim_{N \rightarrow \infty} \text{tr}_{1, \dots, L} \rho_{N, L} = \lim_{N \rightarrow \infty} [t^{QTM}(-\theta)t^{QTM}(\theta)]^{L/2}, \quad (2.40)$$

welche die Bestimmung der freien Energie erlaubt

$$f = -T \lim_{l \rightarrow \infty} \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{\ln(Z_L)}{l} \quad (2.41a)$$

$$= -T \lim_{\delta \rightarrow 0} \frac{1}{\delta} \lim_{N \rightarrow \infty} \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{\ln(Z_L)}{L} \quad (2.41b)$$

$$= -\frac{T}{2} \lim_{\delta \rightarrow 0} \frac{1}{\delta} \ln \left[\Lambda_0^{QTM}(-\theta) \Lambda_0^{QTM}(\theta) \right]. \quad (2.41c)$$

Hierbei ist verwendet worden, dass die Grenzwerte für L und N vertauschen [85, 86] und dass der größte Eigenwert Λ_0^{QTM} der Quantentransfermatrix vom nächstführenden Eigenwert durch eine endliche Lücke getrennt ist.

Der Grund dafür, dass die Quantentransfermatrix für das weitere Vorgehen nützlich ist, ist dadurch begründet, dass sie ebenfalls eine Darstellung der Yang-Baxter-Algebra zur R -Matrix (2.9) ist. Damit lassen sich die Eigenwerte mittels des algebraischen Betheansatzes bestimmen. Mit

$$L_j^{QTM\alpha}(\lambda, \mu) = \begin{cases} R_{\beta\delta}^{\alpha\gamma}(\lambda - \mu) e_{j\gamma}^\delta & j \text{ gerade} \\ R_{\delta\beta}^{t_1\gamma\alpha}(\mu - \lambda) e_{j\gamma}^\delta & j \text{ ungerade} \end{cases} \quad (2.42)$$

lässt sich die Quantenmonodromiematrix schreiben als

$$T^{QTM}(\lambda) = L_{\bar{N}}^{QTM}(\lambda, \theta - i\tau) L_{\bar{N}-1}^{QTM}(\lambda, \theta + i\tau) L_{\bar{N}-2}^{QTM}(\lambda, -\theta - i\tau) L_{\bar{N}-3}^{QTM}(\lambda, -\theta + i\tau) \cdots \\ \cdots L_{\bar{1}}^{QTM}(\lambda, -\theta + i\tau). \quad (2.43)$$

Da R^{t_1} eine Lösung der bezüglich Raum 1 transponierten Yang-Baxter-Gleichung ist

$$R_{23}(\mu - \nu) R_{12}^{t_1}(\lambda - \mu) R_{13}^{t_1}(\lambda - \nu) = R_{13}^{t_1}(\lambda - \nu) R_{12}^{t_1}(\lambda - \mu) R_{23}(\mu - \nu), \quad (2.44)$$

ist $L_{\bar{j}}^{QTM}$ auch für ungerade \bar{j} eine Darstellung der Yang-Baxter-Algebra zur selben R -Matrix, so dass sich über die Co-Multiplikation

$$R_{jk}(\lambda, \mu) T_j^{QTM}(\lambda) T_k^{QTM}(\mu) = T_k^{QTM}(\mu) T_j^{QTM}(\lambda) R_{jk}(\lambda, \mu) \quad (2.45)$$

ergibt.

Teil I.

**Ein neuer Zugang zum
Sine-Gordon-Modell**

3. Das Sine-Gordon-Modell als Kontinuumslimites des 6-Vertex-Modells

In der Literatur sind unterschiedliche Gittermodelle bekannt, die das Sine-Gordon-Modell oder äquivalent das massive Thirring-Modell als Kontinuumslimites enthalten. Zum einen lässt sich das massive Thirring-Modell als Grenzfall des 8-Vertex-Modells bzw. der XYZ-Kette finden [8, 70], zum anderen als Grenzfall des 6-Vertex-Modells mit Hilfe des sogenannten Lichtkegelansatzes [22, 98]. Für das Sine-Gordon-Modell existiert eine weitere Gitterregularisierung, das Gitter-Sine-Gordon-Modell, siehe [79] bzw. das Lehrbuch [63] und darin enthaltene Quellenangaben.

Im diesem Kapitel wird ein neuer Zugang präsentiert, der eine Kombination der beiden erstgenannten Kontinuumslimites darstellt. Ausgangspunkt ist das 6-Vertex-Modell, jedoch erfolgt der Zugang zum Hamiltonoperator über die logarithmische Ableitung der Transfermatrix, wie es bei der XYZ-Kette der Fall ist. Dies erlaubt eine Berechnung der thermodynamischen Eigenschaften des Sine-Gordon-Modells, bei der nur die algebraische Struktur des 6-Vertex-Modells benötigt wird. Dies ist zwar auch im Gitter-Sine-Gordon-Modell der Fall, jedoch sind dort die Einträge der L -Matrix keine Zahlen, sondern Operatoren. Daher lässt es sich nicht einfach als inhomogenes 6-Vertex-Modell auffassen.

Das Sine-Gordon-Modell ist definiert durch die Lagrangedichte

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} \partial_\mu \Phi \partial^\mu \Phi - \frac{M_0}{\beta^2} (1 - \cos(\beta \Phi)) , \quad (3.1)$$

wobei Φ ein kanonisches bosonisches Feld in 1+1-Dimensionen ist. Des Weiteren gilt $0 < \beta^2 < 8\pi$. Für $\beta^2 > 8\pi$ ist die Energie pro Volumen nach unten unbeschränkt und es gibt daher keinen Grundzustand. Für $\beta^2 = \pi/4$ ist das Sine-Gordon Modell äquivalent zu relativistischen massiven freien Fermionen. Zum Sine-Gordon Modell äquivalent ist das massive Thirring-Modell. Dieses ist definiert über die Lagrangedichte

$$\mathcal{L} = \bar{\Psi} (i\gamma^\mu \partial_\mu - m_0) \Psi - \frac{g}{2} : (\bar{\Psi} \gamma_\mu \Psi) (\bar{\Psi} \gamma^\mu \Psi) : . \quad (3.2)$$

Hierbei ist Ψ ein zweikomponentiges fermionisches Feld und $\bar{\Psi} = \Psi^\dagger \gamma^0$. Normalordnung bedeutet, dass Ψ rechts und Ψ^\dagger links steht. Eine mögliche Wahl der Matrizen γ_i ist

$$\gamma_0 = \sigma^x \quad \wedge \quad \gamma_1 = i\sigma^y . \quad (3.3)$$

Die kontravarianten γ -Matrizen sind wie üblich gegeben durch $\gamma^j = \eta^{jk} \gamma_k$, wobei η^{jk} der metrische Tensor ist. m_0 ist die nackte Masse der Fermionen und g die Kopplung. Es gilt $g = \pi - \beta^2/4$ [62, 64]. Dieser Zusammenhang ist nicht eindeutig, sondern hängt von der Normierung des Wechselwirkungsterms ab [19, 49, 81]. Hier wird die von Korepin benutzte Normierung verwendet, wie sie auch im Lehrbuch [63] zu finden ist. Mit dieser ergibt sich als zulässiger Bereich für die Kopplung $-\pi < g < \pi$. Für $g > 0$ ist die Wechselwirkung repulsiv, während sie für $g < 0$ attraktiv ist. Für $g = 0$ entspricht das massive Thirring-Modell freien Fermionen mit einer relativistischen Dispersionsrelation. Vergleicht man die zugehörigen Betheansatzgleichungen [7, 79], so gilt

für die Massen des massiven Thirring-Modells und des Sine-Gordon-Modells der Zusammenhang $m_0 = \sin(\gamma)M_0^2\delta/4$. Der Hamiltonoperator des massiven Thirring-Modells lautet

$$\mathcal{H} = \int_0^l dx \left[i\Psi^\dagger \sigma^z \partial_x \bar{\Psi} + m_0 \Psi^\dagger \sigma^x \Psi + 2g \Psi_1^\dagger \Psi_2^\dagger \Psi_2 \Psi_1 \right], \quad (3.4)$$

wobei l die Länge des Systems in Kontinuum bezeichnet. Für diesen Hamiltonoperator, den Impulsoperator

$$\mathcal{P} = -i \int_0^l dx \Psi^\dagger \partial_x \Psi \quad (3.5)$$

und den Teilchenzahloperator

$$\mathcal{Q} = \int_0^l dx \Psi^\dagger \Psi \quad (3.6)$$

lassen sich gemeinsame Eigenfunktionen konstruieren, die es erlauben, das Eigenwertproblem des Hamiltonoperators auf ein quantenmechanisches M -Teilchen-Problem abzubilden [63]

$$\mathcal{H} = \sum_{j=1}^M \left[i\sigma_j^z \frac{\partial}{\partial x_j} + m_0 \sigma_j^x \right] + 2g \sum_{j<k} \delta(x_j - x_k). \quad (3.7)$$

Dieses ist mittels des Koordinaten-Betheansatzes lösbar [7]. Die Betheansatzgleichungen lauten für periodische Randbedingungen eines Systems der Länge l

$$e^{-ilm_0 \operatorname{sh}(2\lambda_j)} = -(-)^{M-1} \prod_{k=1}^M \frac{\operatorname{sh}(\lambda_j - \lambda_k + i\gamma)}{\operatorname{sh}(\lambda_j - \lambda_k - i\gamma)}, \quad j = 1, \dots, M, \quad (3.8)$$

mit $\gamma = (\pi + g)/2$. Hierbei ist der Spektralparameter so gewählt, dass für $g > 0$ die zum Grundzustand gehörenden Betheansatzzahlen auf der reellen Achse liegen. Energie und Impuls sind gegeben durch

$$E = -m_0 \sum_{j=1}^M \operatorname{ch}(2\lambda_j), \quad (3.9a)$$

$$P = -m_0 \sum_{j=1}^M \operatorname{sh}(2\lambda_j). \quad (3.9b)$$

Wird das 6-Vertex-Modell, bzw. die zugehörige Transfermatrix (2.14), mit $\nu_j = (-)^j \theta$, $\eta = i\gamma$ und $L = l\delta$ betrachtet, so lassen sich die Betheansatzgleichungen für das massive Thirring-Modell reproduzieren [98]. Hierbei bezeichnet δ die Gitterkonstante. Die Masse m geht über den Staggeparameter

$$\theta = \frac{1}{2} \ln \left(\frac{2}{m\delta} \right) \quad (3.10)$$

ein. Das hier betrachtete Gitter ist in Abbildung 3.1 dargestellt.

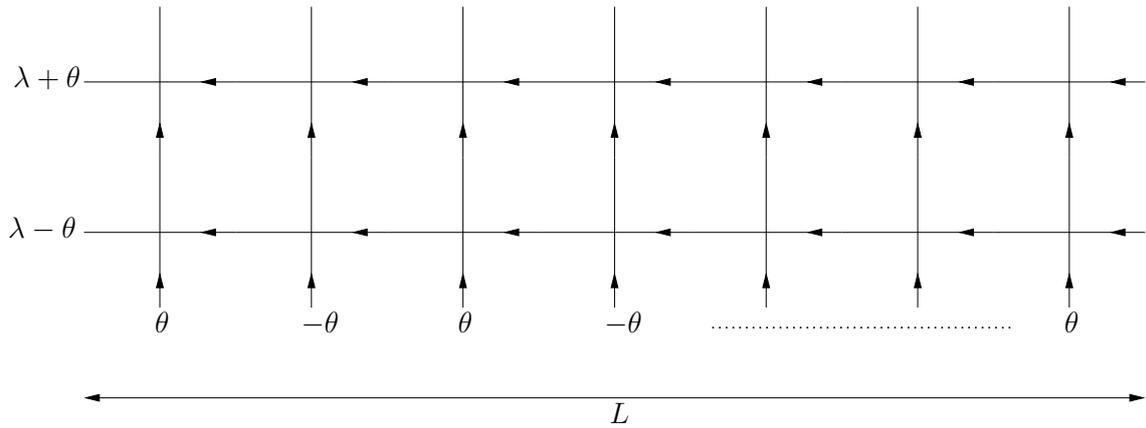


Abbildung 3.1.: Zum Sine-Gordon-Modell gehörendes gestagertes Gitter, die horizontalen Enden sind periodisch geschlossen.

Mit der obigen Wahl der Parameter ergibt sich aus Kapitel 2.2, dass die zum Pseudovakuum $|0\rangle = |\uparrow\rangle^{\otimes L}$ gehörenden Eigenfunktionen gegeben sind durch

$$a(\lambda) = 1 \quad \wedge \quad d(\lambda) = [b(\lambda - \theta)b(\lambda + \theta)]^{L/2}. \quad (3.11)$$

Wobei hier L als gerade vorausgesetzt wurde, genauer gesagt ist es für den weiteren Verlauf nötig, dass $L/2$ gerade ist. Damit der Grundzustand durch reelle Betheansatzzahlen gegeben ist, ist es erforderlich, eine Verschiebung der Betheansatzzahlen durchzuführen

$$\{|\lambda_j\rangle\} = B(\lambda_1 - i\gamma/2) \cdots B(\lambda_M - i\gamma/2)|0\rangle. \quad (3.12)$$

Damit ergibt sich aus (2.25)

$$\left[\frac{\text{sh}(\lambda_j - \theta + i\gamma/2) \text{sh}(\lambda_j + \theta + i\gamma/2)}{\text{sh}(\lambda_j - \theta - i\gamma/2) \text{sh}(\lambda_j + \theta - i\gamma/2)} \right]^{L/2} = - \prod_{k=1}^M \frac{\text{sh}(\lambda_j - \lambda_k + i\gamma)}{\text{sh}(\lambda_j - \lambda_k - i\gamma)}, \quad j = 1, \dots, M. \quad (3.13)$$

Im Kontinuumsimes, d.h. $\delta \rightarrow 0$ mit festem $l = L\delta$, folgt

$$e^{-ilm \sin(\gamma) \text{sh}(2\lambda_j)} = - \prod_{k=1}^M \frac{\text{sh}(\lambda_j - \lambda_k + i\gamma)}{\text{sh}(\lambda_j - \lambda_k - i\gamma)}, \quad (3.14)$$

was mit (3.8) nahezu übereinstimmt. Hierbei wurde vorausgesetzt, dass stets $\theta \gg \lambda_j \forall j$ gilt, was auch im Folgenden immer als gültig angenommen wird. Der zusätzliche Faktor $\sin(\gamma)$ ist offensichtlich nicht von weiterem Belang. Das zusätzliche Vorzeichen im Vergleich zu (3.8) entspricht einem Faktor -1 in der Zweiteilchenstreuung. Dies ist genau der Unterschied zwischen einer fermionischen und einer bosonischen Formulierung, bzw periodischen und antiperiodischen Randbedingungen. Die Randbedingungen sind für den thermodynamischen Limes nicht relevant und haben somit auch keinen Einfluss auf die Thermodynamik. Dieses Resultat ist bereits bekannt [22, 98], allerdings lässt sich in dem bisherigen Zugang zum Hamiltonoperator keine Quantentransfermatrix einführen¹.

¹Dort gilt der Zusammenhang $e^{i2\delta\mathcal{H}} = t(\theta)t^{-1}(-\theta)$ zwischen der Transfermatrix des 6-Vertex-Modells und dem Hamiltonoperator des massiven Thirring-Modells.

In dem hier betrachteten Kontinuumslimites ergibt sich der Hamiltonoperator über die logarithmische Ableitung der Transfermatrix. Es gilt

$$\mathcal{H} = \lim_{\delta \rightarrow 0} \frac{Ji \sin(\gamma)}{2} \frac{\partial}{\partial \lambda} \ln(t(\lambda + \theta)t(\lambda - \theta) |_{\lambda=0} \quad (3.15)$$

mit $J = \gamma/(\pi \sin(\gamma)\delta)$. Unter Verwendung von (2.26) findet sich für die Energie, ausgedrückt durch die Betheansatzzahlen,

$$E = - \lim_{\delta \rightarrow 0} \frac{J \sin^2(\gamma)}{2} \sum_{j=1}^M \left(\frac{1}{\text{sh}(\lambda_j - \theta - i\gamma/2) \text{sh}(\lambda_j - \theta + i\gamma/2)} + \frac{1}{\text{sh}(\lambda_j + \theta - i\gamma/2) \text{sh}(\lambda_j + \theta + i\gamma/2)} \right) \quad (3.16)$$

und nach Durchführung des Kontinuumslimites

$$E = - \frac{2\gamma \sin(\gamma)m}{\pi} \sum_{j=1}^M \text{ch}(2\lambda_j) \quad (3.17a)$$

$$=: \sum_{j=1}^M \varepsilon_0(\lambda_j). \quad (3.17b)$$

Aus (3.14) lässt sich der Impuls einer einzelnen Anregung ablesen zu $p_0(\lambda) = -m \sin(\gamma) \text{sh}(2\lambda)$. Damit ergibt sich im Kontinuum für *bare excitations*² die Dispersionsrelation

$$\varepsilon_0^2 = M^2 c^4 + p_0^2 c^2 \quad (3.18)$$

mit $c = 2\gamma/\pi$ und $M = m\pi \sin(\gamma)/2\gamma$. Dies ist in Übereinstimmung mit dem Zugang aus der XYZ-Kette [34].

3.1. Dispersionsrelationen auf dem Gitter und im Kontinuum

Die auf den ersten Blick irritierende Tatsache, dass als Kontinuumslimites einer kritischen Theorie auf dem Gitter, dem 6-Vertex-Modell, eine massive Theorie gefunden werden kann, lässt sich durch Betrachtung der Dispersionsrelation auf dem Gitter verstehen.

Der Impuls k_0^G der *bare excitations* auf dem Gitter ist durch die Betheansatzgleichungen (3.13), genauer gesagt durch die Beziehung

$$e^{-ik_0^G(\lambda)L} = \left[\frac{\text{sh}(\lambda - \theta + i\gamma/2) \text{sh}(\lambda + \theta + i\gamma/2)}{\text{sh}(\lambda - \theta - i\gamma/2) \text{sh}(\lambda + \theta - i\gamma/2)} \right]^{L/2}, \quad (3.19)$$

gegeben. Die zugehörige Energie ist durch (3.16) bestimmt

$$\varepsilon_0^G(\lambda) = - \frac{\gamma \sin(\gamma)}{2\pi} \left(\frac{1}{\text{sh}(\lambda - \theta - i\gamma/2) \text{sh}(\lambda - \theta + i\gamma/2)} + \frac{1}{\text{sh}(\lambda + \theta - i\gamma/2) \text{sh}(\lambda + \theta + i\gamma/2)} \right). \quad (3.20)$$

²Zwar gibt es im Deutschen den Begriff der „nackten Anregung“, jedoch gibt es keine gebräuchliche deutsche Übersetzung für *dressed energy*, sodass hier aus Konsistenzgründen ebenfalls der englische Begriff verwendet wird.

Die einfachste Methode, die Dispersionsrelation herzuleiten, besteht darin, die Polstellen der Funktionen zu betrachten. Da sich im Kontinuumsmites eine relativistische Dispersion ergeben soll, muss das Quadrat der Energie ε_0^G eingehen. Diese hat Polstellen erster und zweiter Ordnung an den Stellen $\lambda = \pm(\theta \pm i\gamma)$. Weil sie aber eine gerade Funktion ist, ist es ausreichend, die Polstellen $\lambda = \theta \pm i\gamma$ zu betrachten. Zusammen mit der Tatsache, dass es jeweils Pole erster und zweiter Ordnung gibt, sind vier Koeffizienten zu bestimmen. Die gleiche Analyse auf Polstellen wird für die Funktionen ε_0^G , $\cos(2k_0^G)$, $\cos(4k_0^G)$ und $\varepsilon_0^G \cos(2k_0^G)$ durchgeführt, wobei hier π -periodische Funktionen als Ansatz gewählt werden, da das Gitter periodisch für Übernächste-Nachbarplätze ist. Dies ist in Abbildung 3.1 zu sehen, wo direkt zu erkennen ist, dass die Einheitszelle aus 2×2 Gitterplätzen besteht. Mit dem Ansatz, $(\varepsilon_0^G)^2$ linear durch diese vier Funktionen auszudrücken

$$\begin{aligned} \left(\frac{2\pi}{\gamma \sin(\gamma)} \varepsilon_0^G \right)^2 = & -A(\theta, \gamma) \left(\frac{2\pi}{\gamma \sin(\gamma)} \varepsilon_0^G \right) - B(\theta, \gamma) \left(\frac{2\pi}{\gamma \sin(\gamma)} \varepsilon_0^G \right) \cos(2k_0^G) \\ & + C(\theta, \gamma) [\cos(2k_0^G) - \cos(2\gamma)] + D(\theta, \gamma) [\cos(4k_0^G) - \cos(4\gamma)] , \end{aligned} \quad (3.21)$$

ergibt sich ein lineares Gleichungssystem für die vier Koeffizienten. Die Terme $-C(\theta, \gamma) \cos(2\gamma)$ und $-D(\theta, \gamma) \cos(4\gamma)$ sind durch die Tatsache motiviert, dass die Energie ε_0^G für $\lambda \rightarrow \pm\infty$ verschwindet, während k_0^G in diesem Limes gegen $\pm\gamma$ geht und sorgen dafür, dass der Ansatz in diesem Grenzfall erfüllt ist. Nachdem das lineare Gleichungssystem für die Koeffizienten in obiger Gleichung gelöst ist, muss anschließend die gefundene Identität (3.21) verifiziert werden. Nach Auflösen der quadratischen Gleichung ergibt sich die Dispersionsrelation für *bare excitations* zu

$$\begin{aligned} \varepsilon_0^G = & -\frac{\gamma \sin(\gamma)}{4\pi} (A(\theta, \gamma) + B(\theta, \gamma) \cos(2k_0^G)) \pm \frac{\gamma \sin(\gamma)}{4\pi} \left[(A(\theta, \gamma) + B(\theta, \gamma) \cos(2k_0^G))^2 \right. \\ & \left. + 4 (C(\theta, \gamma)(\cos(2k_0^G) - \cos(2\gamma)) + D(\theta, \gamma)(\cos(4k_0^G) - \cos(4\gamma)))^2 \right]^{1/2} , \end{aligned} \quad (3.22)$$

wobei A, B, C, D rationale Funktionen in $e^{\pm\theta}$ und $e^{\pm i\gamma}$ sind

$$\begin{aligned} A(\theta, \gamma) = & \frac{4 \cos(\gamma)}{\sin^2(\gamma)} + \frac{1}{\operatorname{sh}(2\theta)} \left(\frac{1}{\operatorname{sh}(2\theta - i\gamma)} + \frac{1}{\operatorname{sh}(2\theta + i\gamma)} \right) \\ & + \frac{i}{\sin(\gamma)} (\operatorname{cth}(2\theta + i\gamma) - \operatorname{cth}(2\theta - i\gamma)) , \end{aligned} \quad (3.23a)$$

$$B(\theta, \gamma) = \frac{-2 \operatorname{sh}(2\theta)}{\sin^2(\gamma)} \left(\frac{1}{\operatorname{sh}(2\theta + i\gamma)} + \frac{1}{\operatorname{sh}(2\theta - i\gamma)} \right) , \quad (3.23b)$$

$$\begin{aligned} C(\theta, \gamma) = & \frac{4 \cos(\gamma) \operatorname{sh}(2\theta)}{\sin^4(\gamma)} \left(\frac{1}{\operatorname{sh}(2\theta + i\gamma)} + \frac{1}{\operatorname{sh}(2\theta - i\gamma)} \right) - \frac{4}{\operatorname{sh}(2\theta + i\gamma) \operatorname{sh}(2\theta - i\gamma)} \\ & + \frac{2i \operatorname{ch}(2\theta)}{\sin^3(\gamma)} \left(\frac{1}{\operatorname{sh}(2\theta + i\gamma)} - \frac{1}{\operatorname{sh}(2\theta - i\gamma)} \right) \\ & + \frac{2i \operatorname{sh}(2\theta)}{\sin^3(\gamma)} \left(\frac{\operatorname{ch}(2\theta + i\gamma)}{\operatorname{sh}(2\theta + i\gamma) \operatorname{sh}(2\theta - i\gamma)} - \frac{\operatorname{ch}(2\theta - i\gamma)}{\operatorname{sh}(2\theta + i\gamma) \operatorname{sh}(2\theta - i\gamma)} \right) , \end{aligned} \quad (3.23c)$$

und

$$D(\theta, \gamma) = \frac{-2 \operatorname{sh}^2(2\theta)}{\sin^4(\gamma) \operatorname{sh}(2\theta + i\gamma) \operatorname{sh}(2\theta - i\gamma)} . \quad (3.23d)$$

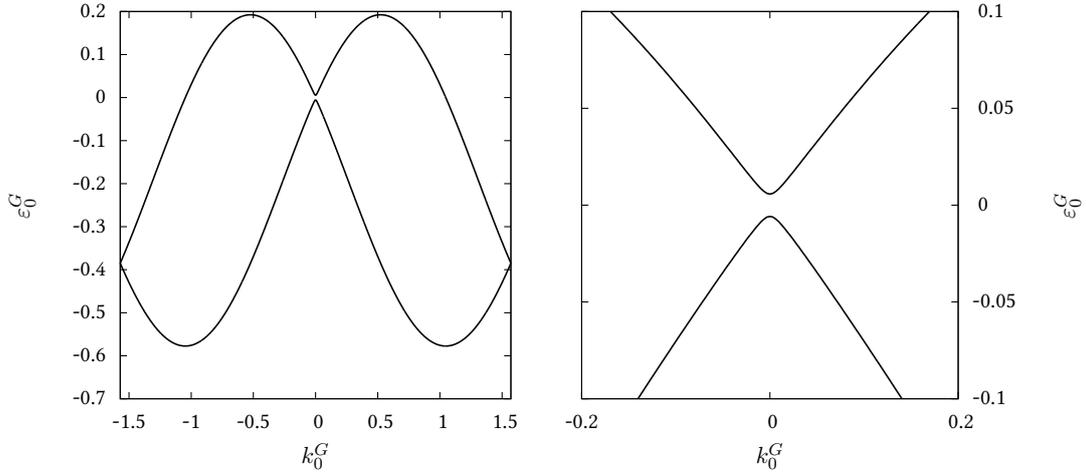


Abbildung 3.2.: Die Dispersionsrelation für *bare excitations* auf dem Gitter für $m = 1$, $\gamma = \frac{\pi}{3}$ und $\delta = 0.01$ in den Gittervariablen ε_0^G und k_0^G .

In Abbildung 3.2 ist diese Dispersionsrelation beispielhaft für $m = 1$, $\gamma = \frac{\pi}{3}$ und $\delta = 0.01$ gezeigt. Die Gitterkonstante δ geht über die Inhomogenität θ ein. Im linken Bild ist die Dispersionsrelation für die ganze Brillouin-Zone gezeigt, während in der rechten Abbildung der Bereich um den Ursprung vergrößert dargestellt ist. Hierbei ist zunächst auffällig, dass es nach wie vor kritische Anregungen gibt, nämlich bei $k_0^G = \pm\gamma$. Diese sind jedoch durch die Staggerung des Gitters und die Tatsache, dass die logarithmische Ableitung der Transfermatrix $t(\lambda)$ nicht für $\lambda = 0$, sondern an den Stellen $\lambda = \pm\theta$ ausgewertet wird, vom Ursprung weg und näher zum Rand hin verschoben. Dies ist ähnlich zum Zugang über die XYZ-Kette³, in dem der Spektralparameter, der für die XYZ-Kette verwendet wird, so verschoben wird, dass der neue Ursprung sich am vorherigen Rand der elliptischen Funktionen befindet und deren Periodizität ausgenutzt wird [34]. Im Bereich um den Ursprung ist im linken Bild in Abbildung 3.2 gut zu erkennen, dass dort eine Anregungslücke vorhanden ist.

Um verstehen zu können, wie die auf dem Gitter stets vorhandenen lückenlosen Anregungen im Kontinuumsliches verschwinden, muss der Zusammenhang zwischen Impuls und Energie auf dem Gitter und im Kontinuum beachtet werden. Es gilt $\varepsilon_0^G = \delta\varepsilon_0^K$ und $k_0^G = \delta k_0^K$, daher muss diese Ersetzung in der obigen Dispersionsgleichung (3.22) vorgenommen und um $\delta = 0$ entwickelt werden. Das führt auf die Relation

$$\varepsilon_0^K = \pm\sqrt{M^2c^4 + (k_0^K)^2c^2} + O(\delta), \quad M = \frac{\sin(\gamma)\pi m}{2\gamma}, \quad c = \frac{2\gamma}{\pi} \quad (3.24)$$

im Kontinuum. Sie stimmt mit der Dispersionsrelation (3.18), die direkt in den Kontinuumsvariablen hergeleitet wurde, in führender Ordnung in δ überein.

Um den Effekt der Reskalierung der Energie- und Impulsvariablen besser verstehen zu können, ist in Abbildung 3.3 die exakte Dispersionsrelation auf dem Gitter (3.22) unter Verwendung der Kontinuumsvariablen dargestellt. Hier wurde wiederum $m = 1$ und $\gamma = \pi/3$ gewählt und es sind die Kurven für $\delta = 0.01$ und $\delta = 0.0001$ zu sehen. Des Weiteren ist die Kurve (3.24) für den Grenzfall $\delta \rightarrow 0$ abgebildet. Hierbei ist im linken Bild zu erkennen, dass sich die Dispersionsrelationen global

³Eine kurze Beschreibung, wie das Sine-Gordon-Modell als Kontinuumsliches des XYZ-Kette konstruiert werden kann, findet sich im Anhang A.2.

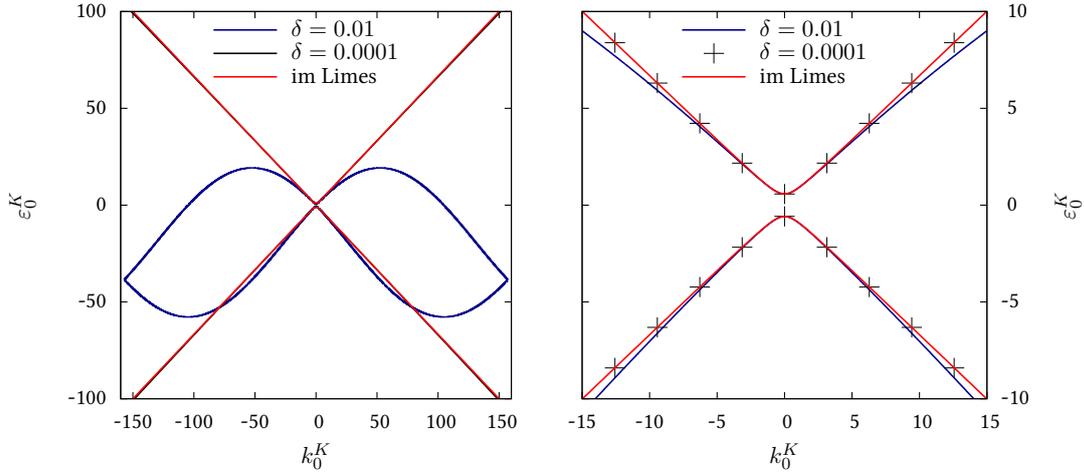


Abbildung 3.3.: Die Dispersionsrelation für *bare excitations* auf dem Gitter für $m = 1$ und $\gamma = \frac{\pi}{3}$ in den Kontinuumsvariablen ε_0^K und k_0^K .

betrachtet stark unterscheiden. Insbesondere ist das zulässige Intervall für den Impuls umso kleiner, je größer die Gitterkonstante ist. Allerdings ist hier auch für relativ große Werte des Impulses eine gute Übereinstimmung der Kurve im Kontinuumsliches mit derjenigen für $\delta = 0.0001$ zu erkennen. Die lückenlosen Anregungen existieren auch nach der Umskalierung weiter, wie die Kurve für $\delta = 0.01$ zeigt. Im rechten Bild ist zu sehen, dass für sehr kleine Werte des Impulses die Kurven für die unterschiedlichen Gitterkonstanten innerhalb der Genauigkeit der Abbildung übereinstimmen, sich ab $|k_0^K| \approx 5$ jedoch unterscheiden.

Dies bedeutet, dass es auf dem Gitter stets kritische Anregungen gibt, welche jedoch mit kleiner werdender Gitterkonstante zu immer größer werdenden Impulsen im Kontinuum gehören. Sollen also Resultate einer Rechnung auf dem Gitter mit denen einer Rechnung im Kontinuumsliches verglichen werden, so muss gewährleistet sein, dass δ klein genug ist, damit nur der asymptotische Bereich der Dispersionskurve für die Rechnung relevant ist.

Das Sine-Gordon-Modell besitzt als Quantenfeldtheorie eine ultraviolette Divergenz. Dies bedeutet, dass der für Rapiditäten zulässige Bereich auf ein endliches Intervall beschränkt werden muss. Die erforderliche Regularisierung lässt sich auf unterschiedliche Arten durchführen, siehe [8, 63, 70, 79, 98]. Sie ist durch die Forderung bestimmt, dass die Dichtefunktion bei $T=0$ endlich sein muss, bzw. dass die zugehörigen physikalischen Anregungen, die sogenannten *dressed excitations*, eine endliche Masse haben. Dies kann sich zum einen dadurch umgesetzt werden, dass das Integrationsintervall in den linearen Integralgleichungen für den Grundzustand endlich ist und die nackte Masse m_0 in Abhängigkeit von den Integrationsgrenzen exponentiell verschwindet [63]. Zum anderen kann dies im Zugang des gestaggerten 6-Vertex-Modells auch dadurch erreicht werden, dass der Parameter θ reskaliert wird [98]. Hier soll das zweite Verfahren verwendet werden. Das reskalierte θ lautet

$$\theta = \frac{\gamma}{\pi} \ln \left(\frac{2}{m\delta} \right), \quad (3.25)$$

wobei m die renormierte Masse der physikalischen Anregungen bezeichnet. Im weiteren Verlauf wird daher dieses reskalierte θ verwendet. Um dies zu begründen, wird die lineare Integralgleichung

der *dressed density* vor Durchführung des Kontinuumslimites betrachtet. Sie lautet

$$\rho^G(\lambda) + \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} K_{i\gamma}(\lambda - \mu) \rho^G(\mu) = \frac{1}{4\pi} [K_{i\gamma/2}(\lambda - \theta) + K_{i\gamma/2}(\lambda + \theta)] , \quad (3.26)$$

mit

$$K_\eta = \frac{\text{sh}(2\eta)}{i \text{sh}(\lambda + \eta) \text{sh}(\lambda - \eta)} \quad (3.27)$$

und hat für $\pi/2 < \gamma < \pi$ die Lösung

$$\rho^G(\lambda) = \frac{1}{4\gamma} \left[\frac{1}{\text{ch}(\frac{\pi}{\gamma}(\lambda - \theta)) + \text{ch}(\frac{\pi}{\gamma}(\lambda + \theta))} \right] . \quad (3.28)$$

Hieraus ergibt sich unmittelbar, dass der Kontinuumslimites mit θ aus (3.25) wohldefiniert ist und das Resultat

$$\rho^K(\lambda) = \frac{2m}{\gamma} \text{ch}\left(\frac{\pi}{\gamma}\lambda\right) \quad (3.29)$$

liefert, wobei hier ebenfalls die Beziehung $\rho^G = \delta\rho^K$ für die Dichte auf dem Gitter und im Kontinuum gilt. Für $0 < \gamma < \pi/2$ müssen für den Grundzustand auch Strings von Betheansatzzahlen berücksichtigt werden [62].

Der Vergleich der *dressed excitations* auf dem Gitter mit denen im Kontinuum kann damit analog zu dem der *bare excitations* erfolgen. Die zugehörigen Rechnungen sind analog zu denen der XXZ-Kette, wie sie beispielsweise im Lehrbuch [63] zu finden sind.

Für die *dressed energy* auf dem Gitter ergibt sich

$$\varepsilon^G(\lambda) = -\frac{1}{2} \left[\frac{1}{\text{ch}(\frac{\pi}{\gamma}(\lambda - \theta))} + \frac{1}{\text{ch}(\frac{\pi}{\gamma}(\lambda + \theta))} \right] , \quad (3.30)$$

und der zugehörige Impuls ist gegeben durch

$$k^G(\lambda) = -\frac{1}{2} \left[\pi - 2 \arctan \left(\frac{\text{ch}(\frac{\pi}{\gamma}\theta)}{\text{sh}(\frac{\pi}{\gamma}\lambda)} \right) \right] . \quad (3.31)$$

Hier ist die Herleitung der Dispersionsrelation einfacher als für die *bare excitations*, da sich die Beziehung zwischen Impuls und Spektralparameter leicht invertieren lässt. Damit ergibt sich die Dispersionsrelation auf dem Gitter zu

$$\varepsilon^G = -\frac{1}{2} \left(\frac{1}{\text{ch} \left[\text{arsh} \left(\text{ch}(\frac{\pi}{\gamma}\theta) \tan(k^G) \right) - \frac{\pi}{\gamma}\theta \right]} + \frac{1}{\text{ch} \left[\text{arsh} \left(\text{ch}(\frac{\pi}{\gamma}\theta) \tan(k^G) \right) + \frac{\pi}{\gamma}\theta \right]} \right) . \quad (3.32)$$

Im Kontinuumslimites lauten die zugehörigen, mit der Gitterkonstanten reskalierten Größen,

$$\varepsilon^K(\lambda) = -m \text{ch}\left(\frac{\pi}{\gamma}\lambda\right) \quad (3.33)$$

und

$$k^K(\lambda) = -m \text{sh}\left(\frac{\pi}{\gamma}\lambda\right) . \quad (3.34)$$

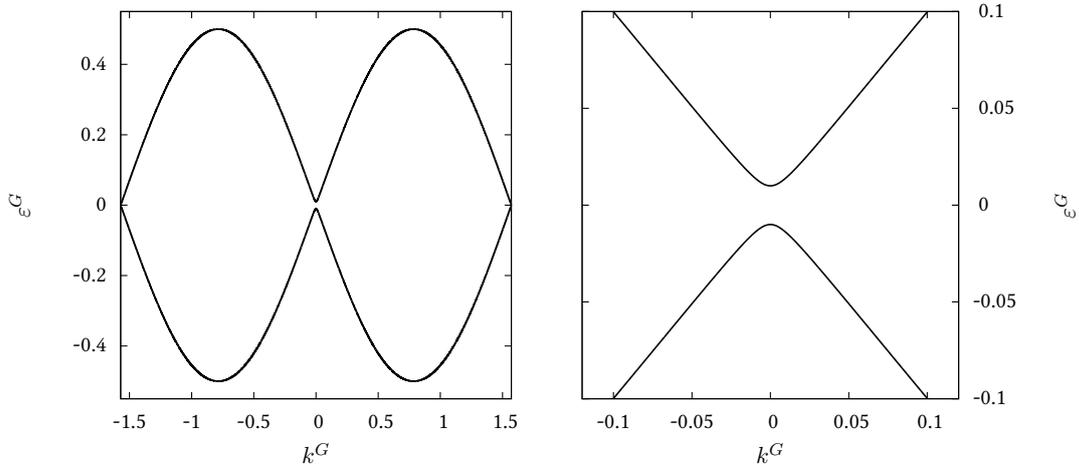


Abbildung 3.4.: Die Dispersionsrelation für *dressed excitations* auf dem Gitter für $m = 1$, $\gamma = \frac{\pi}{3}$ und $\delta = 0.01$ in den Gittervariablen ε^G und k^G .

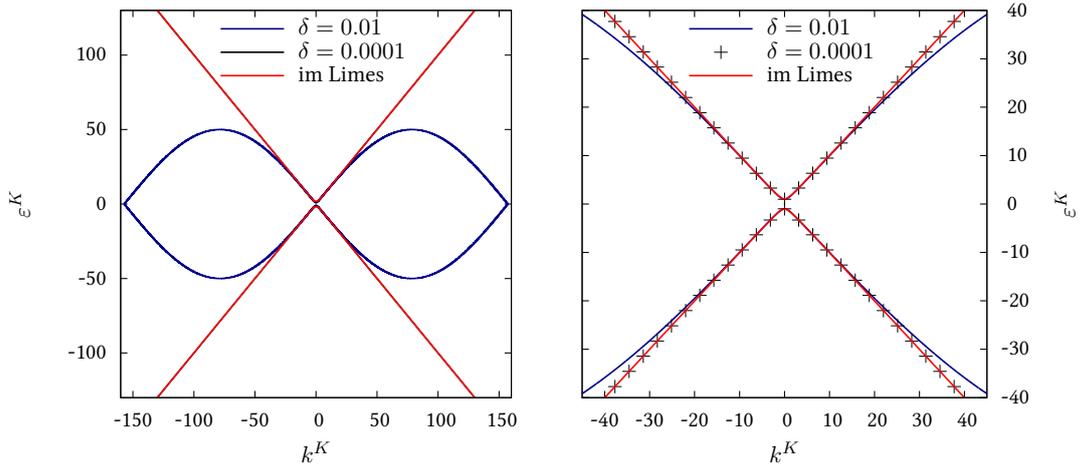


Abbildung 3.5.: Die Dispersionsrelation für *dressed excitations* auf dem Gitter für $m = 1$ und $\gamma = \frac{\pi}{3}$ in den Kontinuumsvariablen ε^K und k^K .

Für die Dispersionsrelation folgt

$$\varepsilon^K = \pm \sqrt{m^2 + (k^K)^2}. \quad (3.35)$$

Damit erfüllen auch die *dressed excitations* eine relativistische Dispersionsrelation, allerdings mit der Lichtgeschwindigkeit $c = 1$, die sich von derjenigen der *bare excitations* unterscheidet. Dies ist analog zu den Anregungen der XXZ-Kette [32].

In den Abbildungen 3.4 und 3.5 ist die Dispersionskurve (3.32) auf dem Gitter für die *dressed excitations* zu sehen. Die beiden Abbildungen entsprechen den obigen Abbildungen 3.2 und 3.3 für die *bare excitations*. Abbildung 3.4 zeigt die Dispersionsrelation als Funktion der Gittervariablen ε^G und k^G für $\gamma = \pi/3$, $m = 1$ und $\delta = 0.01$. Auch hier gibt es für große Impulse, genauer bei $k^G = \pm\pi/2$, lückenlose Anregungen auf dem Gitter, wie im linken Bild zu sehen ist. Es entsteht jedoch eine An-

regungslücke im Bereich kleiner Impulse, wie das rechte Bild zeigt. Im Vergleich zu Abbildung 3.2 ist auffällig, dass für die *dressed excitations* die beiden Zweige der Energie symmetrisch bezüglich der Achse $\varepsilon^G = 0$ sind, was für die *bare excitations* nicht zutrifft.

Abbildung 3.5 zeigt die Dispersionsrelation auf dem Gitter (3.32) in den Kontinuumsvariablen ε^K und k^K für verschiedene Gitterkonstanten, sowie die exakte Lösung (3.35) im Kontinuumslimites. Hier ist im linken Bild, analog zum linken Bild in Abbildung 3.3 für *bare excitations*, zu erkennen, dass die Dispersionsrelation global betrachtet von der Gitterkonstanten abhängig ist. Für Werte des Impulses in der Nähe des Ursprungs konvergiert sie gegen die Lösung im Kontinuumslimites, wie das rechte Bild zeigt. Hierbei ist im Vergleich zu den Kurven für die *bare excitations* in Abbildung 3.3 auffällig, dass die Kurven für $\delta = 0.01$ und $\delta = 0.0001$ bei den *dressed excitations* erst bei deutlich größeren Werten des Impulses voneinander abweichen.

4. Nichtlineare Integralgleichungen für das Sine-Gordon-Modell

In diesem Kapitel werden nichtlineare Integralgleichungen für den im vorigen Kapitel dargestellten Zugang zum Sine-Gordon-Modell hergeleitet. Dabei wird sowohl der Grundzustand mittels der gewöhnlichen Transfermatrix, als auch die freie Energie mittels des Quantentransfermatrixzugangs aus Kapitel 2.3 behandelt.

4.1. Thermodynamik

Zuerst sollen die Integralgleichungen, die die Thermodynamik beschreiben, diskutiert werden. Hierbei gibt es eine Unterscheidung in Abhängigkeit von der Wechselwirkung zu beachten, nämlich die Fälle $0 < \gamma < \pi/2$ und $\pi/2 < \gamma < \pi$. Dies ergibt sich bereits aus den zu berechnenden Hilfsfunktionen. Zunächst wird die Hilfsfunktion

$$\mathbf{a}(x) = \frac{\varphi(x + i\tau)\varphi(x - i\tau - i\gamma) Q(x + i\gamma)}{\varphi(x - i\tau)\varphi(x + i\tau + i\gamma) Q(x - i\gamma)} \quad (4.1)$$

definiert. Die für eine numerische Behandlung geeigneten Funktionen sind für $0 < \gamma < \pi/2$ durch

$$\mathbf{b}(x) = \mathbf{a}(x + i\gamma/2) \quad \wedge \quad \bar{\mathbf{b}}(x) = 1/\mathbf{a}(x - i\gamma/2) \quad (4.2)$$

gegeben, während für $\pi/2 < \gamma < \pi$ die Funktionen

$$\mathbf{b}(x) = \mathbf{a}(x + i(\pi - \gamma)/2) \quad \wedge \quad \bar{\mathbf{b}}(x) = 1/\mathbf{a}(x - i(\pi - \gamma)/2) \quad (4.3)$$

definiert werden. Diese Unterscheidung ist prinzipiell auch bei einem auf den vertikalen Linien nicht gestagerten Gitter, wie es bei der XXZ-Kette vorliegt, nötig. Dort ist es jedoch so, dass unter Ausnutzung der Symmetrie $\mathcal{H}_{XXZ}(J, \Delta) \simeq \mathcal{H}_{XXZ}(-J, -\Delta)$ der Bereich für $\pi/2 < \gamma < \pi$ durch Einführen eines negativen Kopplungsparameters J bzw. einer negativen Temperatur auf den Bereich $0 < \gamma < \pi/2$ abgebildet werden kann. Die resultierenden Gleichungen erweisen sich typischerweise als besser geeignet für numerische Berechnungen [57]. Für das Sine-Gordon-Modell ist dies nicht möglich, sodass diese Fälle hier getrennt behandelt werden müssen.

Hier soll als erstes der Fall $0 < \gamma < \pi/2$, d.h. repulsive Wechselwirkung, besprochen werden. Die zugehörige Rechnung ist analog zu derjenigen für die gewöhnliche Transfermatrix des 6-Vertex-Modells [60] und wird im Anhang A.1 skizziert.

Im Prinzip läuft die Änderung darauf hinaus, dass die Inhomogenität $DT(x)$ der Gleichungen für ein auf den vertikalen Linien homogenes Gitter, welches der XXZ-Kette entspricht, durch $(DT(x + \theta) + DT(x - \theta))/2$ ersetzt wird und zusätzlich der Kontinuumsliches durchzuführen ist. Somit lauten die nichtlinearen Integralgleichungen nach dem Trotter-Limes und vor Durchführung des

Kontinuumsliches für $0 < \gamma < \pi/2$

$$\ln \mathfrak{b}(x) = -\frac{J\pi \sin(\gamma)}{T2\gamma} \left[\frac{1}{\operatorname{ch}(\frac{\pi}{\gamma}(x+\theta))} + \frac{1}{\operatorname{ch}(\frac{\pi}{\gamma}(x-\theta))} \right] + \frac{1}{2\pi} K * \ln(1 + \mathfrak{b})(x) - \frac{1}{2\pi} K^+ * \ln(1 + \bar{\mathfrak{b}})(x), \quad (4.4a)$$

$$\ln \bar{\mathfrak{b}}(x) = -\frac{J\pi \sin(\gamma)}{T2\gamma} \left[\frac{1}{\operatorname{ch}(\frac{\pi}{\gamma}(x+\theta))} + \frac{1}{\operatorname{ch}(\frac{\pi}{\gamma}(x-\theta))} \right] + \frac{1}{2\pi} K * \ln(1 + \bar{\mathfrak{b}})(x) - \frac{1}{2\pi} K^- * \ln(1 + \mathfrak{b})(x). \quad (4.4b)$$

Hierbei bezeichnet $*$ eine Faltung

$$f * g(x) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x-y)g(y)dy \quad (4.5)$$

und

$$K(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\operatorname{sh}((\frac{\pi}{2} - \gamma)k)}{2 \operatorname{sh}(\frac{\pi-\gamma}{2}k) \operatorname{ch}(\frac{\gamma}{2}k)} e^{ikx} dk \quad (4.6a)$$

$$K^{\pm}(x) = K(x \pm i\gamma^-) \quad (4.6b)$$

die Integrationskerne. γ^- bezeichnet ein infinitesimal verkleinertes γ . Dies ist für die numerische Behandlung der Gleichungen, die größtenteils im Fourierraum erfolgt, ohne Relevanz. Für eine genauere Begründung sei auf den Anhang A.1 verwiesen. Im Kontinuumsliches ergibt sich dann

$$\ln \mathfrak{b}(x) = -\frac{m}{T} \operatorname{ch}(\frac{\pi}{\gamma}x) + \frac{1}{2\pi} K * \ln(1 + \mathfrak{b})(x) - \frac{1}{2\pi} K^+ * \ln(1 + \bar{\mathfrak{b}})(x), \quad (4.7a)$$

$$\ln \bar{\mathfrak{b}}(x) = -\frac{m}{T} \operatorname{ch}(\frac{\pi}{\gamma}x) + \frac{1}{2\pi} K * \ln(1 + \bar{\mathfrak{b}})(x) - \frac{1}{2\pi} K^- * \ln(1 + \mathfrak{b})(x). \quad (4.7b)$$

Hierbei findet sich das von der XXZ-Kette vertraute Verhalten, dass die Inhomogenität der Integralgleichungen durch ε/T gegeben ist, wobei ε die *dressed energy* (3.33) bezeichnet.

Bei der freien Energie ist im Vergleich zur XXZ-Kette zusätzlich zu beachten, dass für die Berechnung der freien Energie die Quantentransformmatrix nicht an der Stelle Null, sondern an den Stellen $\pm\theta$ auszuwerten ist, vergleiche Gleichung (2.41c). Es ergibt sich für die freie Energie vor Durchführung des Kontinuumsliches

$$f = -\frac{\gamma}{\pi\delta^2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\operatorname{sh}(\frac{\pi-\gamma}{2}k)}{2 \operatorname{sh}(\frac{\pi}{2}k) \operatorname{ch}(\frac{\gamma}{2}k)} \cos^2(\theta k) dk - \frac{T}{4\gamma\delta} \int_{-\infty}^{\infty} \left[\frac{1}{\operatorname{ch}(\frac{\pi}{\gamma}(\theta-x))} + \frac{1}{\operatorname{ch}(\frac{\pi}{\gamma}(\theta+x))} \right] \ln([1 + \mathfrak{b}(x)][1 + \bar{\mathfrak{b}}(x)]) dx. \quad (4.8)$$

Dies geht für $\delta \rightarrow 0$ in

$$f = e_0 - \frac{mT}{2\gamma} \int_{-\infty}^{\infty} \text{ch}\left(\frac{\pi}{\gamma}x\right) \ln\left([1 + \mathfrak{b}(x)][1 + \bar{\mathfrak{b}}(x)]\right) dx \quad (4.9)$$

über. Dabei ist

$$e_0 = - \lim_{\delta \rightarrow 0} \frac{\gamma}{\pi\delta^2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\text{sh}\left(\frac{\pi-\gamma}{2}k\right)}{2 \text{sh}\left(\frac{\pi}{2}k\right) \text{ch}\left(\frac{\gamma}{2}k\right)} \cos^2(\theta k) dk \quad (4.10)$$

die divergente Grundzustandsenergie.

Nun sollen die nichtlinearen Integralgleichungen für $\pi/2 < \gamma < \pi$, d.h. attraktive Wechselwirkung, besprochen werden. Die zugehörige Rechnung findet sich im Anhang A.1. Sie ist im Vergleich zur Rechnung für $0 < \gamma < \pi/2$ nur leicht zu modifizieren. Die nichtlinearen Integralgleichungen im Kontinuum lauten

$$\ln \mathfrak{b}(x) = \frac{m}{T} \text{ch}\left(\frac{\pi}{\gamma}(x + i\pi/2)\right) + \frac{1}{2\pi} K * \ln(1 + \mathfrak{b})(x) - \frac{1}{2\pi} \hat{K}^+ * \ln(1 + \bar{\mathfrak{b}})(x), \quad (4.11a)$$

$$\ln \bar{\mathfrak{b}}(x) = \frac{m}{T} \text{ch}\left(\frac{\pi}{\gamma}(x - i\pi/2)\right) + \frac{1}{2\pi} K * \ln(1 + \bar{\mathfrak{b}})(x) - \frac{1}{2\pi} \hat{K}^- * \ln(1 + \mathfrak{b})(x). \quad (4.11b)$$

Der Integrationskern K auf der Diagonalen ist wiederum durch (4.6a) gegeben, während die nicht-diagonalen Einträge der Kernmatrix¹ gegeben sind durch

$$\hat{K}^{\pm}(x) = K(x \pm i(\pi - \gamma)^-). \quad (4.12)$$

Im Vergleich zu den Gleichungen (4.7) für $0 < \gamma < \pi/2$ ist hier vor allem zu beachten, dass die Inhomogenitäten nicht mehr rein reell, sondern im Allgemeinen komplexwertig sind. Darüber hinaus unterscheiden sich die nichtdiagonalen Integrationskerne \hat{K}^{\pm} leicht von K^{\pm} in (4.7). Die Inhomogenitäten unterscheiden sich jedoch nur durch eine Verschiebung des Spektralparameters, genauer gesagt durch einen zusätzlichen Imaginärteil, der sich für \mathfrak{b} und $\bar{\mathfrak{b}}$ unterscheidet. Diese Modifikation ist am einfachsten im Fourierraum zu erkennen, in dem sich diese Änderung nur durch einen zusätzlichen Faktor $e^{\pm k(\gamma - \pi/2)}$ bemerkbar macht, vergleiche die Gleichungen (A.15) und (A.16) mit (A.23). Die freie Energie ist dann gegeben durch

$$f = e_0 + \frac{mT}{2\gamma} \int_{-\infty}^{\infty} \left[\text{ch}\left(\frac{\pi}{\gamma}(x + i\pi/2)\right) \ln(1 + \mathfrak{b}(x)) + \text{ch}\left(\frac{\pi}{\gamma}(x - i\pi/2)\right) \ln(1 + \bar{\mathfrak{b}}(x)) \right] dx, \quad (4.13)$$

wobei e_0 die gleiche Form hat, wie im Fall $0 < \gamma < \pi/2$, und somit durch (4.10) gegeben ist. Die Ausdrücke für die freie Energie für die beiden Parameterbereich unterscheiden sich durch die Integrationskerne, bzw. durch die Tatsache, dass das Argument der Kerne hier verschoben ist. Diese Verschiebung entspricht derjenigen der Inhomogenitäten der nichtlinearen Integralgleichungen. Wird dieser Ausdruck als Faltung betrachtet

$$f = e_0 + \frac{mT}{2\gamma} \left[\text{ch}\left(\frac{\pi}{\gamma}(x - i\pi/2)\right) * \ln(1 + \mathfrak{b})(0) + \text{ch}\left(\frac{\pi}{\gamma}(x + i\pi/2)\right) * \ln(1 + \bar{\mathfrak{b}})(0) \right], \quad (4.14)$$

¹Diese Bezeichnung der Integrationskerne als diagonale und nichtdiagonale Einträge der Kernmatrix erklärt sich direkt, wenn in (4.11) die Hilfsfunktionen als Einträge eines Vektors aufgefasst werden. Die einzelnen Faltungen lassen sich dann als Faltung einer Kernmatrix mit dem Vektor der Funktionen $\ln(1 + \mathfrak{b})$ und $\ln(1 + \bar{\mathfrak{b}})$ auffassen.

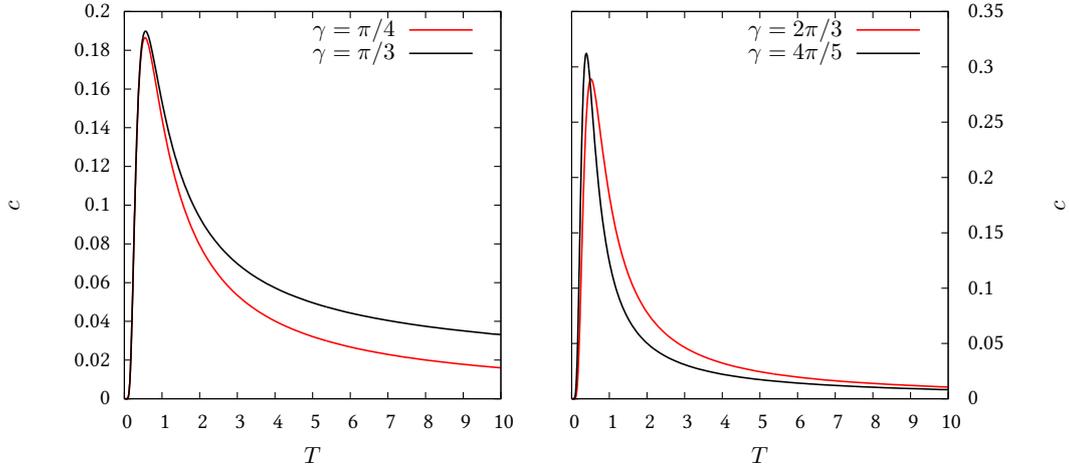


Abbildung 4.1.: Die spezifische Wärme für das Sine-Gordon-Modell für $m = 1$ und verschiedene Kopplungen, wobei die spezifische Wärme eines Gases massiver freier Bosonen abgezogen wurde.

so ist die folgende Struktur zu erkennen. Die Inhomogenitäten der einen Hilfsfunktion, beispielsweise $\ln \mathfrak{b}$, gehen als Integrationskerne der anderen Hilfsfunktion, hier entsprechend $\ln(1 + \bar{\mathfrak{b}})$, in die Berechnung des Eigenwertes bzw. der freien Energie ein. Dies ist für $0 < \gamma < \pi/2$ natürlich auch der Fall, da dort die Inhomogenitäten für beide Integralgleichungen identisch sind. Diese Struktur findet sich aber auch bei Integralgleichungen, die bei der Berechnung von Korrelationsfunktionen auftreten².

Auffällig an diesen nichtlinearen Integralgleichungen für die Thermodynamik ist, dass diese Integralgleichungen mit einer kleinen Einschränkung³ genau denen entsprechen, die in [23, 24] für das Sine-Gordon-Modell mit endlicher Länge bei $T = 0$ gefunden wurden, wenn die Länge l mit der inversen Temperatur $1/T$ identifiziert wird. Dieses Phänomen soll im nächsten Abschnitt genauer besprochen werden.

Hier sei zunächst noch angemerkt, dass sich die obigen Resultate für die freie Energie auch aus dem Zugang über die XYZ-Kette ergeben. Die zugehörige Rechnung findet sich im Anhang A.2. Schließlich lassen sich die oben gewonnenen Integralgleichungen auch numerisch mit Hilfe der *fast Fourier transformation* auswerten und erlauben beispielsweise die Berechnung der spezifischen Wärme. Hierbei wird nicht die freie Energie numerisch differenziert, sondern die obigen Gleichungen (4.9) und (4.13) werden explizit differenziert. Dabei treten neue Hilfsfunktionen auf, die wiederum lineare Integralgleichungen erfüllen, in die die ursprünglichen Hilfsfunktionen \mathfrak{b} und $\bar{\mathfrak{b}}$ als äußere Parameter eingehen. Dies ist für die XXZ-Kette und einige thermodynamische Koeffizienten beispielsweise in [95] explizit dargestellt. In Abbildung 4.1 ist für einige Werte von γ die spezifische Wärme $c = -T \partial_T^2 f$ zu sehen. Hierbei wurde die spezifische Wärme, wie sie sich für ein Gas freier relativistischer Bosonen mit Dispersion

$$\omega^2 = m^2 + k^2 \tag{4.15}$$

²Siehe hierzu die Gleichungen (6.17) und (6.24) in Kapitel 6.2.

³Die in der freien Energie auftretende Konstante kann nicht direkt mit der in der Grundzustandsenergie auftretenden Konstanten in [23, 24] verglichen werden, da sich der Kontinuumsimes jeweils nicht explizit durchführen lässt.

ergibt, abgezogen. Diese ist gegeben durch [75]

$$c = \frac{1}{T^2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\omega^2}{4 \operatorname{sh}^2(\omega/2T)} \frac{dk}{2\pi}. \quad (4.16)$$

Für große Temperaturen fallen die Kurven langsam auf Null ab, während sie für $T \rightarrow 0$ exponentiell verschwinden. Die Kurve für $\gamma = 4\pi/5$ findet sich auch in [34] und stimmt bei entsprechender Skalierung mit der hier gezeigten überein. Um die berechneten Kurven unabhängig von der Masse m darzustellen, muss die Skalierung T/m und c/m vorgenommen werden.

4.2. Endliche Länge im Kontinuum

In diesem Abschnitt soll das Verhalten des Sine-Gordon-Modells für Systeme endlicher Länge bei $T = 0$ untersucht werden. Dies ist von besonderem Interesse, um die Übereinstimmung der nicht-linearen Integralgleichungen für die Thermodynamik mit denen für den Grundzustand innerhalb eines Zugangs zu verstehen. Das für diese Rechnung relevante Objekt ist nicht wie im vorherigen Abschnitt die Quantentransfermatrix, sondern die gewöhnliche Transfermatrix, wie sie in Kapitel 2.2 eingeführt wurde. Die Eigenwerte der Operatoren und eine geeignete Verschiebung für den Bethevektor sind bereits in den Gleichungen (3.11) und (3.12) angegeben worden. Damit lassen sich analog zu der in Anhang A.1 gezeigten Rechnung für die Quantentransfermatrix die entsprechenden nicht-linearen Integralgleichungen für die gewöhnliche Transfermatrix herleiten. Dies ist genau die Rechnung, wie sie ursprünglich in [60] für die nicht gestagerte Transfermatrix zu finden ist. Daher wird hier auf eine genauere Darstellung verzichtet. Außerdem beschränkt sich die folgende Diskussion auf den Fall $0 < \gamma < \pi/2$, da sich alle Argumente auf den Fall $\pi/2 < \gamma < \pi$ übertragen lassen und eine Behandlung beider Fälle nur zu einer Verdopplung führen würde.

Zunächst wird die Hilfsfunktion

$$\alpha(x) = \left[\frac{\operatorname{sh}(x + \theta - i\gamma/2) \operatorname{sh}(x - \theta - i\gamma/2)}{\operatorname{sh}(x + \theta + i\gamma/2) \operatorname{sh}(x - \theta + i\gamma/2)} \right]^{L/2} \prod_{k=1}^M \frac{\operatorname{sh}(x - \lambda_k + i\gamma)}{\operatorname{sh}(x - \lambda_k - i\gamma)} \quad (4.17)$$

definiert. Ausgehend von dieser Hilfsfunktion werden dann wie in (4.2) die Hilfsfunktionen \mathfrak{b} und $\bar{\mathfrak{b}}$ definiert. Für diese ergeben sich dann vor dem Kontinuumsimes die Integralgleichungen

$$\begin{aligned} \ln \mathfrak{b}(x) = & \frac{L}{2} \left[\ln \left[\operatorname{th} \left(\frac{\pi}{\gamma} (x + \theta) \right) \right] + \ln \left[\operatorname{th} \left(\frac{\pi}{\gamma} (x - \theta) \right) \right] \right] \\ & + \frac{1}{2\pi} K * \ln(1 + \mathfrak{b})(x) - \frac{1}{2\pi} K^+ * \ln(1 + \bar{\mathfrak{b}})(x), \quad (4.18a) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \ln \bar{\mathfrak{b}}(x) = & \frac{L}{2} \left[\ln \left[\operatorname{th} \left(\frac{\pi}{\gamma} (x + \theta) \right) \right] + \ln \left[\operatorname{th} \left(\frac{\pi}{\gamma} (x - \theta) \right) \right] \right] \\ & + \frac{1}{2\pi} K * \ln(1 + \bar{\mathfrak{b}})(x) - \frac{1}{2\pi} K^- * \ln(1 + \mathfrak{b})(x). \quad (4.18b) \end{aligned}$$

Sie unterscheiden sich anhand ihrer Inhomogenitäten von den entsprechenden Gleichungen für die Thermodynamik (4.4). Im Kontinuumslimit jedoch ergibt sich für festes $l = L\delta$

$$\ln \mathfrak{b}(x) = -ml \operatorname{ch}\left(\frac{\pi}{\gamma}x\right) + \frac{1}{2\pi}K * \ln(1 + \mathfrak{b})(x) - \frac{1}{2\pi}K^+ * \ln(1 + \bar{\mathfrak{b}})(x), \quad (4.19a)$$

$$\ln \bar{\mathfrak{b}}(x) = -ml \operatorname{ch}\left(\frac{\pi}{\gamma}x\right) + \frac{1}{2\pi}K * \ln(1 + \bar{\mathfrak{b}})(x) - \frac{1}{2\pi}K^- * \ln(1 + \mathfrak{b})(x). \quad (4.19b)$$

Dieses Resultat stimmt mit der Identifizierung $l = 1/T$ mit (4.7) überein.

Ähnliches gilt für die Grundzustandsenergie. Hierfür muss noch der zum Grundzustand gehörende Eigenwert der Transfermatrix berechnet werden. Die Herleitung erfolgt analog zu derjenigen für den größten Eigenwert der Quantentransfermatrix und resultiert in

$$\begin{aligned} e = & -\frac{l\gamma}{\pi\delta^2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\operatorname{sh}\left(\frac{\pi-\gamma}{2}\right)k}{2 \operatorname{sh}\left(\frac{\pi}{2}k\right) \operatorname{ch}\left(\frac{\gamma}{2}k\right)} \cos^2(\theta k) dk \\ & - \frac{1}{4\gamma\delta} \int_{-\infty}^{\infty} \left[\frac{\operatorname{ch}\left(\frac{\pi}{\gamma}(\theta - x)\right)}{\operatorname{sh}^2\left(\frac{\pi}{\gamma}(\theta - x)\right)} + \frac{\operatorname{ch}\left(\frac{\pi}{\gamma}(\theta + x)\right)}{\operatorname{sh}^2\left(\frac{\pi}{\gamma}(\theta + x)\right)} \right] \ln([1 + \mathfrak{b}(x)][1 + \bar{\mathfrak{b}}(x)]) dx \end{aligned} \quad (4.20)$$

vor Durchführung des Kontinuumslimites. Obiger Ausdruck für die Grundzustandsenergie unterscheidet sich durch die Integrationskerne von der Gleichung (4.8) für die freie Energie. Wird jedoch der Kontinuumslimites durchgeführt, d.h. $\delta \rightarrow 0$, so geht (4.20) in

$$e = le_0 - \frac{m}{2\gamma} \int_{-\infty}^{\infty} \operatorname{ch}\left(\frac{\pi}{\gamma}x\right) \ln([1 + \mathfrak{b}(x)][1 + \bar{\mathfrak{b}}(x)]) dx \quad (4.21)$$

über mit e_0 aus (4.10). Ein Vergleich mit der freien Energie (4.9) liefert dann mit der Identifizierung $l = 1/T$ für das Sine-Gordon-Modell die Identität

$$e = f/T. \quad (4.22)$$

5. Korrelationsfunktionen des Sine-Gordon-Modells

In diesem Kapitel wird die Darstellung von Korrelationsfunktionen bei endlichen Temperaturen mit Hilfe von Vielfachintegralen, wie sie für die XXZ-Kette in [38] gefunden wurde, auf das Sine-Gordon-Modell übertragen. Der Zugang zur Thermodynamik über die Quantentransfermatrix erlaubt es, Korrelationsfunktionen von lokalen Operatoren auf dem Gitter mit Hilfe des algebraischen Betheansatzes zu berechnen. Dazu werden auf dem Gitter Korrelationsfunktionen vom Typ

$$\left\langle X_j^{(1)} \dots X_k^{(k-j+1)} \right\rangle_T = \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{\text{tr}_{1, \dots, L} \left(e^{-\beta \mathcal{H}} X_j^{(1)} \dots X_k^{(k-j+1)} \right)}{\text{tr}_{1, \dots, L} \left(e^{-\beta \mathcal{H}} \right)} \quad (5.1)$$

betrachtet, wobei $j, k \in \{1, \dots, L\}$ und $j \leq k$ gilt. $X_m^{(n)}$ bezeichnet einen beliebigen lokalen Operator auf dem Platz m . Hierbei wurde der Kontinuumsliches $\delta \rightarrow 0$, der für das Sine-Gordon-Modell notwendig ist, zunächst nicht berücksichtigt, sondern der zugehörige Hamiltonoperator auf dem Gitter betrachtet. Der Kontinuumsliches wird später an geeigneter Stelle wieder eingebaut. Unter Zuhilfenahme von (2.37) lässt sich obiger Ausdruck umschreiben zu

$$\begin{aligned} & \left\langle X_j^{(1)} \dots X_k^{(k-j+1)} \right\rangle \\ &= \lim_{N, L \rightarrow \infty} \frac{\text{tr}_{\bar{1}, \dots, \bar{N}} \text{tr}_{1, \dots, L} \left[T_1^{QTM}(-\theta) T_2^{QTM}(\theta) \dots T_L^{QTM}(\theta) X_j^{(1)} \dots X_k^{(k-j+1)} \right]}{\text{tr}_{1, \dots, L} (\rho_{N, L})} \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \left[\frac{\langle \Psi_0 | \text{tr}(T^{QTM}(-\theta) X^{(1)}) \text{tr}(T^{QTM}(\theta) X^{(2)}) \dots \right. \\ & \quad \left. \dots \text{tr}(T^{QTM}(-\theta) X^{(k-j)}) \text{tr}(T^{QTM}(\theta) X^{(k-j+1)}) | \Psi_0 \rangle}{\left(\Lambda_0^{QTM}(-\theta) \Lambda_0^{QTM}(\theta) \right)^{(k+1-j)/2}} \right]. \end{aligned} \quad (5.2)$$

Hierbei bezeichnet Ψ_0 den normierten Eigenvektor zum größten Eigenwert Λ_0^{QTM} der Quantentransfermatrix t^{QTM} und T^{QTM} ist die zur Quantentransfermatrix gehörende Monodromiematrix (2.38).

Insbesondere soll im Folgenden die sogenannte erzeugende Funktion¹ [43]

$$\exp(\varphi Q_{1,s}) = \exp\left(\frac{\varphi}{2} \sum_{i=1}^s (1 - \sigma_i^z)\right) \quad (5.3)$$

¹Die Bezeichnung kommt daher, dass $\exp(\varphi Q_{1,s})$ für die XXZ-Kette erlaubt, die zz -Korrelationen mittels diskreten Gitterableitungen zu berechnen [38].

betrachtet werden, die mit der topologischen Ladung des Sine-Gordon-Modells [28]

$$\mathcal{Q}^{SG}(-x, x) = \frac{2}{\beta} [\Phi(x) - \Phi(-x)] + D2x \quad (5.4)$$

verbunden ist. Dabei bezeichnet D die Teilchendichte. Der entsprechende Operator im massiven Thirring-Modell ist durch

$$\mathcal{Q}^{MTM}(-x, x) = \int_{-x}^x dy \Psi^\dagger(y) \Psi(y) \quad (5.5)$$

gegeben [42]. Unter Ausnutzung der Translationsinvarianz der betrachteten Modelle folgt

$$\mathcal{Q}(-x/2, x/2) = \lim_{\delta \rightarrow 0} \mathcal{Q}_{1, s=x/\delta}. \quad (5.6)$$

Hier wird explizit deutlich, dass zur Berechnung eines endlichen Abstands im Kontinuum eine unendliche Anzahl an Gitterplätzen betrachtet werden muss.

Die zur erzeugenden Funktion gehörende Korrelationsfunktion ist gegeben durch

$$\langle \exp(\varphi Q_{1,s}) \rangle_T = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{\langle \Psi_0 | [(A(-\theta) + \varphi D(-\theta))(A(\theta) + \varphi D(\theta))]^{s/2} | \Psi_0 \rangle}{\left(\Lambda_0^{QTM}(-\theta) \Lambda_0^{QTM}(\theta) \right)^{s/2}}, \quad (5.7)$$

wobei die Operatoren A und D die Diagonalelemente der Monodromiematrix sind. Die rechte Seite dieser Gleichung kann nicht direkt berechnet werden, stattdessen wird eine inhomogene Version dieses Ausdrucks betrachtet. Zunächst wird jedoch eine verdrehte Quantentransfermatrix

$$t_\varphi(\lambda) = A(\lambda) + \varphi D(\lambda) \quad (5.8)$$

definiert. Der Einfachheit halber wurde hier die Kennzeichnung QTM weggelassen. Aus der Yang-Baxter-Algebra (2.45) folgt, dass die verdrehten Quantentransfermatrizen t_φ für festes φ ebenfalls eine kommutierende Familie bilden

$$[t_\varphi(\lambda), t_\varphi(\mu)] = 0. \quad (5.9)$$

Für eine beliebige Menge $\{\xi\} = \{\xi_j\}_{j=1}^s$, $\xi_j \in \mathbb{C}$ wird die Funktion

$$\Phi_N(\varphi | \{\xi\}) = \langle \Psi_0 | \left[\prod_{j=1}^s t_\varphi(\xi_j) \right] \left[\prod_{j=1}^s t_0^{-1}(\xi_j) \right] | \Psi_0 \rangle \quad (5.10)$$

definiert. Diese hängt wegen (5.9) symmetrisch von den ξ_j ab. Somit lässt sich die erzeugende Funktion über

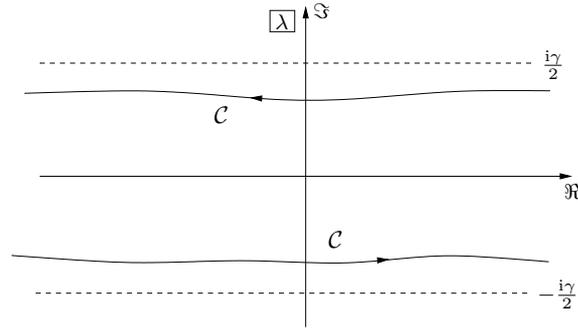
$$\langle e^{\varphi Q_{1,s}} \rangle_T = \lim_{N \rightarrow \infty} \lim_{\xi_j \rightarrow (-)^j \theta} \Phi_N(\varphi | \{\xi\}) \quad (5.11)$$

berechnen. Der Limes $\xi_j \rightarrow (-)^j \theta$ wird analog zum Fall der XXZ-Kette als homogener Limes bezeichnet.

Für die erzeugende Funktion im Kontinuum gilt damit

$$\langle e^{\varphi \mathcal{Q}(-x/2, x/2)} \rangle_T = \lim_{\delta \rightarrow 0} \lim_{N \rightarrow \infty} \lim_{\xi_j \rightarrow (-)^j \theta} \Phi_N(\varphi | \{\xi\}), \quad (5.12)$$

wobei $s = x/\delta$ ist. Die Strategie der folgenden Rechnung ist, zuerst $\Phi_N(\varphi | \{\xi\})$ mittels des algebraischen Betheansatzes zu berechnen und das Resultat auf eine Form zu transformieren, die die Durchführung des Trotterlimes und des homogenen Limes erlaubt. Für den Kontinuumsimes stellt sich jedoch heraus, dass dieser nur am Punkt freier Fermionen explizit durchführbar ist.


 Abbildung 5.1.: Die kanonische Kontur \mathcal{C} für das kritische 6-Vertex-Modell mit $0 < \gamma < \pi/2$

5.1. Herleitung der Vielfachintegraldarstellung

Zunächst wird zur Beschreibung des größten Eigenwertes der Quantentransfermatrix eine Darstellung mittels nichtlinearer Integralgleichungen benötigt. Diese unterscheiden sich von denen in Kapitel 4.1 dadurch, dass die Integration nicht auf geraden Linien stattfindet, sondern durch eine Kontur in der komplexen Ebene gegeben ist. Mit einer im Vergleich zur XXZ-Kette analogen Rechnung [58] findet sich für die Hilfsfunktion \mathfrak{a} aus (4.1) die Integralgleichung im Trotterlimes

$$\ln \mathfrak{a}(\lambda) = \frac{J}{2T} \left(\frac{\sin^2(\gamma)}{\operatorname{sh}(\lambda + \theta) \operatorname{sh}(\lambda + \theta + i\gamma)} + \frac{\sin^2(\gamma)}{\operatorname{sh}(\lambda - \theta) \operatorname{sh}(\lambda - \theta + i\gamma)} \right) - \int_{\mathcal{C}} \frac{d\omega}{2\pi} K_{i\gamma}(\lambda - \omega) \ln(1 + \mathfrak{a}(\omega)) \quad (5.13)$$

mit $K_{i\gamma}$ aus (3.27). Die Kontur \mathcal{C} ist für den Fall $0 < \gamma < \pi/2$ in Abbildung 5.1 zu sehen. Der Integrationsweg verläuft innerhalb des Streifens $[-i\gamma/2, i\gamma/2]$ um die reelle Achse herum und schließt sich jeweils im Unendlichen. Für den Fall $\pi/2 < \gamma < \pi$ sind die begrenzenden Geraden durch $\pm i(\pi - \gamma)/2$ gegeben.

Der größte Eigenwert der Quantentransfermatrix lässt sich als Konturintegral mittels der Hilfsfunktion \mathfrak{a} ausdrücken

$$\ln \Lambda(\lambda) = \int_{\mathcal{C}} \frac{d\omega}{2\pi} K_{i\gamma/2}(\lambda - \omega - i\gamma/2) \ln(1 + \mathfrak{a}(\omega)). \quad (5.14)$$

Die Herleitung der Vielfachintegraldarstellung für die erzeugende Funktion ist bis auf kleine Abweichungen analog zu der für die XXZ-Kette, daher werden hier nur die Änderungen benannt:

- Die Eigenwerte a und d der Operatoren A und D unterscheiden sich im Vergleich zur XXZ-Kette, vergleiche (2.16), gehen aber nur über die Hilfsfunktion \mathfrak{a} in die resultierende Formel für die Korrelationsfunktionen ein.
- Der homogene Limes unterscheidet sich dadurch, dass die ξ_j in diesem Grenzfall nicht gegen Null, sondern gegen $(-)^j \theta$ gehen.

Somit ergibt sich vor Durchführung aller Grenzfälle, d.h. Trotter-Limes, homogener Limes und Kontinuums-limes, der folgende Ausdruck für die erzeugende Funktion bei endlicher Trotter-Zahl

$$\begin{aligned} \Phi_N(\varphi|\{\xi_j\}) &= \sum_{n=0}^s \frac{e^{(s-n)\varphi}}{n!} \left[\prod_{j=1}^n \int_{\mathcal{C}} \frac{d\omega_j}{2\pi i} \frac{b(\omega_j)}{1 + \mathfrak{a}(\omega_j)} \int_{\Gamma} \frac{dz_j}{2\pi i} \frac{1}{b(z_j)} \right] \\ &\quad \times \left[\prod_{j,k=1}^n \frac{\text{sh}(\omega_j - z_k - i\gamma)}{\text{sh}(z_j - z_k - i\gamma)} \right] \det_n M(\omega_j, z_k) \det_n G(\omega_j, z_k). \end{aligned} \quad (5.15)$$

Die darin auftretenden Funktionen sind definiert durch

$$G(\lambda, \xi) = iK_{i\gamma/2}(\xi - \lambda + i\gamma/2) + \int_{\mathcal{C}} \frac{d\omega}{2\pi} K_{i\gamma}(\lambda - \omega) \frac{G(\omega, \xi)}{1 + \mathfrak{a}(\omega)}, \quad (5.16)$$

$$\begin{aligned} M(\lambda, \xi) &= iK_{i\gamma/2}(\lambda - \xi + i\frac{\gamma}{2}) \prod_{l=1}^n \frac{\text{sh}(\lambda - z_l - i\gamma)}{\text{sh}(\lambda - \omega_l - i\gamma)} \\ &\quad + e^\varphi iK_{i\gamma/2}(\xi - \lambda + i\frac{\gamma}{2}) \prod_{l=1}^n \frac{\text{sh}(\lambda - z_l + i\gamma)}{\text{sh}(\lambda - \omega_l + i\gamma)} \end{aligned} \quad (5.17)$$

und

$$b(\lambda) = \prod_{j=1}^s \frac{\text{sh}(\lambda - \xi_j)}{\text{sh}(\lambda - \xi_j - i\gamma)}. \quad (5.18)$$

Des Weiteren bezeichnet Γ eine einfach geschlossene Kontur um die Punkte $\pm\theta$ innerhalb der Kontur \mathcal{C} , so dass alle ξ_j in Γ liegen. Die Notation $\det_n f(x_j, y_k)$ ist eine abkürzende Schreibweise für $\det [f(x_j, y_k)]_{j,k=1,\dots,n}$.

Bevor genauer auf die durchzuführenden Grenzwerte eingegangen wird, ist in (5.15) auffällig, dass sich der Faktor $e^{(s-n)\varphi}$ im Grenzfall $s \rightarrow \infty$ nicht gutartig verhält. Dieser Limes ist aber notwendig, um eine endliche Länge im Kontinuum zu erhalten. Glücklicherweise gibt es eine alternative Darstellung der Korrelationsfunktion, die nicht die Hilfsfunktion \mathfrak{a} sondern $\bar{\mathfrak{a}}(\lambda) = 1/\mathfrak{a}(\lambda)$ verwendet, welche nicht dieses Problem besitzt. Eine ausführliche Darstellung, wie diese aus (5.15) hergeleitet werden kann, findet sich in [76].

Zunächst ergibt sich für die Hilfsfunktion $\bar{\mathfrak{a}}$ im Trotterlimes die Integralgleichung

$$\begin{aligned} \ln \bar{\mathfrak{a}}(\lambda) &= \frac{J}{2T} \left(\frac{\sin^2(\gamma)}{\text{sh}(\lambda + \theta) \text{sh}(\lambda + \theta - i\gamma)} + \frac{\sin^2(\gamma)}{\text{sh}(\lambda - \theta) \text{sh}(\lambda - \theta - i\gamma)} \right) \\ &\quad + \int_{\mathcal{C}} \frac{d\omega}{2\pi} K_{i\gamma}(\lambda - \omega) \ln(1 + \bar{\mathfrak{a}}(\omega)), \end{aligned} \quad (5.19)$$

mit der Kontur \mathcal{C} aus Abbildung 5.1. Die Funktion G lässt sich ebenfalls als Lösung einer linearen Integralgleichung, die die Funktion $\bar{\mathfrak{a}}$ statt \mathfrak{a} enthält, auffassen

$$G(\lambda, \xi) = -iK_{i\gamma/2}(\lambda - \xi + i\gamma/2) - \int_{\mathcal{C}} \frac{d\omega}{2\pi} K_{i\gamma}(\lambda - \omega) \frac{G(\omega, \xi)}{1 + \bar{\mathfrak{a}}(\omega)}. \quad (5.20)$$

Die erzeugende Funktion für endliche Trotterzahl unter Verwendung der Hilfsfunktion \bar{a} lautet [38]

$$\begin{aligned} \Phi_N(\varphi|\{\xi_j\}) = \sum_{n=0}^s \frac{(-1)^n}{(n!)^2} & \left[\prod_{j=1}^n \int_{\mathcal{C}} \frac{d\omega_j}{2\pi i} \frac{\bar{b}(\omega_j)}{1 + \bar{a}(\omega_j)} \int_{\Gamma} \frac{dz_j}{2\pi i} \frac{1}{\bar{b}(z_j)} \right] \\ & \times \left[\prod_{j,k=1}^n \frac{\text{sh}(\omega_j - z_k + i\gamma)}{\text{sh}(z_j - z_k + i\gamma)} \right] \det_n M(\omega_j, z_k) \det_n G(\omega_j, z_k) \end{aligned} \quad (5.21)$$

mit

$$\bar{b}(\lambda) = \prod_{j=1}^s \frac{\text{sh}(\lambda - \xi_j)}{\text{sh}(\lambda - \xi_j + i\gamma)}. \quad (5.22)$$

Auffällig ist hierbei zunächst, dass die Trotterzahl N weder in Gleichung (5.15) noch (5.21) explizit eingeht, einzig die Hilfsfunktionen \mathbf{a} bzw. \bar{a} hängen von der Trotterzahl ab. Der Trotterlimes lässt sich jedoch in den Integralgleichungen leicht durchführen und ist in (5.13) und (5.19) bereits erfolgt. Die Inhomogenitäten gehen nur über die Funktionen b und \bar{b} ein, sodass sich auch dieser Grenzfall explizit durchführen lässt

$$\bar{b}(\lambda) = \left(\frac{\text{sh}(\lambda - \theta) \text{sh}(\lambda + \theta)}{\text{sh}(\lambda - \theta + i\gamma) \text{sh}(\lambda + \theta + i\gamma)} \right)^{s/2}. \quad (5.23)$$

Somit gilt

$$\begin{aligned} \langle e^{\varphi Q_{1,s}} \rangle_T = \sum_{n=0}^s \frac{(-1)^n}{(n!)^2} & \left[\prod_{j=1}^n \int_{\mathcal{C}} \frac{d\omega_j}{2\pi i (1 + \bar{a}(\omega_j))} \left(\frac{\text{sh}(\omega_j - \theta) \text{sh}(\omega_j + \theta)}{\text{sh}(\omega_j - \theta + i\gamma) \text{sh}(\omega_j + \theta + i\gamma)} \right)^{s/2} \right] \\ & \times \left[\prod_{j=1}^n \int_{\Gamma} \frac{dz_j}{2\pi i} \left(\frac{\text{sh}(z_j - \theta + i\gamma) \text{sh}(z_j + \theta + i\gamma)}{\text{sh}(z_j - \theta) \text{sh}(z_j + \theta)} \right)^{s/2} \right] \\ & \times \left[\prod_{j,k=1}^n \frac{\text{sh}(\omega_j - z_k + i\gamma)}{\text{sh}(z_j - z_k + i\gamma)} \right] \det_n M(\omega_j, z_k) \det_n G(\omega_j, z_k). \end{aligned} \quad (5.24)$$

Leider erweist sich der Kontinuumsimes für das Sine-Gordon-Modell als Problem. Der Grund dafür ist, dass die für die Herleitung der Vielfachintegrale verwendeten Funktionen, diejenigen sind, die den *bare excitations* entsprechen. Diese sind aber nicht kompatibel mit dem reskalierten θ (3.25). Das Problem tritt explizit sowohl bei der Inhomogenität der nichtlinearen Integralgleichung für \bar{a} in (5.19), als auch bei der Funktion \bar{b} auf. Für die Inhomogenität gilt in diesem Limes

$$- \frac{8J \sin^2(\gamma)}{2T} e^{-2\theta} \text{sh}(2\lambda + i\gamma) \quad (5.25)$$

mit

$$e^{-2\theta} = \left(\frac{m\delta}{2} \right)^{2\gamma/\pi}. \quad (5.26)$$

Betrachtet man den Anteil, der von der Gitterkonstanten abhängt

$$J e^{-2\theta} \propto \frac{1}{\delta} \left(\frac{m\delta}{2} \right)^{2\gamma/\pi}, \quad (5.27)$$

so ist deutlich, dass er sich nur für $\gamma = \pi/2$ gutartig verhält, d.h. weder verschwindet noch divergiert. Ähnliches trifft auf die Funktion

$$\bar{b}(\lambda) \simeq \left[\frac{1 - 2e^{-2\theta} \operatorname{ch}(2\lambda)}{1 - 2e^{-2\theta} \operatorname{ch}(2\lambda + i2\gamma)} \right]^{(x/2\delta)} \quad (5.28)$$

zu. Für diese ist der Grenzfall $\delta \rightarrow 0$ nur für $\gamma = \pi/2$ wohldefiniert. Damit ist es zwar gelungen, den Formalismus der Darstellung von Korrelationsfunktionen durch Vielfachintegrale auf das zum Sine-Gordon-Modell gehörende Gitter anzuwenden, jedoch ist es abgesehen vom Punkt freier Fermionen, d.h. $\gamma = \pi/2$, nicht möglich, den Kontinuumsimes explizit durchzuführen. Der Fall freier Fermionen wird im folgenden Abschnitt genauer besprochen.

5.2. Korrelationsfunktionen am Punkt freier Fermionen

Am Punkt freier Fermionen $\gamma = \pi/2$ vereinfachen sich die obigen Formeln drastisch. Dieser Umstand wurde bereits in mehreren Fällen ausgenutzt. In [78] wurde der Fall freier Fermionen mit klassischer Dispersionsrelation als Grenzfall des Bosegases betrachtet und in [54] der Fall freier Fermionen auf dem Gitter als Spezialfall der XXZ-Kette. Die Rechnungen hier sind analog zu diesen Fällen. Die Funktionen aus dem vorigen Abschnitt lauten

$$\bar{a}(\lambda) = \exp(-im \operatorname{sh}(2\lambda)/T), \quad (5.29a)$$

$$G(\lambda, \xi) = \frac{-2}{\operatorname{sh}(2\lambda - 2\xi)}, \quad (5.29b)$$

$$M(\lambda, \xi) = \frac{2(e^\varphi - 1)}{\operatorname{sh}(2\lambda - 2\xi)} \prod_{l=1}^n \frac{\operatorname{ch}(\lambda - z_l)}{\operatorname{ch}(\lambda - \omega_l)}, \quad (5.29c)$$

$$\bar{b}(\lambda) = \exp(-xm \operatorname{ch}(2\lambda)), \quad (5.29d)$$

wobei bei \bar{a} und \bar{b} der Kontinuumsimes bereits durchgeführt wurde. Hierbei gilt es, zwei Besonderheiten zu beachten. Zum einen haben die Integralgleichungen eine explizite Lösung, zum anderen werden die zwei Summanden der Funktion M in (5.17) proportional zueinander. Letzteres erlaubt es für $\gamma = \pi/2$, die in (5.21) auftretenden Determinanten zusammenzufassen zu

$$\begin{aligned} (-1)^n \left[\prod_{j,k=1}^n \frac{\operatorname{sh}(\omega_j - z_k + i\pi/2)}{\operatorname{sh}(z_j - z_k + i\pi/2)} \right] \det_n M(\omega_j, z_k) \det_n G(\omega_j, z_k) \\ = (e^\varphi - 1)^n \left[\det_n \frac{1}{\operatorname{sh}(\omega_j - z_k)} \right]^2. \end{aligned} \quad (5.30)$$

Damit vereinfacht sich der obige Ausdruck (5.21) für die erzeugende Funktion im Kontinuumsimes zu

$$\begin{aligned} \left\langle e^{\varphi \mathcal{Q}(-x/2, x/2)} \right\rangle_T = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(e^\varphi - 1)^n}{(n!)^2} \left[\prod_{j=1}^n \int_{\mathcal{C}} \frac{d\omega_j}{2\pi i (1 + \exp(-im \operatorname{sh}(2\omega_j)/T))} e^{-xm \operatorname{ch}(2\omega_j)} \right] \\ \times \left[\prod_{j=1}^n \int_{\Gamma} \frac{dz_j}{2\pi i} e^{xm \operatorname{ch}(2z_j)} \right] \left[\det_n \frac{1}{\operatorname{sh}(\omega_j - z_k)} \right]^2. \end{aligned} \quad (5.31)$$

Um das Ergebnis noch weiter auswerten zu können, ist es aber sinnvoll, zunächst weiter die Gleichung auf dem Gitter für endliches s vor Durchführung des Grenzwertes $\delta \rightarrow 0$ zu betrachten. Die Cauchy-Determinanten lassen sich in Produkte entwickeln

$$\det_n \frac{1}{\text{sh}(\omega_j - z_k)} = \frac{\Delta(\omega)\Delta(z)}{\prod_{j,k=1}^n \text{sh}(\omega_j - z_k)}, \quad (5.32)$$

wobei die Notation

$$\Delta(\omega) = \prod_{1 \leq j < k \leq n} \text{sh}(\omega_k - \omega_j) = \frac{\det_n e^{2\omega_k(j-1)}}{\prod_{j=1}^n 2^{(n-1)/2} e^{\omega_j(n-1)}} = \det_n \left[\frac{e^{\omega_k(2j-n-1)}}{2^{(n-1)/2}} \right] \quad (5.33)$$

verwendet wurde. Δ ist somit proportional zu einer Vandermonde Determinante. Damit gilt

$$\begin{aligned} \langle e^{\varphi Q_{1,s}} \rangle_T = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(e^\varphi - 1)^n}{(n!)^2} & \left[\prod_{j=1}^n \int_{\mathcal{C}} \frac{d\omega_j}{2\pi i} \frac{\bar{b}(\omega_j)}{1 + \bar{a}(\omega_j)} \right] \\ & \times \left[\prod_{j=1}^n \int_{\Gamma} \frac{dz_j}{2\pi i} \frac{1}{\bar{b}(z_j)} \right] \frac{\Delta^2(\omega)\Delta^2(z)}{\prod_{j,k=1}^n \text{sh}^2(\omega_j - z_k)}. \end{aligned} \quad (5.34)$$

Wegen der Symmetrie des Integranden für alle z_j kann unter dem Integral eine der Determinanten $\Delta(z)$ durch das $n!$ -fache Produkt der Diagonalelemente der zugehörigen Matrix ersetzt werden [54]. Daher können nacheinander die Integrale über z_j in die andere Determinante hineingezogen werden

$$R(\omega) := \frac{1}{n!} \left[\prod_{l=1}^n \int_{\Gamma} \frac{dz_l}{2\pi i} \frac{1}{\bar{b}(z_l)} \right] \frac{\Delta^2(z)}{\prod_{j,k=1}^n \text{sh}^2(\omega_j - z_k)} \quad (5.35a)$$

$$= \det_n \left[\int_{\Gamma} \frac{dz}{2\pi i} \frac{1}{\bar{b}(z)} \frac{e^{2z(k+j-1-n)}}{2^{n-1} \prod_{l=1}^n \text{sh}^2(\omega_l - z)} \right]. \quad (5.35b)$$

Der Ausdruck auf der rechten Seite könnte mittels des Residuensatzes ausgewertet werden. Es erweist sich jedoch als nützlich, analog zu der Rechnung in [78] einige Umformungen in der Determinante vorzunehmen

$$\begin{aligned} \det_n & \left[\int_{\Gamma} \frac{dz}{2\pi i} \frac{1}{\bar{b}(z)} \frac{e^{2z(k+j-1-n)}}{2^{n-1} \prod_{j,k=1}^n \text{sh}^2(\omega_j - z)} \right] \\ & = \det_n \left[\int_{\Gamma} \frac{dz}{2\pi i} \frac{1}{\bar{b}(z)} \frac{e^{2z(1-n)} \prod_{a=1}^{j-1} (e^{2z} - e^{2\omega_a}) \prod_{b=1}^{k-1} (e^{2z} - e^{2\omega_b})}{2^{n-1} \prod_{l=1}^n \text{sh}^2(\omega_l - z)} \right] \\ & = \frac{1}{\Delta^2(\omega)} \det_n \left[\int_{\Gamma} \frac{dz}{2\pi i} \frac{1}{\bar{b}(z)} \frac{1}{\text{sh}(z - \omega_j) \text{sh}(z - \omega_k)} \right]. \end{aligned} \quad (5.36)$$

Um das Integral in der Determinante explizit zu berechnen, ist es günstig, die Kontur Γ zu defor-

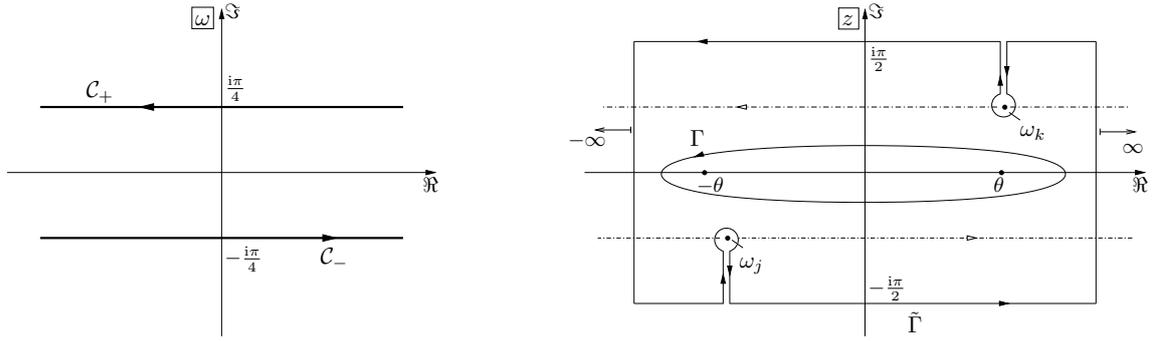


Abbildung 5.2.: Das linke Bild zeigt die kanonische Kontur \mathcal{C} im Fall freier Fermionen. Sie besteht aus zwei Teilkonturen \mathcal{C}_+ und \mathcal{C}_- , die bei $\pm i\pi/4$ parallel zur reellen Achse verlaufen. Im rechten Bild ist die Deformation der Kontur Γ zu sehen.

mieren. Dies ist im rechten Bild in Abbildung 5.2 zu sehen. Vergrößert man die Kontur Γ immer weiter, so müssen die Polstellen ω_j und ω_k auf der Kontur \mathcal{C} ausgeschlossen werden. Das ist durch die Kontur $\tilde{\Gamma}$ angedeutet. Alternativ kann die Kontur $\tilde{\Gamma}$ über diese Stellen hinaus ausgedehnt werden, dann müssen jedoch die Residuen an den Stellen ω_j und ω_k von dem Ergebnis abgezogen werden. Das Integral über die vollständig bis $\pm i\pi/2$ ausgedehnte Kontur verschwindet, da der Integrand für Argumente gegen $\pm\infty$ verschwindet und $i\pi$ -periodisch ist²

$$\int_{\Gamma} \frac{dz}{2\pi i} \frac{1}{\bar{b}(z)} \frac{1}{\text{sh}(z - \omega_j) \text{sh}(z - \omega_k)} = 0 - \sum_{\lambda \in \{\omega_j, \omega_k\}} \text{res}_{z=\lambda} \left[\frac{1}{\bar{b}(z)} \frac{1}{\text{sh}(z - \omega_j) \text{sh}(z - \omega_k)} \right]. \quad (5.37)$$

Hier kann nun leicht der Kontinuumslimes durchgeführt werden

$$\begin{aligned} \sum_{\lambda \in \{\omega_j, \omega_k\}} \text{res}_{z=\lambda} \left[\frac{1}{\bar{b}(z)} \frac{1}{\text{sh}(z - \omega_j) \text{sh}(z - \omega_k)} \right] &= \frac{e^{xm \text{ch}(2\omega_j)} - e^{xm \text{ch}(2\omega_k)}}{\text{sh}(\omega_j - \omega_k)} \\ &= e^{xm \text{ch}(2\omega_j)/2} e^{xm \text{ch}(2\omega_k)/2} \frac{\text{sh}[xm(\text{ch}(2\omega_j) - \text{ch}(2\omega_k))/2]}{\text{sh}(\omega_j - \omega_k)}. \end{aligned} \quad (5.38)$$

Für $j = k$ stimmt die analytische Fortsetzung dieser Funktion mit den Residuen der Diagonalelemente überein, bei denen nur ein Pol zweiter Ordnung auftritt. Somit ergibt sich für die Determinante

$$R(\omega) = \frac{e^{mx \sum_{j=1}^n \text{ch}(2\omega_j)}}{\Delta^2(\omega) (-1)^n} \det_n V(\omega_j, \omega_k) \quad (5.39)$$

mit

$$V(\omega_j, \omega_k) = \frac{\text{sh}[xm(\text{ch}(2\omega_j) - \text{ch}(2\omega_k))/2]}{\text{sh}(\omega_j - \omega_k)}. \quad (5.40)$$

² Hierbei ist zu beachten, dass die Funktion

$$\frac{1}{\bar{b}(\lambda)} = \left(\frac{\text{ch}(\theta - \lambda) \text{ch}(\lambda + \theta)}{\text{sh}(\theta - \lambda) \text{sh}(\lambda + \theta)} \right)^{s/2}$$

keine Polstellen außer $\pm\theta$ in diesem Streifen der komplexen Ebene besitzt.

Wird dies nun in die Gleichung (5.31) für die erzeugende Funktion eingesetzt, so findet sich

$$\begin{aligned} \left\langle e^{\varphi \mathcal{Q}(-x/2, x/2)} \right\rangle_T &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(e^\varphi - 1)^n}{n!} \left[\prod_{j=1}^n \int_{\mathcal{C}} \frac{d\omega_j e^{-xm \operatorname{ch}(2\omega_j)}}{2\pi i (1 + \exp(-im \operatorname{sh}(2\omega_j)/T))} \right] \Delta^2(\omega) R(\omega) \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(1 - e^\varphi)^n}{n!} \left[\prod_{l=1}^n \int_{\mathcal{C}} \frac{d\omega_l}{2\pi i} \right] \det_n V_F(\omega_j, \omega_k) \end{aligned} \quad (5.41)$$

mit

$$V_F(\omega_j, \omega_k) = \sqrt{\frac{1}{1 + e^{-im \operatorname{sh}(2\omega_j)/T}}} \frac{\operatorname{sh} \left[\frac{xm}{2} (\operatorname{ch}(2\omega_j) - \operatorname{ch}(2\omega_k)) \right]}{\operatorname{sh}(\omega_j - \omega_k)} \sqrt{\frac{1}{1 + e^{-im \operatorname{sh}(2\omega_k)/T}}}. \quad (5.42)$$

Unter Berücksichtigung der Tatsache, dass für einen Integraloperator \hat{K} mit Kernfunktion $K(x, y)$, der auf eine Funktion f wirkt

$$(\hat{K}f)(x) = \int_I dy K(x, y) f(y), \quad (5.43)$$

die zugehörige Fredholm-Determinante die Reihendarstellung

$$\det(1 + \hat{K}) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \left[\prod_{l=1}^n \int_I dy_l \right] \det_n K(y_j, y_k) \quad (5.44)$$

besitzt [99], folgt

$$\left\langle e^{\varphi \mathcal{Q}(-x/2, x/2)} \right\rangle_T = \det \left(1 + \frac{1 - e^\varphi}{2\pi i} \hat{V}_F \right). \quad (5.45)$$

Hierbei ist \hat{V}_F der Integraloperator zum Kern $V_F(\omega_j, \omega_k)$.

Abschließend soll nun der Grenzfall $T = 0$ betrachtet werden. Dazu wird die Kontur \mathcal{C} bis auf ihre möglichen Grenzen $\pm i\pi/4$ ausgedehnt, wie es im linken Bild in Abbildung 5.2 dargestellt ist. Dann gilt

$$\frac{1}{1 + e^{-im \operatorname{sh}(2\lambda)/T}} = \begin{cases} 0 & \text{für } \lambda \in \mathcal{C}_+ \\ 1 & \text{für } \lambda \in \mathcal{C}_- \end{cases}. \quad (5.46)$$

Die in diesem Limes übrig bleibende Kontur \mathcal{C}_- wird auf die reelle Achse verschoben, was in einer Änderung des Integrationskerns

$$K(\omega_j, \omega_k) = -\frac{1}{2\pi i} V_F(\omega_j - i\pi/4, \omega_k - i\pi/4) = \frac{\sin [xm (\operatorname{sh}(2\omega_j) - \operatorname{sh}(2\omega_k))/2]}{2\pi \operatorname{sh}(\omega_j - \omega_k)} \quad (5.47)$$

resultiert. Somit lautet (5.45) im Grenzfall $T = 0$

$$\left\langle e^{\varphi \mathcal{Q}(-x/2, x/2)} \right\rangle_T = \det \left(1 + (e^\varphi - 1) \hat{K} \right). \quad (5.48)$$

Dabei bezeichnet \hat{K} den zu K gehörenden Integraloperator. Dieses Resultat ist bereits bekannt [42], jedoch auf alternative Art gewonnen worden. Mit Hilfe der Vielfachintegraldarstellung für Korrelationsfunktionen war es somit möglich, den $T = 0$ -Fall auf endliche Temperaturen zu verallgemeinern.

Teil II.

**Korrelationsfunktionen der massiven
XXZ-Kette**

6. Hamiltonoperator und Zugang zu den Korrelationsfunktionen

In diesem Kapitel soll zunächst das behandelte Modell, die massive XXZ-Kette eingeführt und der für die weitere Behandlung verwendete Zugang zu den statischen Korrelationsfunktionen kurz erläutert werden.

6.1. Hamiltonoperator und Dichtematrix

Der Hamiltonoperator der XXZ-Kette ist gegeben durch

$$\mathcal{H}_N = J \sum_{j=-N+1}^N \left(\sigma_{j-1}^x \sigma_j^x + \sigma_{j-1}^y \sigma_j^y + \Delta (\sigma_{j-1}^z \sigma_j^z - 1) \right). \quad (6.1)$$

Die Operatoren σ_j^α , $j = -N + 1, \dots, N$ wirken lokal als Paulimatrizen, $\Delta = \text{ch}(\eta)$ ist der Anisotropieparameter und J die Kopplungskonstante der Wechselwirkung nächster Nachbarn. Im Folgenden wird die XXZ-Kette im massiven antiferromagnetischen Regime, d.h. $J > 0$ und $\Delta > 1$ betrachtet.

Der Hamiltonoperator der XXZ-Kette kommutiert mit der z -Komponente des Gesamtspins

$$\mathcal{S}_N^z = \frac{1}{2} \sum_{j=-N+1}^N \sigma_j^z. \quad (6.2)$$

Damit ist der statistische Operator unter Einbeziehung eines externen Magnetfeldes in z -Richtung gegeben durch

$$\rho_N(T, h) = \frac{e^{-(\mathcal{H}_N - h\mathcal{S}_N^z)/T}}{\text{tr}_{-N+1, \dots, N} e^{-(\mathcal{H}_N - h\mathcal{S}_N^z)/T}}. \quad (6.3)$$

Dieser beschreibt für endliche Temperatur T das System im thermischen Gleichgewicht.

Für die Behandlung der XXZ-Kette im Rahmen des Betheansatzes ist der Zusammenhang mit der in Kapitel 2.2 eingeführten Transfermatrix von entscheidender Bedeutung. Er ist gegeben durch

$$\mathcal{H}_N = 2J \sinh(\eta) \frac{\partial}{\partial \lambda} \ln(t(\lambda)) \Big|_{\lambda=0}. \quad (6.4)$$

Dabei sind bei der Definition der zugehörigen Monodromiematrix in (2.13) die Inhomogenitäten $\nu_j = 0$ zu wählen und es gilt $L = 2N$.

Im thermodynamischen Limes $L = 2N \rightarrow \infty$ vereinfacht sich das System drastisch, da nur ein Eigenzustand mit zugehörigem Eigenwert Λ_0^{QTM} der Quantentransfermatrix das thermische Gleichgewicht und damit auch alle statischen Korrelationen beschreibt, siehe Gleichung (2.41) in Kapitel 2.3 und [38].

Um den thermodynamischen Limes für den statistischen Operator (6.3) durchführen zu können, wird zunächst die Dichtematrix

$$D_{[m,n]}(T, h) = \lim_{N \rightarrow \infty} \text{tr}_{-N+1, \dots, m-1, n+1, n+2, \dots, N} \rho_N(T, h) \quad (6.5)$$

für einen endlichen Abschnitt $[m, n]$ der unendlichen Kette eingeführt. Hierbei sind m und n (feste) ganze Zahlen und es gilt $m < n$.

Eine für das weitere Vorgehen wichtige Eigenschaft ist

$$\text{tr}_m D_{[m,n]}(T, h) = D_{[m+1,n]}(T, h), \quad \text{tr}_n D_{[m,n]}(T, h) = D_{[m,n-1]}(T, h), \quad (6.6)$$

welche es erlaubt, die Dichtematrix eines $n - m$ langen Kettensegments aus der Dichtematrix eines überlappenden $n - m + 1$ langen Kettensegments zu bestimmen.

Für den Vektorraum \mathcal{W} , der aus Operatoren im thermodynamischen Limes, die nur auf einem endlichen Abschnitt der Kette nichttrivial wirken, besteht, lässt sich die Abbildung $\mathbf{trf}_{[m,n]} : \mathcal{W} \rightarrow (\mathbb{C}^2)^{\otimes(n-m+1)}$ mittels

$$\mathbf{trf}_{[m,n]} \mathcal{O} = \dots \frac{1}{2} \text{tr}_{m-2} \frac{1}{2} \text{tr}_{m-1} \frac{1}{2} \text{tr}_{n+1} \frac{1}{2} \text{tr}_{n+2} \dots \mathcal{O} \quad (6.7)$$

definieren. Diese Abbildung beschränkt die Wirkung eines beliebigen Operators \mathcal{O} auf das Intervall $[m, n]$. Wegen (6.6) ist die Definition $Z : \mathcal{W} \rightarrow \mathbb{C}$,

$$Z(\mathcal{O}) = \lim_{\substack{m \rightarrow -\infty \\ n \rightarrow \infty}} \text{tr}_{m, \dots, n} D_{[m,n]}(T, h) \mathbf{trf}_{[m,n]} \mathcal{O} \quad (6.8)$$

wohldefiniert und bestimmt den thermischen Erwartungswert eines Operators \mathcal{O} im thermodynamischen Limes. Damit hat das Funktional Z die Rolle des statistischen Operators im Vektorraum \mathcal{W} . Es stellt somit den Grenzfall für ρ_N (6.3) im thermodynamischen Limes dar.

Das Funktional Z erlaubt eine Verallgemeinerung auf den Fall des 6-Vertex-Modells mit einem zusätzlichen, die Unordnung bestimmenden Parameter α . Dieses verallgemeinerte Funktional lässt sich durch zwei unabhängige Funktionen $\varphi(\nu; \alpha)$ und $\omega(\nu_1, \nu_2; \alpha)$ beschreiben [11, 46]. In diesem Zugang ist der physikalische Anteil, d.h. der vom Hamiltonoperator bestimmt wird, vom algebraischen Anteil, der durch die zugrunde liegende Struktur des 6-Vertex-Modells vorgegeben ist, klar getrennt. In dieser Arbeit wurde der physikalische Anteil für die massive XXZ-Kette genauer untersucht. Dazu ist es nötig, den Grenzfall $\alpha \rightarrow 0$ durchzuführen. Hierbei tritt effektiv eine dritte unabhängige Funktion ω' auf.

Für das Verständnis der im folgenden Abschnitt präsentierten Gleichungen und ihrer numerischen Auswertung ist es nicht nötig, die für den algebraischen Anteil nötigen Rechnungen im Detail nachzuvollziehen. Dieses wurde bereits in [10] geleistet. Hier genügt ein generelles Verständnis des Begriffs Faktorisierung im Zusammenhang mit Korrelationsfunktionen. Hierunter versteht man hier, dass beliebige Korrelationsfunktionen durch eine endliche Anzahl von Nachbarkorrelationen, bzw. zugehörigen Funktionen bestimmt werden. Um die physikalische Bedeutung der Korrelationsfunktionen in den Vordergrund zu stellen, wird für den thermischen Erwartungswert der unendlichen XXZ-Kette die einfache Notation $\langle \mathcal{O} \rangle_{T,h} = Z(\mathcal{O})$ verwendet.

Zunächst soll jedoch noch ein kurzer Kommentar zum verwendeten Zugang zu den Korrelationsfunktionen, der in [13] entwickelten, sogenannten exponentiellen Form erfolgen. Dieser Formalismus basiert auf einer Vermutung, zum einen für den physikalischen Anteil der Korrelationsfunktionen im

Limes $\alpha \rightarrow 0$, als auch für den algebraischen Anteil der Einpunktfunktionen. Mittlerweile wurden, auch für $\alpha \neq 0$, exakte Gleichungen hergeleitet, [11, 46], mit deren Hilfe im Grenzfall $\alpha \rightarrow 0$ die hier verwendeten Gleichungen reproduziert werden können [11]. Der algebraische Anteil für bis zu vier Gitterplätze, wurde in [10] auf verschiedene unabhängige Arten kontrolliert. Einerseits wurde mit der Hochtemperaturentwicklung der Vielfachintegrale [39] verglichen, andererseits mit direkten numerischen Berechnungen. Ein weiterer Test findet sich in Kapitel 8.1. Damit folgt aus [11, 16, 46], dass die exponentielle Form aus [10] für beliebige Abstände bei Magnetfeld Null und zumindest für zwei Gitterplätze auch bei endlichem Magnetfeld gültig ist.

6.2. Integralgleichungen für die massive XXZ-Kette

Wie im vorigen Abschnitt beschrieben wurde, bestimmen drei Funktionen $\omega(\nu_1, \nu_2)$, $\omega'(\nu_1, \nu_2)$ und $\varphi(\nu)$ die statischen Korrelationsfunktionen der XXZ-Kette. In [13] wurde eine Beschreibung dieser Funktionen mit Hilfe einer Hilfsfunktion \mathfrak{a} und einer verallgemeinerten Dichtefunktion G gegeben. Diese sogenannte \mathfrak{a} -Formulierung ist geeignet für die Herleitung von Vielfachintegralen für Korrelationsfunktionen [38]. Außerdem erlaubt sie die Hochtemperaturentwicklung der freien Energie und der Korrelationsfunktionen [97] und liefert im $T = 0$ Grenzfall die gewöhnlichen linearen Integralgleichungen [38] (siehe auch Kapitel 8.4). Ein weiterer Vorteil dieser Formulierung ist, dass der Unterschied in der Behandlung der massiven und der masselosen XXZ-Kette nur in der Wahl unterschiedlicher Konturen in der komplexen Ebene besteht.

Für numerische Berechnungen der freien Energie bzw. ihrer Ableitungen [56, 57] oder kurzreichweitiger Korrelationsfunktionen mit Hilfe der Vielfachintegrale [10, 18] ist eine andere Formulierung, die sogenannte $\mathfrak{b}\bar{\mathfrak{b}}$ -Formulierung nützlich. Diese benötigt zwar zwei Funktionen, die in den Bestimmungsgleichungen auftretenden Integrale beinhalten jedoch nur Integrationswege entlang der reellen Achse. In dieser Formulierung unterscheiden sich die Integralgleichungen für die masselose und die massive XXZ-Kette. Der masselose Fall wurde in [10] behandelt. Im Folgenden soll der massive Fall betrachtet werden.

Beginnend mit den Gleichungen für die \mathfrak{a} -Formulierung in [13] werden diese in die $\mathfrak{b}\bar{\mathfrak{b}}$ -Formulierung transformiert. Dies erfolgt mittels diskreter Fouriertransformation und Faltungen und wurde für die Funktionen \mathfrak{a} und G bereits in [18] geleistet. Die Herleitung der im Folgenden gezeigten Gleichungen ist im Anhang B dargestellt.

Grundlegend sind die nichtlinearen Integralgleichungen

$$\ln \mathfrak{b}(x) = -\frac{h}{2T} - \frac{2J \operatorname{sh}(\eta)}{T} d(x) + \kappa * \ln(1 + \mathfrak{b})(x) - \kappa^- * \ln(1 + \bar{\mathfrak{b}})(x), \quad (6.9a)$$

$$\ln \bar{\mathfrak{b}}(x) = \frac{h}{2T} - \frac{2J \operatorname{sh}(\eta)}{T} d(x) + \kappa * \ln(1 + \bar{\mathfrak{b}})(x) - \kappa^+ * \ln(1 + \mathfrak{b})(x), \quad (6.9b)$$

wobei $f * g(x) = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi/2}^{\pi/2} dy f(x-y)g(y)$ eine Faltung bezeichnet. Diese Integralgleichungen und somit die Hilfsfunktionen sind durch die Integrationskerne κ , κ^\pm und die Inhomogenitäten determiniert. Die Inhomogenitäten sind durch den tatsächlich betrachteten Hamiltonoperator bestimmt, während die Integrationskerne durch die algebraische Struktur des zugrunde liegenden 6-Vertex-Modells festgelegt sind. Demzufolge gehen die physikalischen Parameter Magnetfeld h , Kopplung J und Temperatur T nur in die Inhomogenitäten der Integralgleichungen ein. Es zeigt sich, dass auch die weiteren für die Berechnung der Korrelationsfunktionen nötigen Funktionen nur über \mathfrak{b} und $\bar{\mathfrak{b}}$ von diesen physikalischen Parametern abhängen.

Die Hilfsfunktionen \mathfrak{b} und $\bar{\mathfrak{b}}$ erlauben die Berechnung der freien Energie

$$f = -4J \operatorname{sh}(\eta) \kappa(0) - \frac{T}{2\pi} d * \ln [(1 + \mathfrak{b})(1 + \bar{\mathfrak{b}})] \quad (0) \quad (6.10)$$

und damit die Bestimmung thermodynamischer Größen, wie beispielsweise der Entropie, siehe z.B. [57, 95].

Die Funktionen d und κ , κ^\pm besitzen eine einfache Darstellung als Fourierreihen. Diese ergeben sich direkt aus der Herleitung der Integralgleichungen und sind darüber hinaus sehr gut geeignet für die numerische Behandlung dieser Gleichungen,

$$d(x) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} \frac{e^{i2kx}}{\operatorname{ch}(\eta k)}, \quad (6.11a)$$

$$\kappa(x) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} \frac{e^{-\eta|k|+2ikx}}{2 \operatorname{ch}(\eta k)}, \quad \kappa^\pm(x) = \kappa(x \pm i\eta^-). \quad (6.11b)$$

Zur Bedeutung des η^- sei auf den Anhang B verwiesen. Alternativ können sie auch durch spezielle Funktionen dargestellt werden. Für die Funktion d gilt

$$d(x) = \frac{2K}{\pi} \operatorname{dn} \left(\frac{2Kx}{\pi}, i \frac{\eta}{\pi} \right), \quad (6.12)$$

wobei $\operatorname{dn}(x, \tau)$ eine Jacobische elliptische Funktion ist [2], und K das vollständige elliptische Integral erster Art.

Der Integrationskern κ lässt sich durch die normierte trigonometrische Gammafunktion T ausdrücken, die in [74] eingeführt wurde. Um die Funktion T zu definieren, ist es nützlich zuerst die sogenannten q -Gammafunktionen [35]

$$\Gamma_q(z) = (1 - q)^{1-z} \prod_{n=1}^{\infty} \frac{1 - q^n}{1 - q^{z+n+1}} \quad (6.13)$$

einzuführen. Damit ergibt sich dann mit $q = \exp(-4\eta)$

$$T(r; z) = \frac{\Gamma_q(1/2)}{\Gamma_q(iz + 1/2)} \exp \left(-\frac{1}{2} \ln \pi + \frac{rz^2}{2} - iz \ln \left(\frac{1 - e^{-2r}}{2r} \right) \right) \quad (6.14)$$

und schließlich

$$\kappa(x) = \frac{1}{2i} \partial_x \ln \left[\frac{T(2\eta; \frac{x}{2\eta}) T(2\eta; -\frac{x}{2\eta} - \frac{i}{2})}{T(2\eta; -\frac{x}{2\eta}) T(2\eta; \frac{x}{2\eta} - \frac{i}{2})} \right]. \quad (6.15)$$

Zusätzlich zu den Hilfsfunktionen \mathfrak{b} und $\bar{\mathfrak{b}}$ werden zwei weitere Paare von Funktionen benötigt um ω , ω' und φ durch Integralgleichungen beschreiben zu können. Diese sind g_ν^\pm und g'_ν^\pm , welche Lösungen linearer Integralgleichungen sind, in die \mathfrak{b} und $\bar{\mathfrak{b}}$ im Integrationsmaß eingehen

$$g_\nu^+(x) = -d(x - \nu) + \kappa * \frac{g_\nu^+}{1 + \mathfrak{b}^{-1}}(x) - \kappa^- * \frac{g_\nu^-}{1 + \bar{\mathfrak{b}}^{-1}}(x), \quad (6.16a)$$

$$g_\nu^-(x) = -d(x - \nu) + \kappa * \frac{g_\nu^-}{1 + \bar{\mathfrak{b}}^{-1}}(x) - \kappa^+ * \frac{g_\nu^+}{1 + \mathfrak{b}^{-1}}(x) \quad (6.16b)$$

und

$$g'_{\nu}^{+}(x) = -c_{+}(x - \nu) + l * \frac{g_{\nu}^{+}}{1 + \mathfrak{b}^{-1}}(x) - l^{-} * \frac{g_{\nu}^{-}}{1 + \bar{\mathfrak{b}}^{-1}}(x) \\ + \kappa * \frac{g'_{\nu}^{+}}{1 + \mathfrak{b}^{-1}}(x) - \kappa^{-} * \frac{g'_{\nu}^{-}}{1 + \bar{\mathfrak{b}}^{-1}}(x), \quad (6.17a)$$

$$g'_{\nu}^{-}(x) = -c_{-}(x - \nu) + l * \frac{g_{\nu}^{-}}{1 + \bar{\mathfrak{b}}^{-1}}(x) - l^{+} * \frac{g_{\nu}^{+}}{1 + \mathfrak{b}^{-1}}(x) \\ + \kappa * \frac{g'_{\nu}^{-}}{1 + \bar{\mathfrak{b}}^{-1}}(x) - \kappa^{+} * \frac{g'_{\nu}^{+}}{1 + \mathfrak{b}^{-1}}(x). \quad (6.17b)$$

Der neue Integrationskern l und die Funktionen c^{\pm} , die in (6.17) auftreten, sind wie die obigen Funktionen κ und d durch ihre Fourierreihe gegeben

$$l(x) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} \frac{\text{sign}(k)e^{i2kx}}{4 \text{ch}^2(\eta k)}, \quad l^{\pm}(x) = l(x \pm i\eta^{-}), \quad (6.18)$$

wobei hier die normale Konvention für die Vorzeichenfunktion $\text{sign}(0) = 0$ verwendet wurde und

$$c_{\pm}(x) = \pm \sum_{k=-\infty}^{\infty} \frac{e^{\pm\eta k + 2ikx}}{2 \text{ch}^2(\eta k)}. \quad (6.19)$$

Die Funktionen $\omega(\nu_1, \nu_2)$, $\omega'(\nu_1, \nu_2)$ und $\varphi(\nu)$, die die inhomogenen Korrelationsfunktionen bestimmen, lassen sich als Integrale über die Funktionen g^{\pm} und g'^{\pm} darstellen. Es gilt

$$\varphi(\nu) = \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \frac{dx}{2\pi} \left(\frac{g_{\nu}^{-}(x)}{1 + \bar{\mathfrak{b}}(x)^{-1}} - \frac{g_{\nu}^{+}(x)}{1 + \mathfrak{b}(x)^{-1}} \right) \quad (6.20)$$

mit $\tilde{\nu} = -i\nu$, welche als verallgemeinerte Magnetisierung betrachtet werden kann, da die Magnetisierung durch

$$m(h, T) = \frac{1}{2} \langle \sigma_j^z \rangle_{T,h} = -\frac{1}{2} \varphi(0) \quad (6.21)$$

gegeben ist. Dies ist die einzige unabhängige Einpunktfunktion der XXZ-Kette. Die Funktion

$$\omega(\nu_1, \nu_2) = -4\kappa(\tilde{\nu}_2 - \tilde{\nu}_1) + \tilde{K}_{\eta}(\tilde{\nu}_2 - \tilde{\nu}_1) - d * \left(\frac{g_{\tilde{\nu}_1}^{+}}{1 + \mathfrak{b}^{-1}} + \frac{g_{\tilde{\nu}_1}^{-}}{1 + \bar{\mathfrak{b}}^{-1}} \right)(\tilde{\nu}_2) \quad (6.22)$$

mit

$$\tilde{K}_{\eta}(x) = \frac{\text{sh}(2\eta)}{2 \sin(x + i\eta) \sin(x - i\eta)} \quad (6.23)$$

bestimmt die innere Energie [10]. Hier gilt wie oben und auch im Folgenden $\tilde{\nu}_j = -i\nu_j$. Die letzte Funktion, die zur Bestimmung der Korrelationsfunktionen benötigt wird, ist

$$\frac{\omega'(\nu_1, \nu_2)}{\eta} = -4l(\tilde{\nu}_2 - \tilde{\nu}_1) - \tilde{L}_{\eta}(\tilde{\nu}_2 - \tilde{\nu}_1) - d * \left(\frac{g'_{\tilde{\nu}_1}^{+}}{1 + \mathfrak{b}^{-1}} + \frac{g'_{\tilde{\nu}_1}^{-}}{1 + \bar{\mathfrak{b}}^{-1}} \right)(\tilde{\nu}_2) \\ - c_{-} * \frac{g_{\tilde{\nu}_1}^{+}}{1 + \mathfrak{b}^{-1}}(\tilde{\nu}_2) - c_{+} * \frac{g_{\tilde{\nu}_1}^{-}}{1 + \bar{\mathfrak{b}}^{-1}}(\tilde{\nu}_2), \quad (6.24)$$

mit

$$\tilde{L}_\eta(x) = \frac{i \sin(2x)}{2 \sin(x + i\eta) \sin(x - i\eta)}. \quad (6.25)$$

Die physikalische Bedeutung von ω' ist nicht offensichtlich. Die Ableitung nach dem ersten Parameter $\partial_x \omega'(x, y)|_{x, y=0}$ geht in verschiedene Zweipunktfunktionen ein. Allerdings ist der Zusammenhang mit konkreten Zweipunktfunktionen abhängig vom Anisotropieparameter, womit sich keine generelle korrespondierende physikalische Größe angeben lässt.

In [10, 13] wurde gezeigt, dass es zur Berechnung der Korrelationsfunktionen notwendig ist, den homogenen Grenzfall durchzuführen. Dieser Grenzfall ist nichttrivial, da die Koeffizienten des algebraischen Anteils Polstellen haben können, sobald zwei Inhomogenitäten übereinstimmen. Diese Singularitäten werden durch Nullstellen im Zähler, die aus Kombinationen der Funktionen $\omega(\nu_1, \nu_2)$, $\omega'(\nu_1, \nu_2)$ und $\varphi(\nu)$ stammen, aufgehoben. Damit muss in diesen Fällen die l'Hospitalsche Regel angewendet werden, womit sich dann Polynome in den Funktionen $\omega(0, 0)$, $\omega'(0, 0)$, $\varphi(0)$ und ihren Ableitungen bezüglich der Inhomogenitäten, ausgewertet an der Stelle Null, ergeben. Für diese Ableitungen wird die folgende Notation eingeführt. Ableitungen nach dem ersten Argument werden durch einen Index x dargestellt, Ableitungen nach dem zweiten Argument durch einen Index y und die Argumente werden weggelassen. Damit ergibt sich zum Beispiel $\omega_{xyy} = \partial_x \partial_y^2 \omega(x, y)|_{x, y=0}$.

Im nächsten Kapitel werden die transversalen und longitudinalen Zweipunktfunktionen, $\langle \sigma_1^x \sigma_n^x \rangle_{T, h}$ bzw. $\langle \sigma_1^z \sigma_n^z \rangle_{T, h}$, für kurze Abstände diskutiert ($n = 2, 3, 4$). Der algebraische Anteil, d.h. die Koeffizienten, die das Ausdrücken der Korrelationsfunktionen durch die Funktionen φ , ω und ω' erlauben, wurde in [10, 13] berechnet. Es gilt für die Nächste-Nachbarn-Korrelationsfunktionen

$$\langle \sigma_1^z \sigma_2^z \rangle_{T, h} = \text{cth}(\eta) \omega + \frac{\omega'_x}{\eta}, \quad (6.26a)$$

$$\langle \sigma_1^x \sigma_2^x \rangle_{T, h} = -\frac{\omega}{2 \text{sh}(\eta)} - \frac{\text{ch}(\eta) \omega'_x}{2\eta}. \quad (6.26b)$$

Die Gleichungen für die Übernächste-Nachbarn-Korrelationsfunktionen lauten

$$\langle \sigma_1^z \sigma_3^z \rangle_{T, h} = 2 \text{cth}(2\eta) \omega + \frac{\omega'_x}{\eta} + \frac{\text{th}(\eta)(\omega_{xx} - 2\omega_{xy})}{4} - \frac{\text{sh}^2(\eta) \omega'_{xxy}}{4\eta}, \quad (6.27a)$$

$$\langle \sigma_1^x \sigma_3^x \rangle_{T, h} = -\frac{1}{\text{sh}(2\eta)} \omega - \frac{\text{ch}(2\eta)}{2\eta} \omega'_x - \frac{\text{ch}(2\eta) \text{th}(\eta)(\omega_{xx} - 2\omega_{xy})}{8} + \frac{\text{sh}^2(\eta) \omega'_{xxy}}{8\eta}. \quad (6.27b)$$

Für $n = 4$ gilt schließlich für die longitudinale Korrelationsfunktion

$$\begin{aligned} \langle \sigma_1^z \sigma_4^z \rangle_{T, h} = & \frac{1}{768q^4 (-1 + q^6) (1 + q^2) \eta^2} \\ & \left\{ 384q^4 (1 + q^2)^2 (5 - 4q^2 + 5q^4) \eta^2 \omega \right. \\ & - 8 (1 + q^4 (52 + 64q^2 - 234q^4 + 64q^6 + 52q^8 + q^{12})) \eta^2 \omega_{xy} \\ & + 192q^4 (-1 + q^2)^2 (1 + 4q^2 + q^4) \eta^2 \omega_{yy} \\ & + (-1 + q^2)^4 (1 + q^4) (1 + 4q^2 + q^4) \eta^2 [-4\omega_{xyyy} + 6\omega_{xxyy}] \\ & \left. - 768q^4 (-1 - q^2 + q^6 + q^8) \eta \omega'_y \right\} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & + 16(-1+q^2)^3(1+6q^2+11q^4+11q^6+6q^8+q^{10})\eta\omega'_{xyy} \\
 & \quad - 2(-1+q^2)^5(1+2q^2+2q^4+q^6)\eta\omega'_{xyyy} \\
 & + 8(-1+q^2)^3(1+q^2)(1+6q^2+34q^4+6q^6+q^8)\eta^2[\omega_y^2-\omega\omega_{xy}] \\
 & + (-1-4q^2-22q^4-12q^6+12q^{10}+22q^{12}+4q^{14}+q^{16})\eta^2[-6\omega_{yy}^2 \\
 & \quad + 12\omega_{yy}\omega_{xy}+4\omega_y\omega_{yyy}-12\omega_y\omega_{xyy}-4\omega\omega_{xyyy}+6\omega\omega_{xxyy}] \\
 & + 16(-1+q^2)^4(1+q^2)^2(1+q^2+q^4)\eta[\omega_{yy}\omega'_y-\omega_y\omega'_{yy}+\omega\omega'_{xyy}] \\
 & + (-1+q^4)^2(1+5q^2+6q^4+5q^6+q^8)\eta[4\omega_{xyyy}\omega'_y-6\omega_{xxyy}\omega'_y-2\omega_{yyy}\omega'_{yy} \\
 & \quad + 6\omega_{xyy}\omega'_{yy}+2\omega_{yy}\omega'_{yyy}-4\omega_{xy}\omega'_{yyy}-6\omega_{yy}\omega'_{xyy}+4\omega_y\omega'_{xyyy}-2\omega\omega'_{xxyyy}] \\
 & \quad + 3(-1+q^4)^3(1+q^2+q^4)[\omega'_{yyy}\omega'_{xyy}-\omega'_{yy}\omega'_{xyyy}+\omega'_{yy}\omega'_{xxyyy}] \Big\} \quad (6.28)
 \end{aligned}$$

und für die transversale

$$\begin{aligned}
 \langle \sigma_1^x \sigma_4^x \rangle_{T,h} &= \frac{1}{3072q^5(-1+q^6)\eta^2} \\
 & \left\{ -768q^6(1+10q^2+q^4)\eta^2\omega \right. \\
 & \quad + 16q^2(-1+q^2)^2(31+56q^2-30q^4+56q^6+31q^8)\eta^2\omega_{xy} \\
 & \quad - 96q^2(-1+q^2)^2(3+5q^2-4q^4+5q^6+3q^8)\eta^2\omega_{yy} \\
 & \quad + q^2(-1+q^2)^4(1+4q^2+q^4)\eta^2[8\omega_{xyyy}-12\omega_{xxyy}] \\
 & \quad + 192q^2(-3-q^2-q^4+q^8+q^{10}+3q^{12})\eta\omega'_y \\
 & \quad + 8(-1+q^2)^3(1-12q^2-25q^4-25q^6-12q^8+q^{10})\eta\omega'_{xyy} \\
 & \quad + 2(-1+q^2)^5(1+2q^2+2q^4+q^6)\eta\omega'_{xyyy} \\
 & \quad + 16q^2(-1+q^2)^3(17+7q^2+7q^4+17q^6)\eta^2[\omega\omega_{xy}-\omega_y^2] \\
 & \quad + q^2(-5-4q^2-13q^4+13q^8+4q^{10}+5q^{12})\eta^2[12\omega_{yy}^2-24\omega_{yy}\omega_{xy} \\
 & \quad \quad - 8\omega_y\omega_{yyy}+24\omega_y\omega_{xyy}+8\omega\omega_{xyyy}-12\omega\omega_{xxyy}] \\
 & \quad + 8(-1+q^2)^4(1-9q^2-8q^4-9q^6+q^8)\eta[\omega_{yy}\omega'_y-\omega_y\omega'_{yy}+\omega\omega'_{xyy}] \\
 & \quad + (-1+q^4)^2(1+5q^2+6q^4+5q^6+q^8)\eta[-4\omega_{xyyy}\omega'_y+6\omega_{xxyy}\omega'_y \\
 & \quad + 2\omega_{yyy}\omega'_{yy}-6\omega_{xyy}\omega'_{yy}-2\omega_{yy}\omega'_{yyy}+4\omega_{xy}\omega'_{yyy}+6\omega_{yy}\omega'_{xyy}-4\omega_y\omega'_{xyyy}+2\omega\omega'_{xxyyy}] \\
 & \quad \left. + 3(-1+q^4)^3(1+q^2+q^4)[-\omega'_{yyy}\omega'_{xyy}+\omega'_{yy}\omega'_{xyyy}-\omega'_{yy}\omega'_{xxyyy}] \right\}, \quad (6.29)
 \end{aligned}$$

mit $q = e^\eta$. Hierbei wird deutlich, dass die Länge der Formeln drastisch mit wachsendem Abstand zunimmt.

Dies ist auch der Grund dafür, dass dieser Zugang zu Korrelationsfunktionen bisher auf relativ kurze Abstände beschränkt ist, da die Formeln (6.28) und (6.29) mit Hilfe des Computers bestimmt wurden und bisher kein einfaches konstruktives Verfahren zur Bestimmung der Koeffizienten existiert.

Die Ableitungen von $g_\nu^{(\pm)}$ und $g'_\nu^{(\pm)}$ bezüglich ν , die für die Berechnung der Korrelationsfunktionen nötig sind, d.h für die zugehörigen Ableitungen von ω und ω' , sind ebenfalls durch lineare Integralgleichungen gegeben. Diese erhält man durch Differenzieren der Integralgleichungen für $g_\nu^{(\pm)}$ und $g'_\nu^{(\pm)}$. Für die in diesem Kapitel behandelten Korrelationsfunktionen wurden sowohl die nichtlinearen Integralgleichungen für \mathfrak{b} und $\bar{\mathfrak{b}}$ als auch die linearen Integralgleichungen für $g_\nu^{(\pm)}$ und $g'_\nu^{(\pm)}$ und ihre Ableitungen numerisch mittels des *fast Fourier transformation* Algorithmus iterativ gelöst. Die Berechnung dieser Gleichungen erfolgt größtenteils im Fourierraum, in dem die differenzierten Integralgleichungen nur minimal zu modifizieren sind, sodass auf ihre Darstellung hier verzichtet wurde.

7. Thermodynamisches Verhalten der Korrelationsfunktionen

In diesem Kapitel soll anhand einiger Abbildungen das thermodynamische Verhalten der Korrelationsfunktionen beispielhaft gezeigt werden. Wie erwartet, ist bei tiefen Temperaturen das Verhalten durch den Grundzustand dominiert. Daher ist es sinnvoll, sich zunächst das Phasendiagramm des Grundzustands in der Δ - h -Ebene in Erinnerung zu rufen. Es lässt sich ausgehend von der Betheansatz-Lösung der XXZ-Kette (siehe z.B. das Lehrbuch [88]) erhalten und ist in Abbildung 7.1 dargestellt. Das untere kritische Feld h_e (die untere rote Linie) ist durch die Anregungslücke gegeben [21, 101], während das obere kritische Feld, das Sättigungsfeld (die obere rote Linie), durch die explizite Funktion $h_s = 4J(1 + \Delta)$ gegeben ist. Beides sind Phasenübergänge zweiter Ordnung. Für die hier untersuchte massive XXZ-Kette ($\Delta > 1$) existieren also immer zwei Phasenübergänge, die sich auch bei tiefen Temperaturen in den Korrelationsfunktionen wiederfinden lassen.

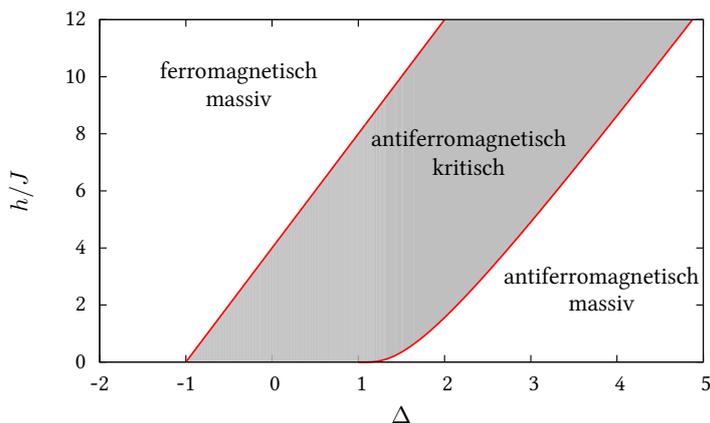


Abbildung 7.1.: Phasendiagramm des Grundzustands der XXZ-Kette

Die Darstellung mittels der nichtlinearen bzw. linearen Integralgleichungen erlaubt eine präzise numerische Bestimmung der Funktionen ω , ω' und φ und damit der im vorigen Kapitel genannten Zweipunktfunktionen. In den Abbildungen 7.2-7.5 sind einige Beispiele verbundener Zweipunktfunktionen dargestellt.

In den Abbildungen 7.2 und 7.4 sind in der linken Spalte jeweils die longitudinalen Korrelationsfunktionen $\langle \sigma_1^z \sigma_n^z \rangle_{T,h} - \langle \sigma_1^z \rangle_{T,h} \langle \sigma_n^z \rangle_{T,h}$ ($n = 2, 3, 4$) zu sehen, während die rechte Spalte die transversalen Korrelationsfunktionen $\langle \sigma_1^x \sigma_n^x \rangle_{T,h} - \langle \sigma_1^x \rangle_{T,h} \langle \sigma_n^x \rangle_{T,h}$ zeigt. Hierbei gilt es zu beachten, dass die Beiträge der Einpunktfunktionen dank der Translationsinvarianz des Hamiltonoperators unabhängig vom Abstand sind. Für die longitudinale Einpunktfunktion gilt $\langle \sigma_1^z \rangle_{T,h} = \langle \sigma_j^z \rangle_{T,h} = 2m$, welche mittels (6.20) bestimmt werden kann. Alle anderen unabhängigen (nichttrivialen) Einpunktfunktionen verschwinden dank der Erhaltung der z -Komponente des Gesamtspins, d.h. insbesondere gilt $\langle \sigma_j^x \rangle_{T,h} = 0$. Daher werden im weiteren Verlauf häufig Magnetisierung und Einpunktfunktion

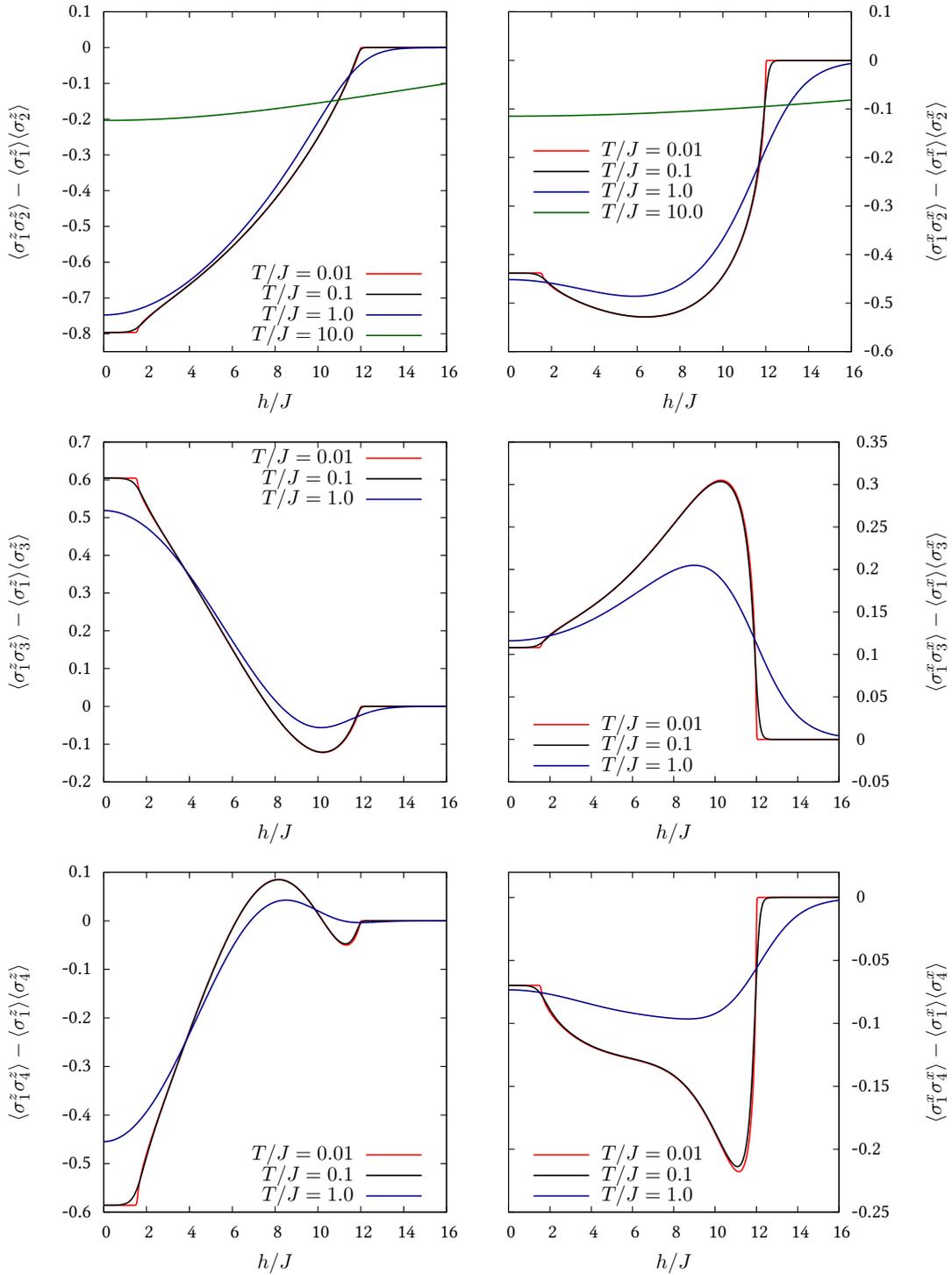


Abbildung 7.2.: $\langle \sigma_1^z \sigma_n^z \rangle - \langle \sigma_1^z \rangle \langle \sigma_n^z \rangle$ und $\langle \sigma_1^x \sigma_n^x \rangle - \langle \sigma_1^x \rangle \langle \sigma_n^x \rangle$ für unterschiedliche Werte der Temperatur T/J bei fester Anisotropie $\Delta = 2$ für $n = 2, 3, 4$

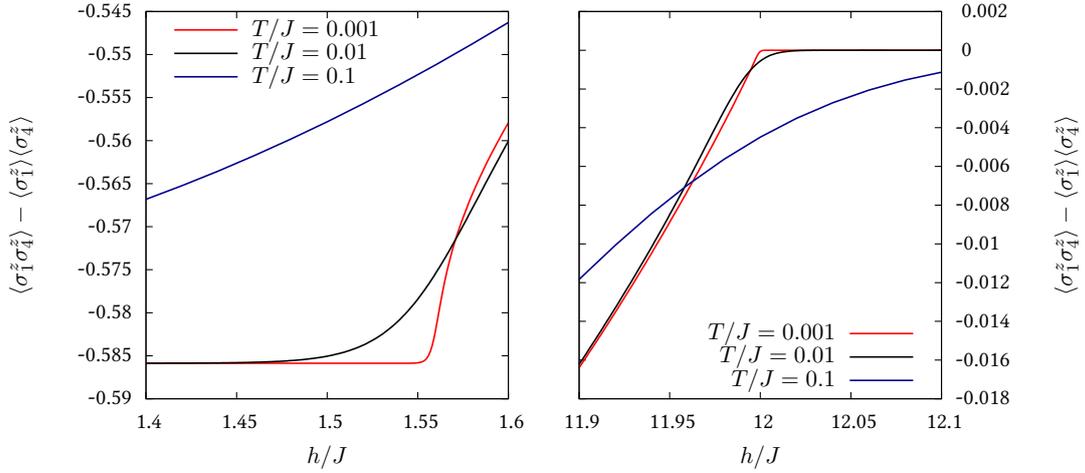


Abbildung 7.3.: $\langle \sigma_1^z \sigma_4^z \rangle - \langle \sigma_1^z \rangle \langle \sigma_4^z \rangle$ für verschiedene tiefe Temperaturen T/J und feste Anisotropie $\Delta = 2$. Die Magnetfelder liegen in der Nähe der kritischen Felder.

synonym verwendet. Die obige Notation für die transversalen verbundenen Korrelationsfunktionen wird somit hauptsächlich verwendet, um konsistent mit der Notation für die longitudinalen verbundenen Korrelationsfunktionen zu sein.

In Abbildung 7.2 sind die Korrelationsfunktionen für $\Delta = 2$ in Abhängigkeit vom Magnetfeld für verschiedene Temperaturen zu sehen. Bei tiefen Temperaturen ($T/J = 0.01$) ist die Präsenz zweier kritischer Felder im Grundzustand deutlich zu erkennen. Für $\Delta = 2$ liegt das Sättigungsfeld bei $h_s = 12J$ und das untere kritische Feld lässt sich zu $h_e \approx 1.55921J$ berechnen. Die Kurven für tiefere Temperaturen lassen sich in der hier gewählten Auflösung praktisch nicht mehr von denen bei $T/J = 0.01$ unterscheiden, sodass darauf verzichtet wurde diese darzustellen. Um den Einfluss des Phasendiagramms des Grundzustands auf das Verhalten bei endlichen Temperaturen besser sehen zu können, ist in Abbildung 7.3 die $\langle \sigma_1^z \sigma_4^z \rangle_{T,h} - \langle \sigma_1^z \rangle_{T,h} \langle \sigma_4^z \rangle_{T,h}$ Korrelationsfunktion für verschiedene tiefe Temperaturen in der Umgebung der kritischen Magnetfelder dargestellt. Hier lassen sich die Kurven für $T/J = 0.01$ und $T/J = 0.001$ klar unterscheiden.

Für Magnetfelder, die größer als das Sättigungsfeld $h_s = 12J$ sind, ist die Korrelationsfunktion konstant, da hier die Sättigung eintritt. Für Magnetfelder, die kleiner als das untere kritische Feld sind, lässt sich ebenfalls ein konstantes Verhalten beobachten. Dies liegt an der Anregungslücke. Des Weiteren ist zu erkennen, dass der Übergang zu konstantem Verhalten bei $T/J = 0.001$ im Vergleich zu der Kurve bei $T/J = 0.01$ deutlich ausgeprägter ist. Im Bereich zwischen den beiden kritischen Feldern, in dem das System masselose Anregungen besitzt, ist in Abbildung 7.2 nicht-monotones Verhalten zu beobachten. Am deutlichsten ist dies bei der $\langle \sigma_1^z \sigma_4^z \rangle_{T,h} - \langle \sigma_1^z \rangle_{T,h} \langle \sigma_4^z \rangle_{T,h}$ Korrelationsfunktion, d.h. diejenige von den hier untersuchten Korrelationsfunktionen, die den größten Abstand zwischen den Gitterplätzen aufweist. Hier sind zwei lokale Extrema zu sehen, wenn die Temperatur hinreichend klein ist. Bei relativ hohen Temperaturen dominieren die thermischen Fluktuationen und die Korrelationen verschwinden. Dies ist beispielhaft in Abbildung 7.2 für den Fall der Korrelationsfunktionen nächster Nachbarn ($n = 2$) in der Kurve für $T/J = 10$ zu sehen. Für Übernächste- und Über-Übernächste-Nachbarn-Korrelationsfunktionen ($n = 3, 4$) ist das Verhalten ähnlich, sodass auf eine Darstellung verzichtet wurde.

In Abbildung 7.4 sind die Korrelationsfunktionen für verschiedene Magnetfelder in Abhängigkeit

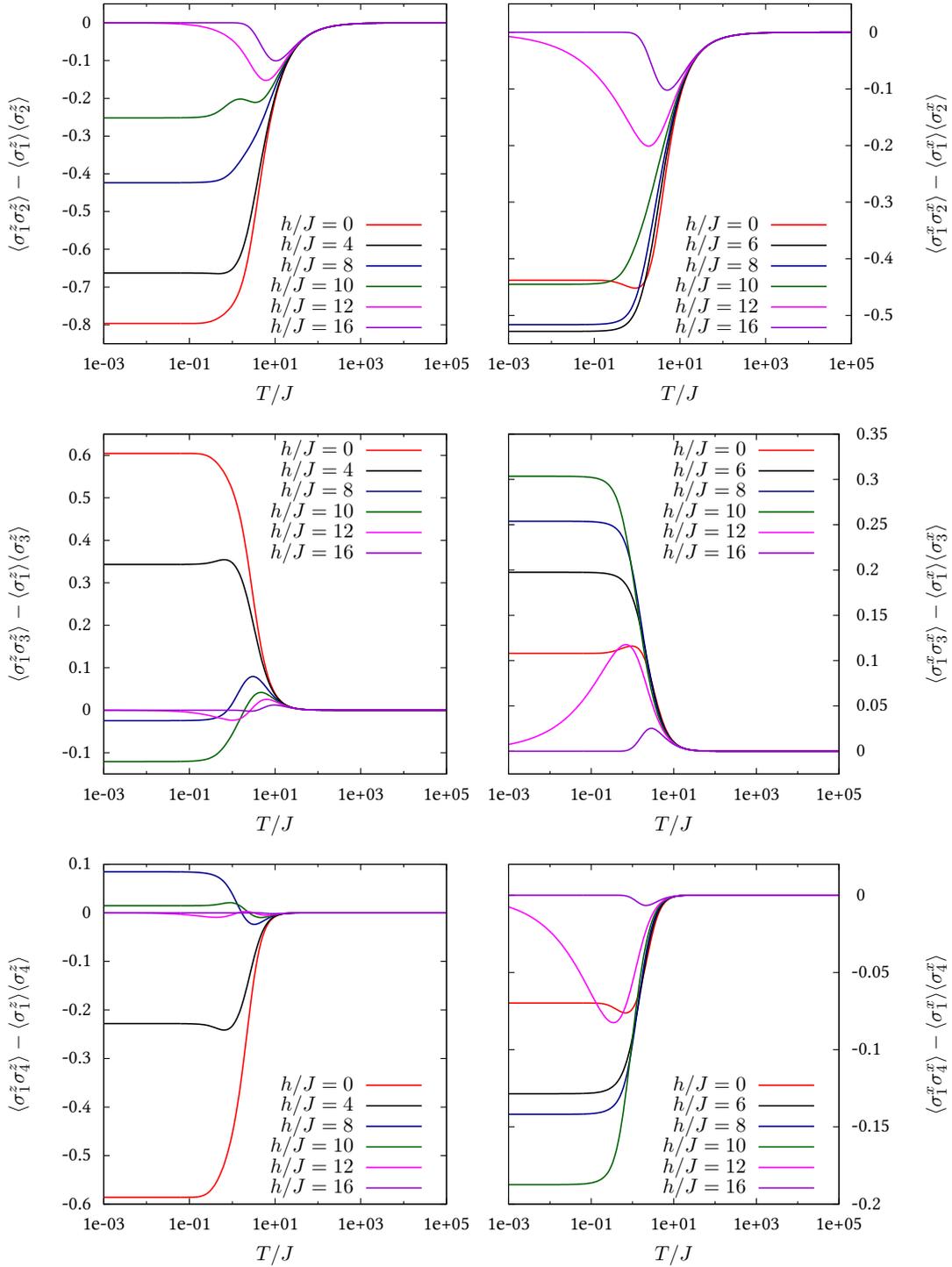


Abbildung 7.4.: $\langle \sigma_1^z \sigma_n^z \rangle - \langle \sigma_1^z \rangle \langle \sigma_n^z \rangle$ und $\langle \sigma_1^x \sigma_n^x \rangle - \langle \sigma_1^x \rangle \langle \sigma_n^x \rangle$ für unterschiedliche Werte des Magnetfeldes h/J bei fester Anisotropie $\Delta = 2$ für $n = 2, 3, 4$

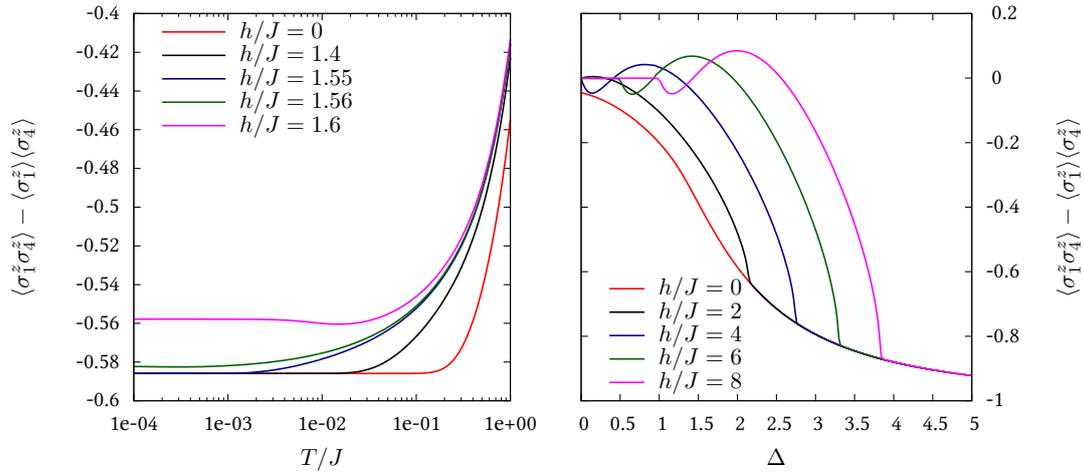


Abbildung 7.5.: Das linke Bild zeigt $\langle \sigma_1^z \sigma_4^z \rangle - \langle \sigma_1^z \rangle \langle \sigma_4^z \rangle$ für verschiedene Magnetfelder h/J und feste Anisotropie $\Delta = 2$. Das rechte Bild zeigt ebenfalls $\langle \sigma_1^z \sigma_4^z \rangle - \langle \sigma_1^z \rangle \langle \sigma_4^z \rangle$ für verschiedene Magnetfelder h/J aber als Funktion der Anisotropie Δ bei $T/J = 0.01$.

von der Temperatur dargestellt. Es wird wiederum die Anisotropie $\Delta = 2$ betrachtet. Hier zeigt sich für Magnetfelder mittlerer Stärke, verglichen mit den kritischen Feldern, ebenfalls nichtmonotones Verhalten.

Bei der Betrachtung des Tieftemperatur-Verhaltens fällt auf, dass die verbundenen Korrelationsfunktionen in nichttrivialer Art sowohl vom Abstand als auch vom Magnetfeld abhängig sind. Für festen Abstand existiert ein Magnetfeld, bei dem die verbundenen Korrelationsfunktionen den betragsmäßig größten Wert bei tiefen Temperaturen annehmen. Bei den hier gezeigten transversalen Korrelationen in der rechten Spalte ist dies $h/J = 6$ für die Nächste-Nachbarn-Korrelationen, aber $h/J = 10$ für die Übernächste- und Über-Übernächste-Nachbarn-Korrelationen. Für die zum Magnetfeld $h/J = 16$, welches größer als das Sättigungsfeld $h_s/J = 12$ ist, gehörigen Korrelationsfunktionen beobachtet man, dass diese sich umso geringer von Null unterscheiden, je größer der betrachtete Abstand der Zweipunktfunktionen ist.

Die Anregungslücke lässt sich ebenfalls gut in den Daten bei endlichen Temperaturen wiederfinden. Im linken Bild in Abbildung 7.5 ist die $\langle \sigma_1^z \sigma_4^z \rangle_{T,h} - \langle \sigma_1^z \rangle_{T,h} \langle \sigma_4^z \rangle_{T,h}$ Korrelationsfunktion in Abhängigkeit von der Temperatur für verschiedene Magnetfelder in der Nähe des unteren kritischen Feldes zu sehen. Mit größer werdendem Magnetfeld beginnen die Korrelationsfunktionen bei immer tieferen Temperaturen sich von der Kurve für $h/J = 0$ zu unterscheiden, bis schließlich der $T = 0$ -Grenzwert sich von dem im $h = 0$ -Fall unterscheidet. Der $T = 0$ -Grenzwert der Korrelationsfunktionen reagiert sehr empfindlich auf kleine Änderungen des Magnetfeldes, wenn diese sehr nah am kritischen Feld h_e liegen. Dies ist beispielsweise gut anhand der Kurven für $h/J = 1.56$, welches leicht größer als das kritische Feld $h_e/J \approx 1.55921$ ist, und $h/J = 1.55$, welches etwas schwächer als das kritische Feld ist, zu erkennen.

Das rechte Bild in Abbildung 7.5 zeigt ebenfalls $\langle \sigma_1^z \sigma_4^z \rangle_{T,h} - \langle \sigma_1^z \rangle_{T,h} \langle \sigma_4^z \rangle_{T,h}$, allerdings diesmal als Funktion der Anisotropie Δ für die konstante Temperatur $T/J = 0.01$ und verschiedene Magnetfelder. Diese Temperatur ist, wie oben gesehen, tief genug um Rückschlüsse auf das Phasendiagramm (Abbildung 7.1) zuzulassen. Für große Werte der Anisotropie Δ ist die verbundene Korrelations-

funktion aufgrund der Anregungslücke unabhängig vom Magnetfeld. Der Übergang der massiven ferromagnetischen Phase zur kritischen antiferromagnetischen Phase lässt sich ebenfalls an einem Beispiel in dieser Abbildung wiederfinden. Für $h/J = 8$ ist bei $\Delta = 1$ eine starke Änderung der Korrelationsfunktion sichtbar. Dieses ist genau das kritische Feld bzw. Sättigungsfeld der XXX-Kette, d.h. für kleinere Anisotropien ist die Kette wiederum vollständig polarisiert und der Wert der Korrelationsfunktion unabhängig von der Anisotropie. Für das Berechnen der Korrelationsfunktionen in dieser Abbildung wurde im Bereich $0 < \Delta < 1$ die Formulierung und das Computerprogramm aus [10] benutzt. Hier gilt es zu beachten, dass die Kurven bei $\Delta = 1$ glatt ineinander übergehen, was ein weiterer Nachweis der numerischen Zuverlässigkeit der nichtlinearen bzw. linearen Integralgleichungen ist.

8. Grenzfälle der massiven XXZ-Kette

Für die massive XXZ-Kette gibt es drei verschiedene Grenzfälle. Als erstes ist der isotrope Limes zur XXX-Kette, der Heisenberg-Kette, zu nennen. Dieser lässt sich für die freie Energie leicht durchführen [95]. Für die Darstellung der Korrelationsfunktionen in Kapitel 6.2 ist dies nicht so einfach möglich, es ist vielmehr so, dass das generelle Bild für die XXZ-Kette an diesem Punkt modifiziert werden muss, da für nichtverschwindendes Magnetfeld zusätzliche Funktionen, sogenannte Momente auftreten, siehe [12]. Dies bedeutet jedoch nicht, dass die Darstellung aus Kapitel 6.2 für $\Delta \rightarrow 1$ unzuverlässige Ergebnisse produzieren würde. Im Gegenteil lassen sich mit den hier dargestellten Gleichungen zusammen mit den Gleichungen aus [10] für die kritische XXZ-Kette glatte Kurven für den vollständigen antiferromagnetischen Bereich erzeugen, siehe Abbildung 7.5 im vorigen Kapitel. Aufgrund der geschilderten Schwierigkeiten für den XXX-Limes wird in diesem Kapitel jedoch nur der leichter zugängliche Ising-Grenzfall betrachtet und darüber hinaus Korrekturen zum Ising-Limes untersucht. Zunächst soll allerdings der auf den ersten Blick trivial erscheinende Grenzfall des Paramagneten betrachtet werden.

8.1. Paramagnet

Der Grenzfall des Paramagneten, $J = 0$, ist aus physikalischer Sicht zwar uninteressant, er erlaubt jedoch einen nichttrivialen Test der in Kapitel 6.2 geschilderten Formulierung für Korrelationsfunktionen. Da die Koeffizienten in den Gleichungen (6.26)-(6.29) von η abhängig, aber die Korrelationsfunktionen in diesem Grenzfall unabhängig von η sind, müssen die Funktionen ω und ω' von η abhängen. Die Funktionen $\ln \mathfrak{b} = -\beta h$ und $\ln \bar{\mathfrak{b}} = \beta h$ sind zwar unabhängig vom Spektralparameter, die Funktionen g_ν^\pm und g'_ν^\pm jedoch nicht. Da \mathfrak{b} und $\bar{\mathfrak{b}}$ konstant sind, sind diese nun durch einfache lineare Gleichungen gegeben. Diese lassen sich daher durch eine einfache, wenn auch längliche Rechnung im Fourierraum lösen. Da das genaue Aussehen der Hilfsfunktionen im Grenzfall des Paramagneten von untergeordnetem Interesse ist, wird hier darauf verzichtet sie anzugeben. Stattdessen werden nur die für die Bestimmung der Korrelationsfunktionen notwendigen Funktionen φ , ω und ω' gezeigt. Sie lauten

$$\varphi(\nu) = -\operatorname{th}\left(\frac{h}{2T}\right), \quad (8.1a)$$

$$\omega(\nu_1, \nu_2) = \tilde{K}_\eta(\tilde{\nu}_2 - \tilde{\nu}_1) \operatorname{th}^2\left(\frac{h}{2T}\right), \quad (8.1b)$$

$$\omega'(\nu_1, \nu_2) = \tilde{L}_\eta(\tilde{\nu}_2 - \tilde{\nu}_1) \operatorname{th}^2\left(\frac{h}{2T}\right). \quad (8.1c)$$

Damit ist nur φ im Grenzfall des Paramagneten unabhängig von der Inhomogenität ν . Damit können bei einer Korrelationsfunktion, deren Darstellung durch obige Funktionen Ableitungen von φ enthält (z.B. die sogenannte *Emptiness formation probability* $P(3)$ [10]), die Koeffizienten vor diesen Ableitungen nicht getestet werden. Für die in dieser Arbeit untersuchten Korrelationsfunktionen

(6.26)-(6.29) stellt der Grenzfall des Paramagneten jedoch einen erfolgreichen Test aller Koeffizienten dar.

8.2. Ising-Kette

Für den Grenzfall der Ising-Kette, d.h. für $\Delta = \infty$ bzw. genauer im Limes $\Delta \rightarrow \infty$ für festes und endliches $J_I = J\Delta$ geht der Hamiltonoperator der XXZ-Kette (6.1) in den Hamiltonoperator der Ising-Kette über. Dieser Grenzfall wird im Folgenden als Ising-Limes bezeichnet. Da im weiteren Verlauf des Kapitels auch eine Diskussion der Korrekturen für endliches Δ erfolgen soll, ist es nützlich den Hamiltonoperator der XXZ-Kette für festes J_I zu betrachten, also

$$\mathcal{H} = \sum_{j=1}^L \left[J(\sigma_{j-1}^z \sigma_j^z - 1) + \frac{J}{\Delta}(\sigma_{j-1}^x \sigma_j^x + \sigma_{j-1}^y \sigma_j^y) - \frac{h}{2} \sigma_j^z \right], \quad (8.2)$$

wobei hier und auch für den Rest dieses Kapitels der Einfachheit halber $J_I = J$ gesetzt und die gebräuchlichere Indizierung $j = 1, \dots, L$ der Kettenplätze verwendet wurde. Des Weiteren wird in diesem Kapitel die Wechselwirkung des Magnetfeldes mit der z -Komponente des Gesamtspins als Teil des Hamiltonoperators aufgefasst.

Im Ising-Limes ergibt sich damit für den Hamiltonoperator

$$\mathcal{H}_I = J \sum_{j=1}^L (\sigma_{j-1}^z \sigma_j^z - 1) - \frac{h}{2} \sum_{j=1}^L \sigma_j^z. \quad (8.3)$$

Die Ising-Kette kann als klassisches eindimensionales Modell der statistischen Mechanik aufgefasst werden. Die zugehörige Transfermatrix ist eine einfache 2×2 -Matrix, mit deren Hilfe sich die Korrelationsfunktionen explizit bestimmen lassen [6],

$$\langle \sigma_j^z \rangle = \frac{\text{sh} \left(\frac{h}{2T} \right)}{\sqrt{\text{sh}^2 \left(\frac{h}{2T} \right) + e^{4J/T}}}, \quad (8.4a)$$

$$\langle \sigma_j^z \sigma_k^z \rangle = \frac{\text{sh}^2 \left(\frac{h}{2T} \right)}{\text{sh}^2 \left(\frac{h}{2T} \right) + e^{4J/T}} + \frac{e^{4J/T}}{\text{sh}^2 \left(\frac{h}{2T} \right) + e^{4J/T}} \left(\frac{\text{ch} \left(\frac{h}{2T} \right) - \sqrt{\text{sh}^2 \left(\frac{h}{2T} \right) + e^{4J/T}}}{\text{ch} \left(\frac{h}{2T} \right) + \sqrt{\text{sh}^2 \left(\frac{h}{2T} \right) + e^{4J/T}}} \right)^{k-j}. \quad (8.4b)$$

Im Folgenden sollen diese bekannten Resultate mithilfe der Formeln aus Kapitel 6.2 analytisch reproduziert, sowie für große Δ eine Übereinstimmung mit numerischen Resultaten überprüft werden. Dies wurde für die Darstellung der Korrelationsfunktionen mittels Vielfachintegralen [38] bereits in [40] getan. Hier wird im Gegensatz dazu mit den Hilfsfunktionen in der $\mathfrak{b}\bar{\mathfrak{b}}$ -Formulierung gestartet. Einige technische Details zur Herleitung der folgenden Gleichungen finden sich im Anhang C.1. Im Ising-Limes ergibt sich

$$\mathfrak{b}(x) = e^{-(h/2+4J)/T} \left(-\text{sh} \left(\frac{h}{2T} \right) + \sqrt{\text{sh}^2 \left(\frac{h}{2T} \right) + e^{4J/T}} \right), \quad (8.5a)$$

$$\bar{\mathfrak{b}}(x) = \frac{e^{h/2T}}{-\text{sh} \left(\frac{h}{2T} \right) + \sqrt{\text{sh}^2 \left(\frac{h}{2T} \right) + e^{4J/T}}}. \quad (8.5b)$$

Hierbei ist zu beachten, dass die Funktionen \mathfrak{b} und $\bar{\mathfrak{b}}$ im Ising-Limes unabhängig vom Spektralparameter sind. Dies trifft ebenfalls auf die Funktionen

$$g_{\nu}^{\pm}(x) = -1 \pm \frac{\operatorname{sh}\left(\frac{h}{2T}\right)}{\sqrt{\operatorname{sh}^2\left(\frac{h}{2T}\right) + e^{4J/T}}} \quad (8.6)$$

zu, welche darüber hinaus auch nicht von der Inhomogenität ν abhängen. Demzufolge sind auch die Funktionen

$$\varphi(\nu) = -\frac{\operatorname{sh}\left(\frac{h}{2T}\right)}{\sqrt{\operatorname{sh}^2\left(\frac{h}{2T}\right) + e^{4J/T}}} \quad (8.7)$$

und

$$\omega(\nu_1, \nu_2) = -\operatorname{cth}\left(\frac{2J}{T}\right) + \frac{e^{2J/T}}{\operatorname{sh}\left(\frac{2J}{T}\right)} \frac{\operatorname{ch}\left(\frac{h}{2T}\right)}{\sqrt{\operatorname{sh}^2\left(\frac{h}{2T}\right) + e^{4J/T}}} \quad (8.8)$$

unabhängig von den Inhomogenitäten. Gleiches gilt für

$$g'_{\nu}^{\pm}(x) = \mp \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\operatorname{ch}\left(\frac{h}{2T}\right)}{\sqrt{\operatorname{sh}^2\left(\frac{h}{2T}\right) + e^{4J/T}}} \right), \quad (8.9)$$

womit sich

$$\frac{\omega'(\nu_1, \nu_2)}{\eta} = 0 \quad (8.10)$$

ergibt. Obige Resultate führen auf die richtige Einpunktfunktion $\langle \sigma^z \rangle$ und die Nächste-Nachbarn-Korrelationsfunktion $\langle \sigma_1^z \sigma_2^z \rangle$. Für die Übernächste-Nachbarn-Korrelationsfunktion und alle größeren Abstände divergieren im Ising-Limes jedoch einige Koeffizienten, die in der faktorisierten Form (6.27)-(6.29) auftreten. Dies soll anhand der $\langle \sigma_1^z \sigma_3^z \rangle$ -Korrelationsfunktion genauer untersucht werden. In der zugehörigen Gleichung (6.27a) ist auf der rechten Seite der Koeffizient $\operatorname{sh}^2(\eta)/\eta$ vor der Funktion ω'_{xxy} zu finden. Terme mit derartigen Koeffizienten müssen separat behandelt werden.¹

Um die Übernächste-Nachbarn-Korrelationsfunktion $\langle \sigma_1^z \sigma_3^z \rangle$ im Ising-Limes zu bestimmen, werden die Funktionen

$$f^{\pm}(x) = \lim_{\eta \rightarrow \infty} \operatorname{sh}(\eta) \partial_{\nu}^2 g_{\nu}^{\pm}(x)|_{\nu=0} \quad (8.11a)$$

$$h^{\pm}(x) = \lim_{\eta \rightarrow \infty} \operatorname{sh}(\eta) \partial_{\nu}^2 g'_{\nu}^{\pm}(x)|_{\nu=0} \quad (8.11b)$$

definiert. Die expliziten Lösungen lassen sich am einfachsten mit Hilfe der durch (8.5) gegebenen Hilfsfunktionen \mathfrak{b} und $\bar{\mathfrak{b}}$ ausdrücken

$$f^+(x) = -\frac{4}{1+\bar{\mathfrak{b}}} e^{i2x} - 4e^{-i2x} \quad (8.12a)$$

$$f^-(x) = -e^{i2x} - \frac{4}{1+\mathfrak{b}} e^{-i2x} \quad (8.12b)$$

$$h^+(x) = -\frac{4}{1+\bar{\mathfrak{b}}} e^{i2x} \quad (8.12c)$$

$$h^-(x) = \frac{4}{1+\mathfrak{b}} e^{-i2x}. \quad (8.12d)$$

¹Im folgenden Abschnitt, genauer gesagt in der zugehörigen Rechnung im Anhang C.3, wird hierzu eine geschicktere und allgemeinere Methode verwendet. Hier genügt allerdings das im Folgenden dargestellte Vorgehen.

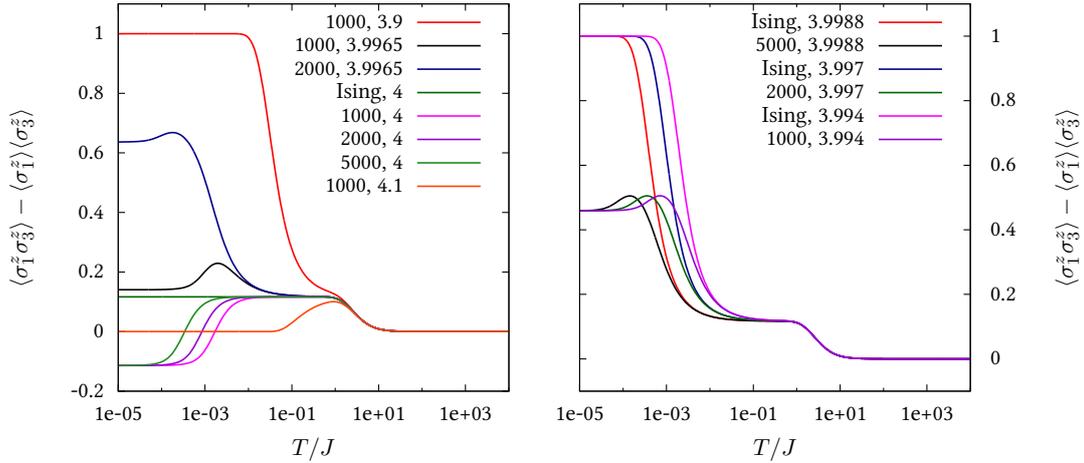


Abbildung 8.1.: Die Zweipunktfunktion $\langle \sigma_1^z \sigma_3^z \rangle - \langle \sigma_1^z \rangle \langle \sigma_3^z \rangle$ für große Werte der Anisotropie, festes J und verschiedene Magnetfelder h/J . Die Legenden in den Abbildungen sind Tupel $\Delta, h/J$, wobei „Ising“ die analytischen Kurven der Ising-Kette bezeichnet.

Werden diese Funktionen in die Gleichung für $\text{sh}^2(\eta)\omega'_{xxy}$ eingesetzt, wie sie sich aus (6.24) ergibt, so folgt im Ising-Limes

$$\lim_{\eta \rightarrow \infty} \frac{\text{sh}^2(\eta)}{\eta} \omega'_{xxy} = 4 - \frac{16}{(1 + \mathfrak{b})(1 + \bar{\mathfrak{b}})} \quad (8.13)$$

für den scheinbar divergenten Summanden in (6.27a). Der gesamte Ausdruck für $\langle \sigma_1^z \sigma_3^z \rangle$ in (6.27a) reproduziert damit das Resultat für die Ising-Kette (8.4b).

Nachdem anhand einiger Beispiele gezeigt wurde, dass die Ising-Kette als Grenzfall in dieser Darstellung der Korrelationsfunktionen enthalten ist, werden als nächstes die analytischen Resultate für die Ising-Kette mit numerischen Daten für große Anisotropie Δ verglichen. In Abbildung 8.1 ist dazu die Temperaturabhängigkeit der verbundenen Korrelationsfunktion $\langle \sigma_1^z \sigma_3^z \rangle - \langle \sigma_1^z \rangle \langle \sigma_3^z \rangle$ der XXZ-Kette für verschiedene Magnetfelder und unterschiedliche (große) Werte der Anisotropie dargestellt.

Es zeigt sich, dass die Kurven für Paare von Anisotropie und Magnetfeld, die zum massiven Bereich des Phasendiagramms in Abbildung 7.1 gehören, unabhängig von der Anisotropie sind und nur vom Magnetfeld abhängen. Darüber hinaus stimmen sie innerhalb der Breite der Linien mit den analytischen Kurven der Ising-Kette (8.4) überein. Dies trifft beispielsweise für die Kurven im linken Bild mit $\Delta = 1000$ und $h/J = 3.9$ oder $h/J = 4.1$ zu. In der Umgebung von $h/J = 4$, d.h. im kritischen Bereich, finden sich jedoch bei tiefen Temperaturen Abweichungen vom Tieftemperatur-Verhalten der Ising-Kette und die Kurven sind nicht länger unabhängig von der gewählten Anisotropie, wie es anhand der Kurven für $h/J = 3.9965$ und $\Delta = 1000$ bzw. $\Delta = 2000$ im linken Bild der Abbildung 8.1 zu erkennen ist. Im rechten Bild sieht man, dass die Korrelationsfunktionen für tiefe Temperaturen nur vom Produkt $(h - h_c)\Delta$ abhängen, wobei $h_c = 4J$ das kritische Feld der Ising-Kette ist. Dieses Verhalten wird in den weiteren Abschnitten dieses Kapitels genauer untersucht und erläutert.

8.3. Tripelpunkt der XXZ-Kette

Wie bereits in Kapitel 7 beschrieben, ist es auch hier nützlich, zunächst das Phasendiagramm des Grundzustands zu betrachten, siehe Abbildung 8.2. Dieses unterscheidet sich aufgrund der Umska-

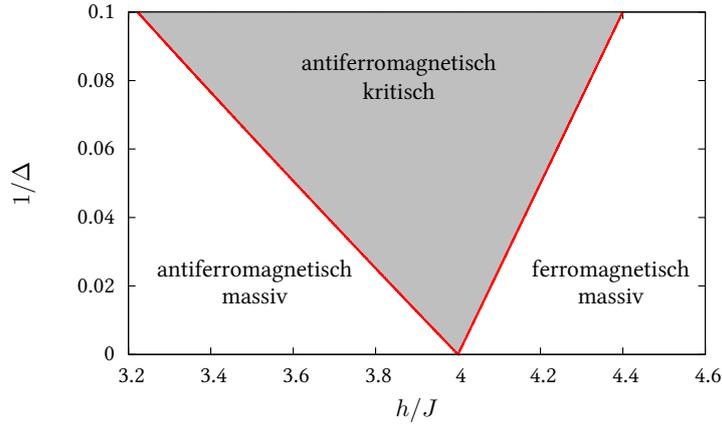


Abbildung 8.2.: Phasendiagramm des Grundzustands der XXZ-Kette in der h - $1/\Delta$ -Ebene für festes J und große Anisotropie Δ

lierung der Kopplung J im Hamiltonoperator (8.2) von dem in Abbildung 7.1 gezeigten. Des Weiteren ist es für die folgende Diskussion geeigneter das Phasendiagramm in der $h - 1/\Delta$ -Ebene zu betrachten, da der Grenzfall $\Delta \rightarrow \infty$ untersucht wird.

Die linke rote Linie entspricht dem unteren kritischen Feld h_e , das durch die Anregungslücke bestimmt ist, während die rechte rote Linie durch das Sättigungsfeld $h_s = 4J(1 + 1/\Delta)$ gegeben ist. Diese Linien entsprechen den Phasenübergängen zwischen der kritischen und den massiven Phasen in Abbildung 8.2. Während die rechte Linie, die dem Sättigungsfeld entspricht, eine Halbgerade ist, trifft dies für die untere Phasenübergangslinie nur asymptotisch zu. Mit Hilfe der exakten Formel für die Anregungslücke [21, 101]

$$h_e = 4J \operatorname{th}(\eta) \sum_{k=-\infty}^{\infty} \frac{(-)^k}{\operatorname{ch}(\eta k)} \quad (8.14)$$

ergibt sich das asymptotische Verhalten $h_e \approx 4J(1 - 2/\Delta)$. Leichte Abweichungen von diesem Verhalten sind im hier gezeigten Phasendiagramm für $\Delta \sim 10$ zu erkennen. Der Punkt $h = 4J$, $\Delta = \infty$, in dem sich die beiden Phasenübergangslinien treffen, ist der Tripelpunkt, dessen Umgebung im weiteren Verlauf genauer untersucht wird. Der Tripelpunkt der XXZ-Kette entspricht dem Phasenübergang erster Ordnung in der Ising-Kette. Hierzu ist es nützlich, zuerst den Hamiltonoperator im Grenzfall großer Anisotropie genauer zu betrachten.

Wie bereits gesehen, vereinfacht sich der Hamiltonoperator (8.2) im Ising-Limes zum Hamiltonoperator der Ising-Kette (8.3), welcher hier der Vollständigkeit halber erneut angegeben wird

$$\mathcal{H}_I(h) = \sum_{j=1}^L \left[J(\sigma_{j-1}^z \sigma_j^z - 1) - \frac{h}{2} \sigma_j^z \right] = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^L \operatorname{diag}(-h, -4J, -4J, h)_{j-1,j}. \quad (8.15)$$

Der Hamiltonoperator ist diagonal in einer Basis, die aus Tensorprodukten lokaler S^z -Eigenzustände besteht. Dies erlaubt es direkt, den Grundzustand in Abhängigkeit des Magnetfeldes zu bestimmen. Für $h < 4J$ bilden die beiden Néel-Zustände den Grundzustand, während für $h > 4J$ der Grundzustand durch den vollständig polarisierten Zustand, in dem alle Spins nach oben zeigen, gegeben ist. Im ersten Fall verschwindet die Magnetisierung pro Gitterplatz, während sie im zweiten Fall 0.5 beträgt. Damit existiert, wie bereits oben erwähnt, ein Phasenübergang erster Ordnung bei $h = h_c = 4J$.

Die Form des Hamiltonoperators (8.15) erlaubt es direkt zu erkennen, dass am kritischen Punkt alle Zustände, bei denen nicht zwei benachbarten Spins nach unten zeigen, entartet sind und die minimale Energie $-2JL$ besitzen. Dies führt zu einer exponentiellen Entartung des Grundzustands am kritischen Punkt und damit zu nichtverschwindender Entropie pro Gitterplatz s im $T=0$ -Grenzfall, welche durch den Goldenen Schnitt $s = (1 + \sqrt{5})/2$ gegeben ist [6]. Alle Zustände, bei denen genau zwei benachbarte Spins nach unten zeigen, bilden den ersten angeregten Zustand mit einer Anregungslücke von $4J$. Die Magnetisierung pro Gitterplatz am kritischen Punkt unterscheidet sich sowohl von der in der ferromagnetischen Phase, als auch von der in der antiferromagnetischen Phase der Ising-Kette und ist durch $m = 1/(2\sqrt{5})$ gegeben. Dies folgt direkt aus (8.4a).

Für das weitere Vorgehen ist es nützlich, zunächst den Hamiltonoperator (8.2) umzuschreiben

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_I(h_c) + \frac{J}{\Delta} \sum_{j=1}^L \left(\sigma_{j-1}^x \sigma_j^x + \sigma_{j-1}^y \sigma_j^y - 2\alpha \sigma_j^z \right) \quad (8.16)$$

wobei $\alpha = \Delta(h/h_c - 1)$ ist. Für hinreichend großes Δ und festes α wird der zweite Term im obigen Hamiltonoperator klein, sodass es sich anbietet, ihn als Störung zum Hamiltonoperator der Ising-Kette am kritischen Punkt $\mathcal{H}_I(h_c)$ aufzufassen.

Das Aufheben der Entartung des Grundzustands unter Einfluss der Störung lässt sich mit Hilfe eines effektiven Hamiltonoperators, der mittels entarteter Störungsrechnung zu berechnen ist, erklären. Diese Rechnung, die im Anhang C.2 skizziert wird, ist analog zur Herleitung des Hamiltonoperators der Heisenbergkette aus dem Hamiltonoperator des Hubbardmodells bei Halbfüllung im Grenzfall starker Kopplung (siehe z.B. Anhang 2.A in [26]). Eine weitere Folge der Umskalierung des Magnetfeldes ist, dass Kurven zu festem α Geraden, die im kritischen Punkt $h = h_c$ und $\Delta = \infty$ münden, in Abbildung 8.2 entsprechen.

In zweiter Ordnung entarteter Störungsrechnung ergibt sich damit der effektive Hamiltonoperator

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & -2JL + \frac{J}{\Delta} P_0 \underbrace{\sum_{j=1}^L \left(\sigma_{j-1}^x \sigma_j^x + \sigma_{j-1}^y \sigma_j^y - 2\alpha \sigma_j^z \right)}_{:=\mathcal{H}_1} P_0 \\ & - \frac{J}{\Delta^2} P_0 \sum_{j=1}^L \left[\frac{1}{2} (1 - \sigma_{j-1}^z) (1 - \sigma_{j+1}^z) + \left(\sigma_{j-2}^+ \sigma_{j-1}^- \sigma_j^+ \sigma_{j+1}^- + h.c. \right) \right] P_0. \end{aligned} \quad (8.17)$$

Hierbei ist P_0 der Projektor auf den Unterraum, der keine benachbarten nach unten zeigende Spins besitzt. Auffällig ist dabei, dass das Magnetfeld nicht in den Term, der zur Korrektur zweiter Ordnung gehört, eingeht.

Der Term erster Ordnung ist ein integrierbarer Hamiltonoperator [1, 3], der im weiteren Verlauf mit \mathcal{H}_1 bezeichnet wird. Die Tatsache, dass die Korrektur erster Ordnung integrierbar ist, ist analog zu der oben erwähnten Situation des eindimensionalen Hubbardmodells im Grenzfall starker Kopplung.

Der Operator $\rho_1 = e^{-J\mathcal{H}_1/\Delta T} / \text{tr} e^{-J\mathcal{H}_1/\Delta T}$ ersetzt den statistischen Operator der XXZ-Kette in niedrigster Ordnung in $1/\Delta$. Im Grenzfall $T \rightarrow 0$ wird dieser statistische Operator zum Projektor auf den Grundzustand des Hamiltonoperators \mathcal{H}_1 . Damit folgt, dass in führender Ordnung die Korrelationsfunktionen des Grundzustands nur von α abhängig sind, d.h. sie sind konstant auf geraden Linien die im Tripelpunkt, dem kritischen Punkt der Ising-Kette, münden. Die Korrelationsfunktionen auf Linien parallel zur h -Achse in 8.2 müssen kontinuierlich zwischen den beiden

Phasengrenzen verlaufen. Dies muss insbesondere für die Magnetisierung oder äquivalent dazu die zugehörige Einpunktfunktion $\langle \sigma^z \rangle$ gelten. Wird diese für feste α im Limes $\Delta \rightarrow \infty$ berechnet, so muss sie stetig zwischen 0 und 1 variieren. Dies beschreibt bereits sehr gut das generelle Verhalten in der Nähe des Tripelpunktes.

Betrachtet man die Thermodynamik für den effektiven Hamiltonoperator (8.17) bei festem α , so fällt auf, dass der Anisotropieparameter nur als Vorfaktor auftritt. Folglich führt eine Reskalierung der Temperatur $\tau = \Delta T$ dazu, dass bei festem α und τ im Grenzfall $\Delta \rightarrow \infty$ nur \mathcal{H}_1 überlebt und alle weiteren Terme der Störungsreihe verschwinden. In diesem Limes wird also der ursprüngliche Hamiltonoperator der XXZ-Kette durch den Hamiltonoperator \mathcal{H}_1 ersetzt. Das ist gerechtfertigt, falls die Anisotropie hinreichend groß ist, sodass der zweite Term in (8.17) vernachlässigbar gegenüber \mathcal{H}_1 ist. Dies gilt bereits in guter Näherung für $\Delta > 10$, siehe Kapitel 8.5. Des Weiteren muss die Temperatur T klein genug im Vergleich zur Anregungslücke $4J$ des Hamiltonoperators der Ising-Kette $\mathcal{H}_I(h_c)$ sein, ansonsten kann die Störungsrechnung keine sinnvollen Resultate erzielen. Der Grund dafür ist, dass in der Störungsrechnung alle Zustände, die zu anderen Energieniveaus des ungestörten Hamiltonoperators gehören, wegfallen. Diese Zustände sind aber bei Temperaturen in der Größenordnung der Anregungslücke nicht länger unterdrückt und tragen zum thermodynamischen Verhalten bei.

Mittels obiger Störungsrechnung lässt sich also ein qualitatives Bild der Umgebung des Tripelpunktes gewinnen. Eine quantitative Analyse in führender Ordnung ist aufgrund der Integrierbarkeit des Hamiltonoperators \mathcal{H}_1 möglich. Diese wird im weiteren Verlauf jedoch nicht ausgenutzt, sondern es werden die Resultate für die XXZ-Kette aus Kapitel 6.2 im oben beschriebenen Skalenlimes und im $T = 0$ -Grenzfall für $\Delta \rightarrow \infty$ untersucht. Auf diese Weise können explizite Resultate für die Magnetisierung und kurzreichweitige Korrelationsfunktionen gewonnen werden. Dies wird in den weiteren Abschnitten dieses Kapitels besprochen. Hier soll zunächst das bereits in Abbildung 8.1 gezeigte Temperaturverhalten der XXZ-Kette bei großen Anisotropien genauer besprochen werden.

Es zeigt sich jedoch, dass für die Diskussion der Temperaturabhängigkeit der Korrelationsfunktionen die Magnetisierung am besten geeignet ist, da sie eine monoton wachsende Funktion des Magnetfeldes ist. Die Magnetisierung ist in den Abbildungen 8.3, 8.4 und 8.5 zu sehen.

Abbildung 8.3, in der die Einpunktfunktion $\langle \sigma^z \rangle$ als Funktion der Anisotropie und des Magnetfeldes h bei sehr tiefen Temperaturen zu sehen ist, zeigt deutlich das singuläre Verhalten der Magnetisierung in der Umgebung des Tripelpunktes. In Abbildung 8.4 hingegen sind die Werte der Einpunktfunktion ebenfalls bei sehr tiefen Temperaturen als Farbverlauf dargestellt, diesmal in Abhängigkeit der Anisotropie und des reskalierten Magnetfeldes α . Zusätzlich sind dort einige Isolinien der Magnetisierung eingezeichnet. Dies erlaubt es besser, die Abweichungen des asymptotischen Verhaltens, d.h. konstante Werte der Korrelationsfunktionen auf Linien mit festem α , für $\Delta \sim 10$ zu erkennen.

Zusätzlich sind in Abbildung 8.6 die Zweipunktfunktionen für Nächste- und Übernächste-Nachbarn zu sehen. Hierbei ist besonders zu beachten, dass die transversalen Korrelationsfunktionen im $T = 0$ -Limes nicht verschwinden, was an der quantenmechanischen Restwechselwirkung für endliche Anisotropie Δ liegt.

Im linken Bild der Abbildung 8.5 ist zu sehen, dass bereits kleine Veränderungen sowohl des magnetischen Feldes, als auch der Anisotropie starke Änderungen im Verlauf bei tiefen Temperaturen hervorrufen können, was an der Nähe zum kritischen Punkt im Phasendiagramm (Abbildung 8.2) liegt. Der Kegel, der die kritische Phase einschliesst, entspricht (asymptotisch) $\alpha \in [-2, 1]$, dies wird im nächsten Abschnitt genauer begründet. Der Punkt $\Delta = 1000$, $h/J = 3.9$ liegt außerhalb der kritischen Phase in der antiferromagnetischen massiven Phase, während der Punkt $\Delta = 1000$, $h/J = 4.1$ in der vollständig polarisierten ferromagnetischen Phase liegt. Die Kurven der Ma-

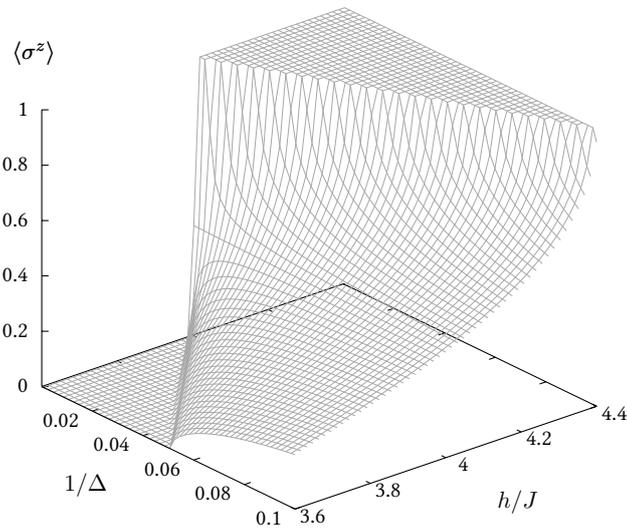


Abbildung 8.3.: Einpunktfunktion $\langle \sigma^z \rangle$ der XXZ-Kette in der Nähe des Tripelpunktes für $T \rightarrow 0$ ($T = 0.0001$)

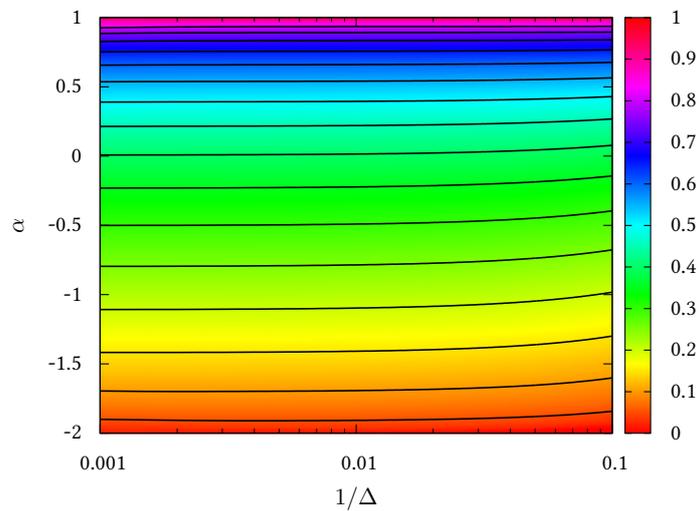


Abbildung 8.4.: Einpunktfunktion $\langle \sigma^z \rangle$ der XXZ-Kette für $T \rightarrow 0$ ($T = 0.0001$). Die Linien zeigen $\langle \sigma^z \rangle = 0.05, 0.1, \dots, 0.8$.

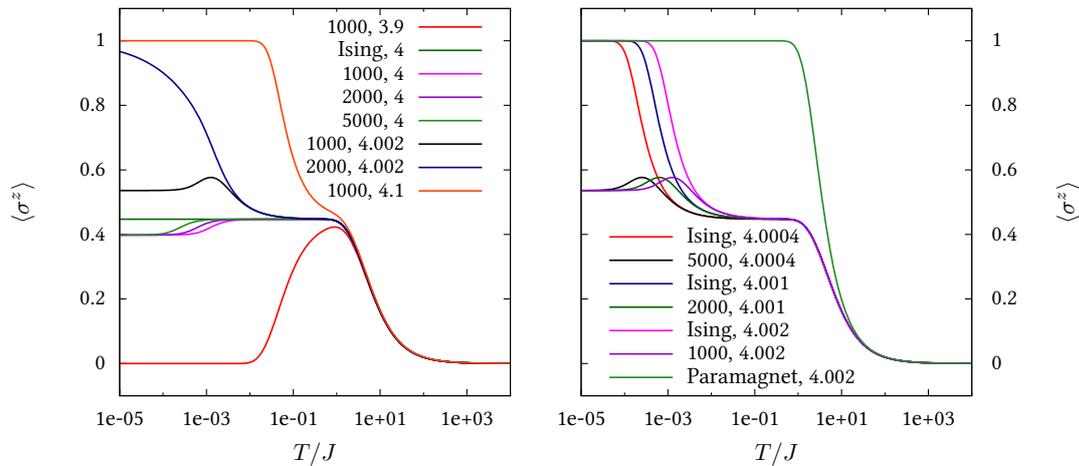


Abbildung 8.5.: Die Einpunktfunktion $\langle \sigma^z \rangle$ für große Anisotropien, festes J und verschiedene Magnetfelder h/J . Die Legende in den Abbildungen besteht aus Tupeln $\Delta, h/J$, wobei „Ising“, die analytischen Kurven der Ising-Kette (8.4) bezeichnet und „Paramagnet“, die des Paramagneten.

gnetisierung stimmen, wie bereits die Kurven der Zweipunktfunktionen im vorigen Abschnitt, mit Fehlern innerhalb der Breite der Linien mit denen der Ising-Kette bei identischen Magnetfeldern überein. Alle übrigen Kurven gehören zu Punkten, die innerhalb der kritischen Phase liegen, und unterscheiden sich daher für tiefe Temperaturen von denen der Ising-Kette. Dies lässt sich insbesondere an den Kurven für $h/J = 4$, d.h. für $h = h_c$, was wiederum $\alpha = 0$ entspricht, erkennen. Mit wachsendem Δ werden die Kurven der XXZ-Kette der Kurve der Ising-Kette am kritischen Punkt immer ähnlicher, bis sie schließlich bei hinreichend tiefer Temperatur davon abweichen und einem von dem $T = 0$ -Wert der Ising-Kette $\langle \sigma^z \rangle = 1/\sqrt{5}$ abweichenden Wert zustreben. Da der Kegel mit wachsendem Δ immer schmaler wird, lässt sich für jedes vom kritischen Feld h_c abweichendes Magnetfeld h eine Anisotropie finden, sodass für alle größeren Anisotropien der entsprechende Punkt im Phasendiagramm außerhalb des Kegels liegt und die zugehörigen Korrelationsfunktionen sich wie diejenigen der Ising-Kette verhalten.

Im rechten Bild in Abbildung 8.5 sind Kurven für verschiedene Anisotropien und Magnetfelder zu sehen, die alle $\alpha = 0.5$ entsprechen. Zusätzlich sind die zu dem jeweiligen Magnetfeld gehörenden Kurven der Ising-Kette dargestellt. Des Weiteren ist für ein Magnetfeld die Kurve des Paramagneten eingezeichnet. Anhand dieses Bildes lassen sich fünf verschiedene Temperaturbereiche identifizieren. Für sehr große Temperaturen wird das Verhalten nur durch die Dimension des zugrunde liegenden Hilbertraumes des Hamiltonoperators bestimmt. Dies ist der Bereich, in dem die Kurve des Paramagneten mit den restlichen Kurven übereinstimmt. Danach kommt ein Bereich $T \gg h$ in dem die Kurven unabhängig von Δ und h sind. Für einen Bereich mittlerer Temperatur, $T \approx h$, sind sie unabhängig von der hinreichend großen Anisotropie und werden nur durch das Magnetfeld bestimmt. In diesem Bereich stimmen sie mit den Kurven der Ising-Kette überein. Dieser Bereich erstreckt sich bis $T \approx 10J/\Delta$, da hier die thermischen Fluktuationen immer noch die von \mathcal{H}_1 stammenden, quantenmechanischen Fluktuationen dominieren. Im Anschluss daran folgt ein Gebiet $T \approx J/\Delta$, in dem diese Fluktuationen von ähnlicher Größe sind. Hier hängen die Korrelationsfunktionen sowohl vom Magnetfeld als auch der Anisotropie ab. Sie lassen sich jedoch zur Deckung bringen, d.h. in

diesem Bereich unabhängig von der Anisotropie machen, indem die obige reskalierte Temperatur $\tau = T\Delta$ eingeführt wird. Dies wird im Abschnitt 8.5 genauer besprochen. Im Bereich sehr tiefer Temperaturen, $T \ll J/\Delta$, bestimmt das reskalierte Magnetfeld $\alpha = \Delta(h/h_c - 1)$ den Wert der Korrelationsfunktionen. Letzteres wird im nächsten Abschnitt detailliert diskutiert.

8.4. Grenzfall $T = 0$ in der Umgebung des Tripelpunktes

Obwohl es von der Herleitung der zugehörigen Gleichungen her am effektivsten ist, zunächst den Skalenlimes mit reskalierter Temperatur $\tau = T\Delta$ zu betrachten, soll zuerst der $T = 0$ -Grenzfall besprochen werden, da bei dieser Vorgehensweise die im vorigen Abschnitt geschilderten Temperaturbereiche besser voneinander getrennt besprochen werden können. Die Herleitung der im weiteren Verlauf gezeigten Gleichungen findet sich im Anhang C.3, wo diese als Grenzfall der Gleichungen im Skalenlimes betrachtet werden. Sowohl für den $T = 0$ -Grenzfall auch als für den Skalenlimes ist es nützlicher, nicht direkt von den Gleichungen aus Kapitel 6.2, die für die Numerik genutzt wurden, auszugehen, sondern von den in [13] ursprünglich verwendeten, wie sie im Anhang B zu finden sind. Der Grund dafür ist, dass im $T = 0$ -Grenzfall die Integrale linear werden und das Integrationsintervall in diesem Fall der Fermisee ist, während im anderen Fall über sein Komplement integriert würde. Im hier betrachteten Limes großer Anisotropie für festes α ergeben sich schließlich algebraische Gleichungen.

Grundlegend für den $T = 0$ -Grenzfall ist, dass die Hilfsfunktionen in diesem Limes in die *dressed energy* ε übergehen. Genauer gilt [38]

$$\varepsilon(x) = \lim_{T \rightarrow 0} T \ln \bar{\mathbf{b}}(x) = - \lim_{T \rightarrow 0} T \ln \mathbf{a}(ix - \eta/2), \quad (8.18)$$

wobei $\bar{\mathbf{b}}$ in (6.9b) und \mathbf{a} in (B.4) gegeben sind. Aus letzterer Gleichung folgt sofort

$$\varepsilon(x) = h - 4J \operatorname{sh}(\eta) \tilde{K}_{\eta/2}(x) - \int_{-\Lambda}^{\Lambda} \frac{dy}{\pi} \tilde{K}_{\eta}(x-y) \varepsilon(y) \quad (8.19)$$

mit $\varepsilon(\pm\Lambda) = 0$.

Mit dem im vorigen Kapitel eingeführten reskalierten Magnetfeld α , d.h. nach Einsetzen von $h = h_c \left(1 + \frac{\alpha}{\Delta}\right)$ und Entwickeln der Gleichung bis zur Ordnung $1/\Delta$ ergibt sich

$$\varepsilon(x) = \frac{h_c \alpha}{\Delta} - \frac{h_c \cos(2x)}{\Delta} - \int_{-\Lambda}^{\Lambda} \frac{dy}{\pi} \varepsilon(y). \quad (8.20)$$

Diese Gleichung kann explizit gelöst werden

$$\varepsilon(x) = \frac{h_c}{\Delta} \left(\frac{\alpha + \sin(\pi c)/\pi}{1 + c} - \cos(2x) \right), \quad (8.21)$$

wobei $c = \frac{2}{\pi} \Lambda$ den normalisierten Fermipunkt bezeichnet. Dieser wird allein durch das reskalierte Magnetfeld α bestimmt,

$$\alpha = (1 + c) \cos(\pi c) - \frac{1}{\pi} \sin(\pi c). \quad (8.22)$$

Dabei ist c eine monotone Funktion von α für $\alpha \in [-2, 1]$. Die Intervallgrenzen -2 und 1 entsprechen den Phasenübergangslinien in Abbildung 8.2. Dies gilt exakt für das Sättigungsfeld h_s , bzw. bis zur Ordnung $1/\Delta$ für die Anregungslücke h_e (8.14). Für Magnetfelder h außerhalb der kritischen Phase, d.h. h entweder kleiner als h_e oder größer als das Sättigungsfeld h_s , ist der Grundzustand unabhängig vom Magnetfeld. Damit sind in diesen Fall auch die Fermipunkte unabhängig vom Magnetfeld.

Die Grundzustandsenergie pro Gitterplatz e ist gegeben durch

$$e = -\frac{h}{2} + \int_{-\Lambda}^{\Lambda} \frac{dy}{\pi} \tilde{K}_{\eta/2}(y) \varepsilon(y) \quad (8.23)$$

$$\approx -\frac{h_c}{2} \left(1 + \frac{\alpha}{\Delta}\right) - \frac{h_c}{\Delta} \frac{\frac{1}{\pi} \sin(\pi c) - \alpha c}{1+c}. \quad (8.24)$$

Dies erlaubt das Berechnen der Magnetisierung in führender Ordnung

$$m = \frac{\langle \sigma^z \rangle}{2} = \frac{1-c}{2(1+c)}. \quad (8.25)$$

Alternativ kann dieses Resultat natürlich auch mittels der Funktion φ erzielt werden, siehe (6.20) bzw. (B.16). Für die magnetische Suszeptibilität ergibt sich

$$\chi = \frac{\Delta}{h_c} \frac{1}{(1+c)^3 \sin(\pi c)}, \quad (8.26)$$

die offensichtlich an den zu den Phasenübergangslinien gehörenden Punkten $c=0$ und $c=1$ divergiert.

Die Vorgehensweise für die kurzreichweitigen Korrelationsfunktionen ist ähnlich, siehe Anhang C.3. Dort wird der $T=0$ -Limes der Funktionen ω und ω' und der für ihre Berechnung notwendigen Hilfsfunktionen g^\pm und g'^\pm bestimmt. Auf diese Art ergeben sich die folgenden Gleichungen für die kurzreichweitigen Nachbarkorrelationen für $T=0$

$$\langle \sigma_1^z \sigma_2^z \rangle = \frac{1-3c}{1+c}, \quad (8.27a)$$

$$\langle \sigma_1^x \sigma_2^x \rangle = -\frac{2 \sin(\pi c)}{\pi(1+c)}, \quad (8.27b)$$

$$\langle \sigma_1^z \sigma_3^z \rangle = \frac{1-3c+4c^2}{1+c} - \frac{4 \sin^2(\pi c)}{\pi^2(1+c)}, \quad (8.27c)$$

$$\langle \sigma_1^x \sigma_3^x \rangle = \frac{2 \sin^2(\pi c)}{\pi^2(1+c)} - \frac{2c \sin(2\pi c)}{\pi(1+c)} + \frac{\sin(2\pi c)}{\pi}. \quad (8.27d)$$

In Abbildung 8.6 sind die asymptotischen Werte der Korrelationsfunktionen für $T=0$ und die exakten temperaturabhängigen Kurven, die numerisch mittels der Gleichungen aus Kapitel 6.2 berechnet wurden, zu sehen. Diese stimmen wie erwartet bei tiefen Temperaturen überein.

Die asymptotischen Werte der Korrelationsfunktionen, wie sie sich aus (8.27) ergeben, sind in Abhängigkeit vom reskalierten Magnetfeld α in Abbildung 8.7 dargestellt. Zusätzlich ist dort auch der Fermipunkt als Funktion von α zu sehen. Dabei ist deutlich, dass sowohl der Fermipunkt c als auch die Magnetisierung, bzw. die Einpunktfunktion $\langle \sigma^z \rangle$, monotone Funktionen des Magnetfeldes sind.

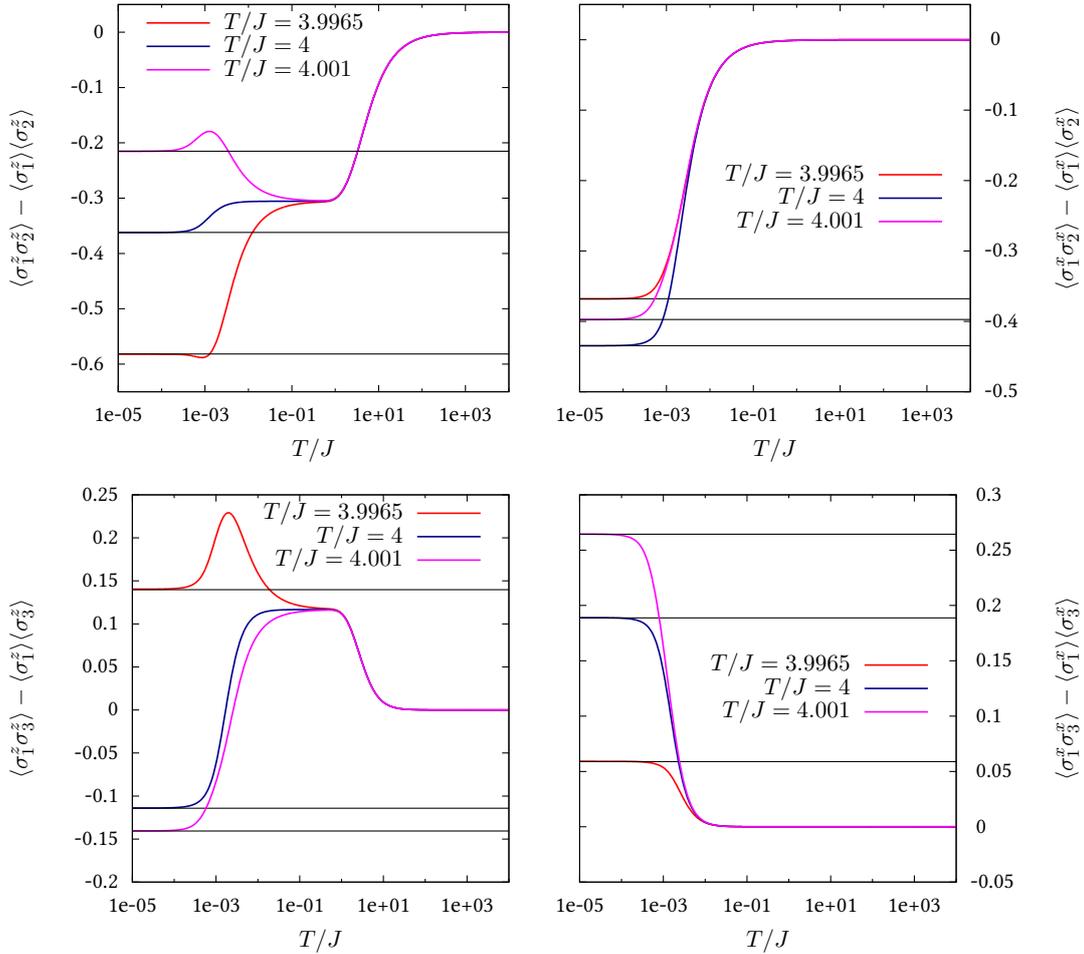


Abbildung 8.6.: Die verbundenen Korrelationsfunktionen für zwei und drei Nachbarplätze sind in Abhängigkeit von der Temperatur für verschiedene Magnetfelder und $\Delta = 1000$ dargestellt. Zusätzlich sind die asymptotischen Werte für $T = 0$, wie sie aus (8.27) folgen, als schwarze Linien zu sehen.

Dies gilt auch für die verbundene Zweipunktfunktion $\langle \sigma_1^z \sigma_2^z \rangle - \langle \sigma_1^z \rangle \langle \sigma_2^z \rangle$, jedoch nicht für die übrigen gezeigten Korrelationsfunktionen. Die beiden Übernächste-Nachbarn-Korrelationsfunktionen $\langle \sigma_1^z \sigma_3^z \rangle - \langle \sigma_1^z \rangle \langle \sigma_3^z \rangle$ und $\langle \sigma_1^x \sigma_3^x \rangle$ haben ihr Extremum oberhalb des kritischen Feldes der Ising-Kette, während das Minimum von $\langle \sigma_1^x \sigma_2^x \rangle$ genau beim kritischen Feld der Ising-Kette liegt.

8.5. Tieftemperaturverhalten in der Umgebung des Tripelpunktes

Nachdem im vorigen Abschnitt mit Hilfe des Skalierungsverhaltens $h = h_c(1 + \alpha/\Delta)$ des Magnetfeldes das Verhalten im $T = 0$ -Grenzfall und damit die Konstanz der Korrelationsfunktionen auf Linien mit festem α erklärt worden ist, besteht der nächste Schritt darin, das Verhalten bei tiefen Temperaturen zu untersuchen. Dazu wird die bereits im Abschnitt 8.3 erwähnte reskalierte Temperatur $\tau = \Delta T$ eingeführt. Danach werden die Integralgleichungen bis zur ersten nichtverschwin-

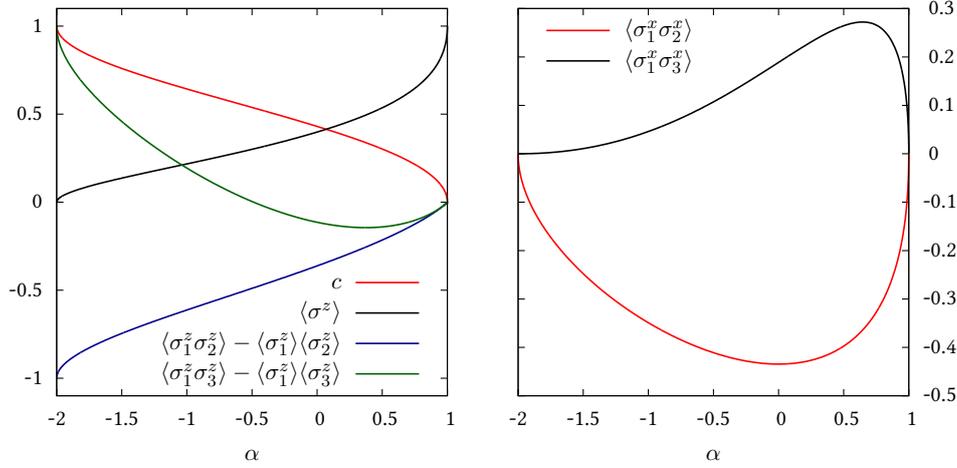


Abbildung 8.7.: Die asymptotischen Werte der Korrelationsfunktionen aus Gleichung (8.27) als Funktion des reskalierten magnetischen Feldes α . Zusätzlich ist der normalisierte Fermipunkt c als Funktion von α zu sehen.

denden Ordnung in $1/\Delta$ mit festem α und τ entwickelt. Hierbei wird wiederum die \mathfrak{a} -Formulierung verwendet. Dies führt auf

$$\varepsilon(x) = h_c \alpha - h_c \cos(2x) + \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \frac{dy}{\pi} \tau \ln \left(1 + e^{-\varepsilon(y)/\tau} \right) \quad (8.28)$$

wobei $\varepsilon(x)$ die Verallgemeinerung von (8.18) für endliche Temperaturen im Skalenlimes ist. In diesem Limes trägt nur ein Intervall $[-\pi/2, \pi/2]$ der ursprünglichen Integrationskontur (siehe Abbildung B.1 in Anhang B) bei. Der Beitrag des anderen Intervalls ist für hinreichend kleine τ exponentiell unterdrückt für $\Delta \rightarrow \infty$.

Die Lösung dieser Gleichung (8.28)

$$\varepsilon(x) = \mu - h_c \cos(2x), \quad (8.29)$$

entspricht der Dispersionsrelation freier Fermionen auf dem Gitter. Allerdings hängt das chemische Potential μ auf nichttriviale Weise vom Magnetfeld und der Temperatur ab. Es ist implizit über die Gleichung

$$\mu = h_c \alpha + \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \frac{dy}{\pi} \tau \ln \left(1 + e^{-(\mu - h_c \cos(2y))/\tau} \right) \quad (8.30)$$

bestimmt.

Die freie Energie im Skalenlimes ist gegeben durch

$$f = -\frac{h_c}{2} \left(1 + \frac{\alpha}{\Delta} \right) + \frac{1}{\Delta} \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \frac{dy}{\pi} \tau \ln \left(1 + e^{-(\mu - h_c \cos(2y))/\tau} \right). \quad (8.31)$$

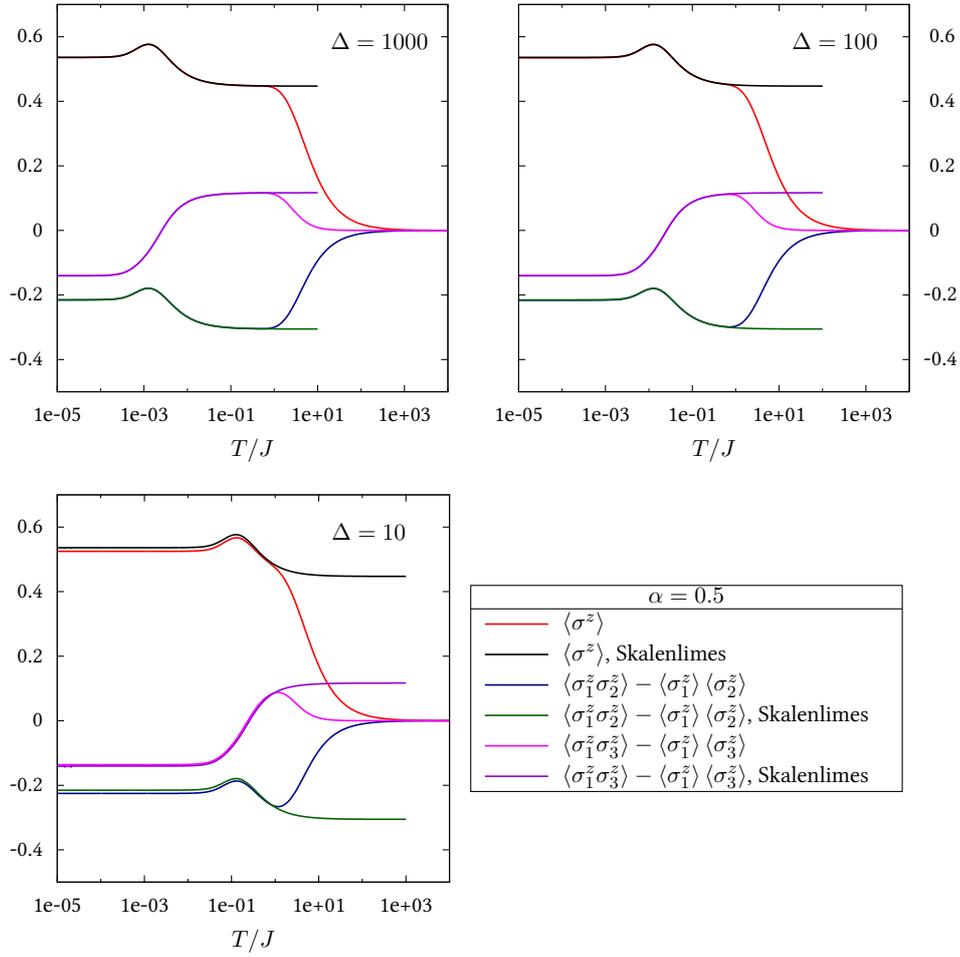


Abbildung 8.8.: Die longitudinalen Korrelationsfunktionen für kurze Abstände auf dem Gitter als Funktion der Temperatur für verschiedene Anisotropien und $\alpha = 0.5$

Auch sie entspricht genau dem Verhalten freier Fermionen. Damit folgt für die Magnetisierung

$$m = \frac{1 - I_0}{2(1 + I_0)}, \quad (8.32)$$

wobei die Definition

$$I_n = \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \frac{dy}{\pi} \frac{\cos(2ny)}{1 + e^{(\mu - h_c \cos(2y))/\tau}} \quad (8.33)$$

verwendet wurde.

Die Berechnung der Zweipunktfunktionen liefert

$$\langle \sigma_1^z \sigma_2^z \rangle_{\tau, h} = \frac{1 - 3I_0}{1 + I_0}, \quad (8.34a)$$

$$\langle \sigma_1^x \sigma_2^x \rangle_{\tau, h} = -\frac{2I_1}{1 + I_0}, \quad (8.34b)$$

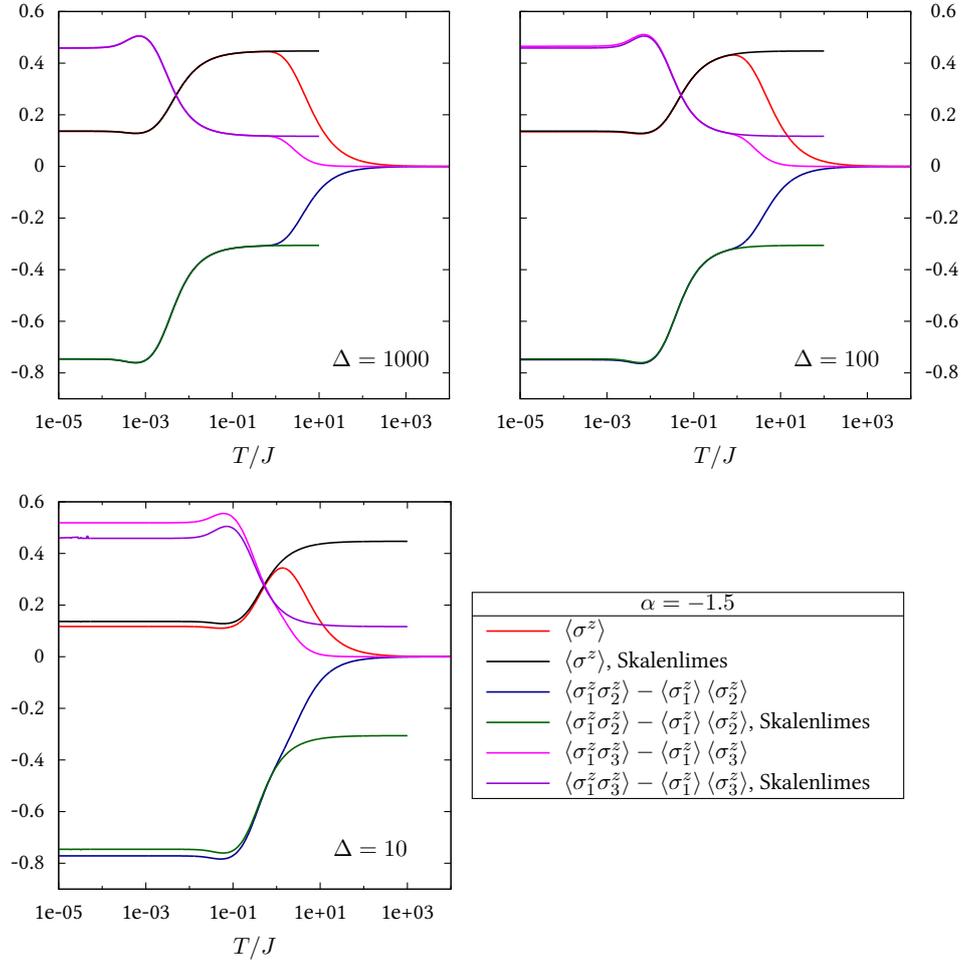


Abbildung 8.9.: Die longitudinalen Korrelationsfunktionen für kurze Abstände auf dem Gitter als Funktion der Temperatur für verschiedene Anisotropien und $\alpha = -1.5$

$$\langle \sigma_1^z \sigma_3^z \rangle_{\tau, h} = \frac{1 - 3I_0 + 4I_0^2}{1 + I_0} - \frac{4I_1^2}{1 + I_0}, \quad (8.34c)$$

$$\langle \sigma_1^x \sigma_3^x \rangle_{\tau, h} = \frac{2I_1^2}{1 + I_0} - \frac{4I_0 I_2}{1 + I_0} + 2I_2. \quad (8.34d)$$

Die zugehörige Rechnung findet sich im Anhang C.3. Hierbei gilt es zu beachten, dass die Struktur der Zweipunktfunktionen (8.34) im Gegensatz zur freien Energie und der Dispersionsrelation nicht die Struktur freier Fermionen auf dem Gitter hat. Allerdings gehen die physikalischen Parameter τ und μ nur mittels der Dichte-Dichte-Zweipunktfunktionen I_n freier Fermionen ein, jedoch auf nichttriviale Weise.

In den Abbildungen 8.8 und 8.9 sind die longitudinalen Zweipunktfunktionen für kurze Abstände auf dem Gitter bei festem α für unterschiedliche Anisotropien gezeigt. Hierbei werden die Kurven, die mittels der exakten Lösung aus Kapitel 6.2 gewonnen wurden, mit denen aus dem Skalenlimes (8.34) verglichen. Diese zeigen eine sehr gute Übereinstimmung. Zum einen stimmen die im Skalenlimes berechneten Kurven mit den exakten Kurven bis zu relativ hohen Temperaturen, nämlich

$T \approx J$ überein, zum anderen ist auch für relativ kleine Werte der Anisotropie, nämlich $\Delta = 10$, der Skalenlimes zumindest eine qualitative Näherung der exakten Kurve der XXZ-Kette.

Die Übereinstimmung der Kurven bis zu relativ hohen Temperaturen unabhängig von der Anisotropie ist in Einklang mit der Tatsache, dass die Störungsrechnung gültig sein sollte, solange die Temperatur klein gegenüber der Anregungslücke $4J$ der Ising-Kette ist. Alternativ lässt sich dies auch mittels der Entwicklung der Integralgleichungen verstehen. Wie oben für die *dressed energy* und im Anhang C.3 für die Funktionen g^\pm und $(g')^\pm$ erwähnt, sind die Beiträge des zweiten Intervalls, siehe Abbildung B.1 im Anhang B, für kleine τ exponentiell mit Δ unterdrückt. Skaliert man dies wieder auf die reguläre Temperatur T um, so bedeutet dies ein Verhalten wie $\exp(-J/T)$, welches insbesondere unabhängig von Δ ist.

Dass die Korrelationsfunktionen im Skalenlimes für $T \rightarrow \infty$ nicht verschwinden, erscheint auf den ersten Blick merkwürdig. Es lässt sich aber leicht erklären, wenn man bedenkt, dass dies die exakten Korrelationsfunktionen des Hamiltonoperators \mathcal{H}_1 sind. Der zugehörige Hilbertraum ist im Vergleich zu dem der XXZ-Kette eingeschränkt, da alle Zustände, die zwei benachbarte nach unten zeigende Spins enthalten, ausgeschlossen sind. Für den Grenzfall hoher Temperaturen, in dem über alle möglichen Zustände des Hilbertraumes gemittelt wird, bedeutet dies, dass es ein Übergewicht von nach oben gerichteten Spins und damit eine nichtverschwindende Magnetisierung gibt. Auch das Verhalten der übrigen Korrelationsfunktionen für sehr hohe Temperaturen lässt sich mit Hilfe des reduzierten Hilbertraumes erklären. Dass die longitudinale Nachbar-Korrelationsfunktion negativ ist, ist dadurch begründet, dass es wahrscheinlicher ist, zwei antiparallele Spins auf benachbarten Gitterplätzen zu haben, da zwei benachbarte parallel nach unten zeigende Spins verboten sind. Das Verhalten bei hohen Temperaturen ist, wie in den Abbildungen zu erkennen, unabhängig von der betrachteten Anisotropie, da diese nur durch das unterschiedliche Umskalieren der Temperatur T zur Temperatur τ im Skalenlimes eingeht.

Wie bereits erwähnt, stimmt die Approximation durch den Skalenlimes für eine große Spannweite an Werten der Anisotropie gut mit den exakten Resultaten überein. Für $\Delta = 1000$ und $\Delta = 100$ sind die Kurven bei hinreichend tiefen Temperaturen kaum voneinander zu unterscheiden. Für $\Delta = 10$ ist zumindest eine qualitative Übereinstimmung vorhanden. Vergleicht man nun die Kurven für $\alpha = 0.5$ in Abbildung 8.8 und $\alpha = -1.5$ in Abbildung 8.9, so ist deutlich, dass im letzteren Fall die Abweichungen bei $\Delta = 10$ deutlich größer sind. Dies ist in Übereinstimmung mit der Tatsache, dass die zum Sättigungsfeld h_s gehörende Phasenübergangslinie wirklich eine Gerade ist, während dies für die zur Anregungslücke gehörende Linie nur asymptotisch gilt. Unterstützt wird dies zusätzlich durch die Abbildung 8.4, in der bei $\Delta \sim 10$ für kleinere α eine deutliche Abweichung vom konstanten Verhalten der Magnetisierung zu Linien mit konstantem α zu sehen ist.

Zusammenfassend lässt sich sagen, dass in dem Bereich für $T \approx J/\Delta$, in dem die Korrelationsfunktionen von der Anisotropie und dem Magnetfeld abhängig sind, die Abhängigkeit von der Anisotropie entfernt werden kann, indem die reskalierte Temperatur τ eingeführt wird. Des Weiteren ist die Approximation durch den Skalenlimes gültig bis zu Temperaturen $T \approx J$ und zusätzlich lässt sich die XXZ-Kette für Temperaturen, die größer als $T \approx 10J/\Delta$ sind, gut durch die Ising-Kette beschreiben. Damit ist es möglich die XXZ-Kette für Parameter, die zum kritischen Bereich im Phasendiagramm oberhalb des Tripelpunktes gehören, durch einfache Näherungen, entweder durch die Ising-Kette oder \mathcal{H}_1 , zu beschreiben. Außerhalb der kritischen Phase ist die Näherung durch die Ising-Kette für alle Temperaturen möglich.

9. Zusammenfassung

Die in dieser Arbeit behandelten Modelle, das Sine-Gordon-Modell und die XXZ-Kette, können beide ausgehend von einem allgemeinen 6-Vertex-Modell behandelt werden. Die thermodynamischen Eigenschaften lassen sich unter Ausnutzung der Trotter-Suzuki-Abbildung auf ein gestagertes Gitter abbilden, welches am einfachsten durch die Quantentransfermatrix beschrieben werden kann. Diese kann mittels des algebraischen Betheansatzes diagonalisiert werden. Der entscheidende Vorteil der Beschreibung durch die Quantentransfermatrix besteht darin, dass im thermodynamischen Limes der größte Eigenwert der Quantentransfermatrix alleine die freie Energie bestimmt, während der zugehörige Eigenvektor alle Informationen zu den statischen Korrelationsfunktionen enthält. Um jedoch den Trotterlimes explizit durchführen zu können, ist es erforderlich, eine Beschreibung der Quantentransfermatrix durch nichtlineare Integralgleichungen einzuführen. Diese erlauben eine effiziente numerische Behandlung mit Hilfe des *fast Fourier transformation* Algorithmus.

Im ersten Teil dieser Arbeit wurde das Sine-Gordon-Modell als Kontinuumsliches eines gestagerten 6-Vertex-Modells betrachtet. Dieser neue Zugang stellt eine Kombination der bekannten Zugänge aus dem 8-Vertex-Modell bzw. der XYZ-Kette [8,70] und dem 6-Vertex-Modell [22,98] dar. Er erlaubt wie ersterer die Einführung einer Quantentransfermatrix und somit die Berechnung thermodynamischer Eigenschaften und beruht wie letzterer nur auf dem 6-Vertex-Modell. Letzteres erlaubt es, den für die XXZ-Kette bekannten Formalismus für Korrelationsfunktionen auf das Sine-Gordon-Modell zu übertragen. In diesem neu gefundenen Kontinuumsliches kann sowohl für den Grundzustand als auch für die Thermodynamik eine Beschreibung durch nichtlineare Integralgleichungen eingeführt werden. Die zugehörigen Gleichungen auf dem Gitter unterscheiden sich. Diese Unterschiede werden jedoch durch den Kontinuumsliches nivelliert, sodass sie nach Durchführung des Kontinuumsliches übereinstimmen. Damit ist es möglich, die Äquivalenz der freien Energie mit der Grundzustandsenergie für das Sine-Gordon-Modell bei endlicher Länge vom Standpunkt der nichtlinearen Integralgleichungen aus zu verstehen. Die nichtlinearen Integralgleichungen für die Grundzustandsenergie reproduzieren das Resultat für den bekannten Zugang über das 6-Vertex-Modell [23]. Eine numerische Behandlung der nichtlinearen Integralgleichungen ist möglich und stimmt mit den Ergebnissen für die spezifische Wärme, die ausgehend vom thermodynamischen Betheansatz erzielt wurden [34], überein.

Mit dem neuen Zugang konnte die Darstellung der erzeugenden Funktion der zz -Korrelationen für die XXZ-Kette durch Vielfachintegrale auf das zum Sine-Gordon-Modell gehörende Gitter übertragen werden. Jedoch ließ sich der Kontinuumsliches nur am Punkt freier Fermionen explizit durchführen. Dort wurde eine Darstellung als Fredholm-Determinante gefunden, die eine Verallgemeinerung auf endliche Temperaturen des bekannten Resultats für $T=0$ [42] darstellt.

Im zweiten Teil dieser Arbeit wurden Korrelationsfunktionen der massiven XXZ-Kette für kurze Abstände auf dem Gitter untersucht. Genauer wurde eine für die numerische Behandlung effiziente Beschreibung des physikalischen Anteils der Korrelationsfunktionen durch nichtlineare Integralgleichungen hergeleitet. Die Beschreibung der Korrelationsfunktionen beruht dabei auf dem Zugang über die sogenannte exponentielle Form [13]. Unter Benutzung der bekannten Resultate für den algebraischen Anteil bei kurzen Abständen auf dem Gitter [10] wurden verschiedene Korrelations-

funktionen der massiven XXZ-Kette bei endlicher Temperatur und endlichem Magnetfeld numerisch berechnet. Diese zeigen interessantes nichtmonotones Verhalten in Abhängigkeit von der Temperatur und dem Magnetfeld.

Im Grenzfall der Ising-Kette lassen sich die gefundenen Integralgleichungen explizit lösen und die bekannten Resultate für diesen Fall reproduzieren. Darüber hinaus ist es möglich, Korrekturen für endliche Anisotropie zur Ising-Kette zu betrachten. Der kritische Punkt der Ising-Kette lässt sich als Tripelpunkt im $h - 1/\Delta$ -Phasendiagramm des Grundzustands der XXZ-Kette auffassen. Ausgehend vom Tripelpunkt kann der Hamiltonoperator der XXZ-Kette durch entartete Störungsrechnung behandelt werden. Außerhalb des kritischen Bereichs des Phasendiagramms lässt sich die XXZ-Kette mit großer Anisotropie in guter Näherung durch die Ising-Kette beschreiben. Für Magnetfelder, die zur kritischen Phase gehören, kann ein reskaliertes Magnetfeld und eine reskalierte Temperatur eingeführt werden. Diese erlauben es für hinreichend tiefe Temperaturen die XXZ-Kette in der Umgebung des kritischen Punktes durch den Hamiltonoperator \mathcal{H}_1 , der sich in erster Ordnung Störungsrechnung ergibt, zu beschreiben. Dazu wurden die Integralgleichungen in $1/\Delta$ entwickelt. Für die thermodynamischen Eigenschaften findet sich die Struktur freier Fermionen, wobei das chemische Potential auf nichttriviale Art vom Magnetfeld und der Temperatur abhängig ist. Dies entspricht dem Resultat für \mathcal{H}_1 , wie es sich direkt aus dem thermodynamischen Betheansatz ergibt [1]. Für die Korrelationsfunktionen findet man, dass die physikalischen Parameter Temperatur und Magnetfeld nur über die Dichte-Dichte-Zweipunktfunktionen freier Fermionen eingehen, dies jedoch auf nichttriviale Art.

Ein Vorteil des modernen Zugangs zu Korrelationsfunktionen unter Verwendung der Funktionen ω und φ , wie er hier bei der XXZ-Kette benutzt wurde, besteht darin, dass es leicht möglich ist, die zur Herleitung verwendeten nichtlinearen Integralgleichungen vom α -Typ auf die für die numerische Berechnung effizienten Integralgleichungen vom $\bar{b}\bar{b}$ -Typ umzuschreiben. Für eine zukünftige Behandlung des Sine-Gordon-Modells in diesem Zugang ist dies von entscheidender Bedeutung, da, wie in dieser Arbeit gesehen, die Integralgleichungen vom α -Typ keine einfache Durchführung des Kontinuumslimes erlauben. Derzeit ist eine Anwendung des neuen Zugangs zu Korrelationsfunktionen auf größere Abstände auf dem Gitter noch dadurch verwehrt, dass ein effizienter Algorithmus zur Behandlung des algebraischen Anteils fehlt. Für die Übertragung dieses Zugangs auf das Sine-Gordon-Modell müsste zudem noch eine Möglichkeit ähnlich zu [53] gegeben sein, die Asymptotik der Korrelationsfunktionen für große Abstände in diesem Zugang zu bestimmen. Erste Schritte hierzu sind mit der Betrachtung des Limes zur konformen Feldtheorie [15] bereits erfolgt.

Weitere interessante Fragestellungen, die sich an diese Arbeit anschließen, sind der Grenzfall $\Delta \rightarrow 1$ zur isotropen Heisenbergkette und die Frage, wie sich die in [12] auftretenden Momente aus den hier im zweiten Teil gezeigten Formeln ergeben. Ebenso stellt sich die Frage, ob es auch für den Fall der Korrelationsfunktionen mit nichtverschwindender Unordnung α möglich ist, eine Umschreibung der Integralgleichungen von der α -Formulierung auf die $\bar{b}\bar{b}$ -Formulierung vorzunehmen.

Anhang

A. Technische Details zu den Integralgleichungen des Sine-Gordon-Modells

A.1. Nichtlineare Integralgleichungen für die Thermodynamik aus dem 6-Vertex-Modell

In diesem Anhang soll die Herleitung der nichtlinearen Integralgleichungen für die Thermodynamik des Sine-Gordon-Modells aus Kapitel 4.1 beschrieben werden. Diese ist analog zu der Herleitung der nichtlinearen Integralgleichungen für die gewöhnliche Transfermatrix des 6-Vertex-Modells, wie sie in [60] zu finden ist.

Zunächst werden die Resultate aus dem algebraischen Betheansatz für die Quantentransfermatrix (2.39) benötigt. Mit Hilfe des in Kapitel 2.2.1 dargestellten Formalismus ergeben sich mit dem Pseudovakuum $|0\rangle = |\uparrow\downarrow\rangle^{\otimes N/2}$ die folgenden Eigenwerte für die Operatoren $A(\lambda)$ und $D(\lambda)$

$$a(\lambda) = \left[\frac{\text{sh}(\lambda - \theta - i\tau) \text{sh}(\lambda + \theta - i\tau)}{\text{sh}(\lambda - \theta - i\tau - i\gamma) \text{sh}(\lambda + \theta - i\tau - i\gamma)} \right]^{N/4}, \quad (\text{A.1a})$$

$$d(\lambda) = \left[\frac{\text{sh}(\lambda - \theta + i\tau) \text{sh}(\lambda + \theta + i\tau)}{\text{sh}(\lambda - \theta + i\tau + i\gamma) \text{sh}(\lambda + \theta + i\tau + i\gamma)} \right]^{N/4}. \quad (\text{A.1b})$$

Des Weiteren ist für den größten Eigenwert der Quantentransfermatrix in (3.12) bzw. (2.26) $M = N/2$ zu wählen. Dieser wird im Folgenden der Einfachheit halber mit Λ bezeichnet. Außerdem wird im weiteren Verlauf, in dem nur noch Funktionen betrachtet werden, der Eigenwert auch einfach als Quantentransfermatrix bezeichnet. Nun wird die Hilfsfunktion

$$\mathbf{a}(x) = \frac{\varphi(x + i\tau)\varphi(x - i\tau - i\gamma) Q(x + i\gamma)}{\varphi(x - i\tau)\varphi(x + i\tau + i\gamma) Q(x - i\gamma)} \quad (\text{A.2})$$

mit den Funktionen

$$\varphi(x) = [\text{sh}(x - \theta) \text{sh}(x + \theta)]^{N/4}, \quad (\text{A.3a})$$

$$Q(x) = \prod_{j=1}^{N/2} \text{sh}(x - \lambda_j), \quad (\text{A.3b})$$

definiert, wobei λ_j die Lösungen der Betheansatzgleichungen sind. Ausgehend von dieser Hilfsfunktion lassen sich die nichtlinearen Integralgleichungen herleiten. Dabei werden die folgenden Tatsachen verwendet:

- $N/4$ ist gerade

- Die Funktionen sind analytisch, haben weder Pol- noch Nullstellen und ein konstantes asymptotisches Verhalten in den folgenden Streifen der komplexen Ebene

$$\Lambda(x) : \quad -\xi/2 < \Im(x) < \xi/2, \quad (\text{A.4a})$$

$$Q(x) : \quad -\pi < \Im(x) < 0, \quad (\text{A.4b})$$

$$\varphi(x) : \quad 0 < \Im(x) < \pi, \quad (\text{A.4c})$$

wobei $\xi = \min(\gamma, \pi - \gamma)$.

- Die obigen Streifen sind nicht eindeutig, da alle Funktionen $i\pi$ -periodisch sind.

Die Abhängigkeit des Streifens, in dem der größte Eigenwert der Quantentransfermatrix Λ die erforderlichen Eigenschaften hat, bedingt die Unterscheidung in der Herleitung zwischen $\gamma \geq \pi/2$. Dazu werden die Hilfsfunktionen

$$\mathfrak{b}(x) = \mathfrak{a}(x + i\gamma/2) \quad \wedge \quad \bar{\mathfrak{b}}(x) = 1/\mathfrak{a}(x - i\gamma/2) \quad (\text{A.5})$$

für $0 < \gamma < \pi/2$, bzw.

$$\mathfrak{b}(x) = \mathfrak{a}(x + i(\pi - \gamma)/2) \quad \wedge \quad \bar{\mathfrak{b}}(x) = 1/\mathfrak{a}(x - i(\pi - \gamma)/2) \quad (\text{A.6})$$

für $\pi/2 < \gamma < \pi$ definiert. In der weiteren Rechnung wird zunächst der zweite Fall behandelt, da dieser üblicherweise nicht in der Literatur zu finden ist. Danach werden die Unterschiede für den Fall $0 < \gamma < \pi/2$ aufgezeigt.

Da im weiteren Verlauf häufig nicht γ sondern $\pi - \gamma$ der geeignete Parameter ist wird hierfür obiges ξ verwendet. Zunächst wird $\mathfrak{b}(x)$ unter Ausnutzung der Periodizität der Funktionen φ und Q so geschrieben, dass diese für reelles x stets in dem oben genannten Streifen der komplexen Ebene liegen

$$\mathfrak{b}(x) = \frac{\varphi(x + i\tau + i\pi/2 - i\gamma/2)\varphi(x - i\tau - i3\gamma/2 + i3\pi/2)}{\varphi(x - i\tau + i\pi/2 - i\gamma/2)\varphi(x + i\tau + i\gamma/2 + i\pi/2)} \frac{Q(x + i\gamma/2 + i\pi/2)}{Q(x - i3\gamma/2 + i\pi/2)}. \quad (\text{A.7})$$

Die genaue Verschiebung der Argumente der einzelnen Funktionen hängt davon ab, ob γ größer oder kleiner als $\pi/2$ ist. Dies ist der Grund dafür, dass diese Bereiche in der Rechnung unterschieden werden müssen. Danach wird dieselbe Prozedur für $\bar{\mathfrak{b}}$ wiederholt

$$\bar{\mathfrak{b}}(x) = \frac{\varphi(x - i\tau + i\pi/2 + i\gamma/2)\varphi(x + i\tau + i3\gamma/2 - i\pi/2)}{\varphi(x + i\tau + i\pi/2 + i\gamma/2)\varphi(x - i\tau - i\gamma/2 + i\pi/2)} \frac{Q(x - i\gamma/2 - i\pi/2)}{Q(x + i3\gamma/2 - i3\pi/2)}. \quad (\text{A.8})$$

Zusätzlich zu diesen Beziehungen zwischen \mathfrak{b} bzw. $\bar{\mathfrak{b}}$ und φ und Q lassen sich die Funktionen \mathfrak{b} und $\bar{\mathfrak{b}}$, genauer gesagt die verschobenen Funktionen $\mathfrak{B} = 1 + \mathfrak{b}$ und $\bar{\mathfrak{B}} = 1 + \bar{\mathfrak{b}}$, auch mit Hilfe der Quantentransfermatrix ausdrücken

$$\mathfrak{B}(x) = \frac{\varphi(x - i\tau + i3\pi/2 - i3\gamma/2)}{\varphi(x - i\tau + i\pi/2 - i\gamma/2)} \frac{Q(x - i\gamma/2 - i\pi/2)}{Q(x - i3\gamma/2 + i\pi/2)} \Lambda(x + i\pi/2 - i\gamma/2), \quad (\text{A.9a})$$

$$\bar{\mathfrak{B}}(x) = \frac{\varphi(x + i\tau - i\pi/2 + i3\gamma/2)}{\varphi(x + i\tau + i\pi/2 + i\gamma/2)} \frac{Q(x + i\gamma/2 - i\pi/2)}{Q(x + i3\gamma/2 - i3\pi/2)} \Lambda(x - i\pi/2 + i\gamma/2). \quad (\text{A.9b})$$

Von diesen Gleichungen wird nun die zweite logarithmische Ableitung gebildet und die resultierenden Gleichungen werden in den Fourierraum transformiert. Dazu wird die Notation

$$\hat{f}_k := \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial^2 [\ln f(x)]}{\partial x^2} e^{-ikx} dx \quad (\text{A.10})$$

verwendet. Für die eigentliche Rechnung werden unter anderem die folgenden Fouriertransformationen benötigt

$$[\sinh(x)]_k = \frac{k}{1 - e^{-k\pi}} \quad (\text{A.11})$$

und damit

$$\hat{\varphi}_k = \frac{N}{2} \frac{k}{1 - e^{-k\pi}} \cos(k\theta). \quad (\text{A.12})$$

Wird diese Transformation auf die Gleichungen (A.7), (A.8) und (A.9) angewandt, so ergibt sich

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{b}}_k = & \left(e^{-k(\tau+2\xi)} + e^{-k(3\xi/2-\tau)} - e^{-k(\xi/2-\tau)} - e^{-k(\tau+\pi-\xi/2)} \right) \hat{\varphi}_k \\ & + \left(e^{k\xi/2} - e^{-k(3\xi/2-\pi)} \right) \hat{Q}_k, \end{aligned} \quad (\text{A.13a})$$

$$\begin{aligned} \hat{\bar{\mathbf{b}}}_k = & \left(e^{-k(\pi-2\xi-\tau)} + e^{-k(\tau-3\xi/2+\pi)} - e^{-k(\tau-\xi/2+\pi)} - e^{-k(\xi/2-\tau)} \right) \hat{\varphi}_k \\ & + \left(e^{k(\pi-\xi/2)} - e^{-k3\xi/2} \right) \hat{Q}_k, \end{aligned} \quad (\text{A.13b})$$

$$\hat{\mathfrak{B}}_k = \left(e^{-k(3\xi/2-\tau)} + e^{-k(\xi/2-\tau)} \right) \hat{\varphi}_k + \left(e^{-k(\xi/2-\pi)} - e^{-k(3\xi/2-\pi)} \right) \hat{Q}_k + e^{-k\xi/2} \hat{\Lambda}_k, \quad (\text{A.13c})$$

$$\hat{\bar{\mathfrak{B}}}_k = \left(e^{-k(\pi-3\xi/2+\tau)} + e^{-k(\pi-\xi/2+\tau)} \right) \hat{\varphi}_k + \left(e^{k\xi/2} - e^{k3\xi/2} \right) \hat{Q}_k + e^{k\xi/2} \hat{\Lambda}_k. \quad (\text{A.13d})$$

Werden die Gleichungen (A.13c) und (A.13d) nach $\hat{\Lambda}_k$ aufgelöst, so lässt sich der Eigenwert der Quantentransformmatrix aus den Gleichungen eliminieren und es ergibt sich eine Gleichung, die es erlaubt, die Funktion \hat{Q}_k durch die bekannte Funktion $\hat{\varphi}_k$ und die Hilfsfunktionen $\hat{\mathfrak{B}}_k$ und $\hat{\bar{\mathfrak{B}}}_k$ auszudrücken

$$\hat{Q}_k = \frac{e^{-k\pi/2}}{4 \operatorname{sh}(\xi k/2) \operatorname{ch}(\gamma k/2)} \left[e^{k\xi/2} \hat{\mathfrak{B}}_k - e^{-k\xi/2} \hat{\bar{\mathfrak{B}}}_k \right] + e^{-k\pi} \frac{\operatorname{ch}((\tau + \gamma/2)k)}{\operatorname{ch}(\gamma k/2)} \hat{\varphi}_k. \quad (\text{A.14})$$

Damit kann die Funktion \hat{Q}_k aus den Gleichungen (A.13a) und (A.13b) für $\hat{\mathbf{b}}_k$ bzw. $\hat{\bar{\mathbf{b}}}_k$ eliminiert werden. Somit folgt

$$\hat{\mathbf{b}}_k = \frac{e^{k(\gamma-\pi/2)}(e^{-k\pi} - 1) \operatorname{sh}(k\tau)}{\operatorname{ch}(\gamma k/2)} \hat{\varphi}_k + \frac{\operatorname{sh}((\pi/2 - \gamma)k)}{2 \operatorname{sh}((\pi - \gamma)k/2) \operatorname{ch}(\gamma k/2)} \left[\hat{\mathfrak{B}}_k - e^{-k(\pi-\gamma-\varepsilon)} \hat{\bar{\mathfrak{B}}}_k \right] \quad (\text{A.15})$$

und

$$\hat{\bar{\mathbf{b}}}_k = \frac{e^{-k(\gamma-\pi/2)}(e^{-k\pi} - 1) \operatorname{sh}(k\tau)}{\operatorname{ch}(\gamma k/2)} \hat{\varphi}_k + \frac{\operatorname{sh}((\pi/2 - \gamma)k)}{2 \operatorname{sh}((\pi - \gamma)k/2) \operatorname{ch}(\gamma k/2)} \left[\hat{\bar{\mathfrak{B}}}_k - e^{k(\pi-\gamma-\varepsilon)} \hat{\mathfrak{B}}_k \right]. \quad (\text{A.16})$$

Dabei wurde ein infinitesimal kleines $\varepsilon > 0$ eingeführt, das dafür sorgt, dass der Vorfaktor vor $\hat{\bar{\mathfrak{B}}}_k$ bzw. $\hat{\mathfrak{B}}_k$ in den Realraum zurücktransformiert werden kann. Für die tatsächliche numerische

Berechnung (im Fourierraum) ist dies irrelevant. Nun wird der Trotterlimes, d.h. hier $\tau \rightarrow 0$, und damit die Ersetzung $\text{sh}(k\tau) \rightarrow k\tau$ durchgeführt. Danach werden die Gleichung in den Realraum zurücktransformiert und zweimal integriert, dies führt auf

$$\ln \mathfrak{b}(x) = \frac{J\pi \sin(\gamma)}{T2\gamma} \left[\frac{1}{\text{ch}\left(\frac{\pi}{\gamma}(x + i\pi/2 + \theta)\right)} + \frac{1}{\text{ch}\left(\frac{\pi}{\gamma}(x + i\pi/2 - \theta)\right)} \right] + \frac{1}{2\pi} K * \ln(1 + \mathfrak{b}(x)) - \frac{1}{2\pi} \hat{K}^+ * \ln(1 + \bar{\mathfrak{b}}(x)) \quad (\text{A.17})$$

und

$$\ln \bar{\mathfrak{b}}(x) = \frac{J\pi \sin(\gamma)}{T2\gamma} \left[\frac{1}{\text{ch}\left(\frac{\pi}{\gamma}(x - i\pi/2 + \theta)\right)} + \frac{1}{\text{ch}\left(\frac{\pi}{\gamma}(x - i\pi/2 - \theta)\right)} \right] + \frac{1}{2\pi} K * \ln(1 + \bar{\mathfrak{b}}(x)) - \frac{1}{2\pi} \hat{K}^- * \ln(1 + \mathfrak{b}(x)). \quad (\text{A.18})$$

Hier ist noch zu überprüfen, dass die bei der Integration auftretenden Integrationskonstanten tatsächlich verschwinden, was im Limes $x \rightarrow \infty$ leicht möglich ist. Im Kontinuumsliches ergibt sich direkt (4.11).

Zuletzt muss nun eine Gleichung bestimmt werden, die es erlaubt, den Eigenwert der Quantentransfermatrix durch die Hilfsfunktionen auszudrücken. Dazu wird in den Gleichungen (A.13c) und (A.13d) diesmal die Funktion \hat{Q}_k eliminiert. Dies führt auf

$$\hat{\Lambda}_k = -\frac{\text{sh}(k\tau)}{\text{ch}(\gamma k/2)} \left(e^{-k(\pi-\gamma/2)} - e^{-k\gamma/2} \right) \hat{\varphi}_k + \frac{1}{2 \text{ch}(\gamma k/2)} \left(e^{-k(\gamma-\pi/2)} \hat{\mathfrak{B}}_k + e^{k(\gamma-\pi/2)} \hat{\bar{\mathfrak{B}}}_k \right). \quad (\text{A.19})$$

Hier wird nun ebenfalls zunächst der Trotterlimes $N \rightarrow \infty$, d.h. $\tau \rightarrow 0$, durchgeführt und die Gleichung in den Realraum zurücktransformiert. Nach zweimaliger Integration und Bestimmung der Integrationskonstanten ergibt sich

$$\ln \Lambda(x) = -\frac{N\tau}{2} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\text{sh}\left(\frac{\pi-\gamma}{2}\right)k}{2 \text{sh}\left(\frac{\pi}{2}\right)k \text{ch}\left(\frac{\gamma}{2}\right)k} \cos(\theta k) e^{ikx} dk + \int_{-\infty}^{\infty} \left[\frac{\ln \mathfrak{B}(y)}{\text{ch}\left(\frac{\pi}{\gamma}(x + i(\gamma - \pi/2) - y)\right)} + \frac{\ln \bar{\mathfrak{B}}(y)}{\text{ch}\left(\frac{\pi}{\gamma}(x + i(\gamma - \pi/2) - y)\right)} \right] \frac{dy}{2\pi}. \quad (\text{A.20})$$

Mit Hilfe von Gleichung (2.41), welche die freie Energie durch den größten Eigenwert der Quantentransfermatrix ausdrückt, folgt im Kontinuumsliches die Gleichung (4.13), die die freie Energie des Sine-Gordon-Modells mit Hilfe der Hilfsfunktionen \mathfrak{b} und $\bar{\mathfrak{b}}$ bestimmt.

Nun wird der Fall $0 < \gamma < \pi/2$ besprochen, wobei hier hauptsächlich die notwendigen Modifikationen aufgezeigt werden. Zunächst sind, verglichen mit den Gleichungen (A.7), (A.8) und (A.9), andere Verschiebungen für die Funktionen φ und Q nötig, damit diese im oben genannten Streifen

der komplexen Ebene liegen

$$\mathfrak{b}(x) = \frac{\varphi(x + i\tau + i\gamma/2)\varphi(x - i\tau - i\gamma/2 + i\pi)}{\varphi(x - i\tau + i\gamma/2)\varphi(x + i\tau + i3\gamma/2)} \frac{Q(x + i3\gamma/2 - i\pi)}{Q(x - i\gamma/2)}, \quad (\text{A.21a})$$

$$\bar{\mathfrak{b}}(x) = \frac{\varphi(x - i\tau + i\pi - i\gamma/2)\varphi(x + i\tau + i\gamma/2)}{\varphi(x + i\tau + i\pi - i\gamma/2)\varphi(x - i\tau - i3\gamma/2 + i\pi)} \frac{Q(x - i3\gamma/2)}{Q(x + i\gamma/2 - i\pi)}, \quad (\text{A.21b})$$

$$\mathfrak{B}(x) = \frac{\varphi(x - i\tau + i\pi - i\gamma/2)}{\varphi(x - i\tau + i\gamma/2)} \frac{Q(x + i\gamma/2 - i\pi)}{Q(x - i\gamma/2)} \Lambda(x + i\gamma/2), \quad (\text{A.21c})$$

$$\bar{\mathfrak{B}}(x) = \frac{\varphi(x + i\tau + i\gamma/2)}{\varphi(x + i\tau + i\pi - i\gamma/2)} \frac{Q(x - i\gamma/2)}{Q(x + i\gamma/2 - i\pi)} \Lambda(x - i\gamma/2). \quad (\text{A.21d})$$

Nachdem von diesen Gleichungen die zweite logarithmische Ableitung gebildet und diese in den Fourierraum transformiert wurden, liefern die letzten beiden Gleichungen den Ausdruck

$$\hat{Q}_k = \frac{e^{-k\pi/2}}{4 \operatorname{sh}((\pi - \gamma)k/2) \operatorname{ch}(\gamma k/2)} \left[e^{k\gamma/2} \hat{\mathfrak{B}}_k - e^{-k\gamma/2} \hat{\bar{\mathfrak{B}}}_k \right] + e^{-k\pi} \frac{\operatorname{ch}((\tau + \gamma/2)k)}{\operatorname{ch}(\gamma k/2)} \hat{\varphi}_k, \quad (\text{A.22})$$

der \hat{Q}_k durch die Hilfsfunktionen ausdrückt. Wird dieser in die zu den Gleichungen (A.21a) und (A.21b) gehörenden transformierten Gleichungen eingesetzt, so ergibt sich

$$\hat{\mathfrak{b}}_k = \frac{(e^{-k\pi} - 1) \operatorname{sh}(k\tau)}{\operatorname{ch}(\gamma k/2)} \hat{\varphi}_k + \frac{\operatorname{sh}((\pi/2 - \gamma)k)}{2 \operatorname{sh}((\pi - \gamma)k/2) \operatorname{ch}(\gamma k/2)} \left[\hat{\mathfrak{B}}_k - e^{-k(\gamma - \varepsilon)} \hat{\bar{\mathfrak{B}}}_k \right], \quad (\text{A.23a})$$

$$\hat{\bar{\mathfrak{b}}}_k = \frac{(e^{-k\pi} - 1) \operatorname{sh}(k\tau)}{\operatorname{ch}(\gamma k/2)} \hat{\varphi}_k + \frac{\operatorname{sh}((\pi/2 - \gamma)k)}{2 \operatorname{sh}((\pi - \gamma)k/2) \operatorname{ch}(\gamma k/2)} \left[\hat{\bar{\mathfrak{B}}}_k - e^{k(\gamma - \varepsilon)} \hat{\mathfrak{B}}_k \right]. \quad (\text{A.23b})$$

Das infinitesimale ε wurde aus demselben Grund wie im Fall $\pi/2 < \gamma < \pi$ eingeführt. Die Rücktransformation in den Realraum und zweimalige Integration der Gleichungen führen auf (4.4). Wobei auch hier eine Überprüfung der Asymptotik ergibt, dass die Integrationskonstanten verschwinden.

Um den Eigenwert der Quantentransfermatrix durch die Hilfsfunktionen auszudrücken, wird wie im obigen Fall die Funktion \hat{Q}_k aus den Gleichungen für $\hat{\mathfrak{B}}_k$ (A.21c) und $\hat{\bar{\mathfrak{B}}}_k$ (A.21d) eliminiert. Dies führt auf

$$\hat{\Lambda}_k = -\frac{\operatorname{sh}(k\tau)}{\operatorname{ch}(\gamma k/2)} \left(e^{-k(\pi - \gamma/2)} - e^{-k\gamma/2} \right) \hat{\varphi}_k + \frac{1}{2 \operatorname{ch}(\gamma k/2)} \left(\hat{\mathfrak{B}}_k + \hat{\bar{\mathfrak{B}}}_k \right). \quad (\text{A.24})$$

Hier wird nun ebenfalls zunächst der Trotterlimes $N \rightarrow \infty$, d.h. $\tau \rightarrow 0$, durchgeführt und die Gleichung in den Realraum zurücktransformiert. Nach zweimaliger Integration und Bestimmung der Integrationskonstanten ergibt sich unter Verwendung von (2.41) nach dem Kontinuumsliches die freie Energie (4.9) für das Sine-Gordon-Modell mit $0 < \gamma < \pi/2$.

A.2. Nichtlineare Integralgleichungen als Grenzfall der XYZ-Kette

In diesem Anhang wird gezeigt, wie sich die nichtlinearen Integralgleichungen für das Sine-Gordon-Modell als Grenzfall der XYZ-Kette ergeben, wobei sich die im Folgenden präsentierte Rechnung auf den Fall $0 < \gamma < \pi/2$ beschränkt. Für die Erläuterung, wie das Sine-Gordon-Modell als Kontinuumsliches der XYZ-Kette zu finden ist, wird die Notation aus [34] verwendet¹ und für Details darauf

¹Mit der Einschränkung, dass der Spektralparameter im Sine-Gordon-Limes anders skaliert ist und mit λ bezeichnet wird, um mit der in dieser Arbeit verwendeten Notation übereinzustimmen.

verwiesen. Dieses Resultat wird direkt auf die nichtlinearen Integralgleichungen für die XYZ-Kette angewandt, wie sie sich in [57] finden.

Der Hamiltonoperator² der XYZ-Kette ist gegeben durch

$$\mathcal{H} = \frac{1}{4} \sum_{j=1}^L \left(J_x \sigma_{j-1}^x \sigma_j^x + J_y \sigma_{j-1}^y \sigma_j^y + J_z \sigma_{j-1}^z \sigma_j^z \right) \quad (\text{A.25})$$

mit $J_x : J_y : J_z = \text{cn}(2\zeta, l) : \text{dn}(2\zeta, l) : 1$ und $0 < l < 1$, $0 \leq 2\zeta \leq K_l$ [41]. Hierbei bezeichnet l den elliptischen Modul und K_l das vollständige elliptische Integral erster Art. Die *bare energy* ist abgesehen von einer additiven Konstanten gegeben durch [91]

$$\varepsilon_0(x) = -\frac{J_z \pi}{\zeta} \text{sn}(2\zeta) a_1(x) \quad (\text{A.26})$$

mit

$$a_1(x) = \frac{\zeta}{\pi} \left(Z(\zeta) + \frac{\text{sn}(\zeta) \text{cn}(\zeta) \text{dn}(\zeta)}{\text{sn}^2(\zeta) - \text{sn}^2(i\zeta x)} \right). \quad (\text{A.27})$$

Hierbei ist ζ durch das Verhältnis der Kopplungen J_i bestimmt. Die elliptischen Funktionen sn , cn , dn und Z haben den elliptischen Modul l und Z bezeichnet Jacobis Zeta-Funktion [2]. Im Sine-Gordon-Limes gilt

$$2\zeta = \pi - \gamma. \quad (\text{A.28})$$

Um die korrekte Verschiebung des Spektralparameters x zu verstehen, sollen zunächst einige Eigenschaften der Funktion a_1 besprochen werden. Für rein imaginäres z ist die Funktion $\text{sn}^2(z)$ reell und periodisch mit Periodizität $2K'_l$, mit einer doppelten Nullstelle am Ursprung und einem Pol zweiter Ordnung bei K'_l . Hierbei ist K'_l das vollständige elliptische Integral erster Art zum konjugierten Modul l' mit $l^2 + l'^2 = 1$. Damit ist für reelles x die Funktion a_1 reell und periodisch mit Periode $2Q$, wobei

$$Q = \frac{K'_l}{\zeta} \quad (\text{A.29})$$

ist. Sie hat ein Maximum am Ursprung und ein Minimum bei Q . Dies beschreibt somit Teilchen mit positiver Energie. Die Teilchen negativer Energie, die den Fermisee im Grundzustand füllen, finden sich bei $\Im x = K'_l/\zeta$. Die Funktion a_1 auf dieser Linie ist wiederum periodisch mit Periode $2Q$, besitzt aber ein Minimum am Ursprung und ein Maximum bei Q . Für das Sine-Gordon-Modell muss somit der Ursprung bei Q liegen. Mit

$$\lambda = \zeta(Q - x) \quad (\text{A.30})$$

folgt für kleine λ und $l \rightarrow 0$ und damit $Q \rightarrow \infty$

$$\varepsilon_0^{SG}(\lambda) \cong \frac{J_z \sin^2(2\zeta)}{4} l^2 \text{ch}(2\lambda). \quad (\text{A.31})$$

Die Kopplung ist für den Grenzfall des Sine-Gordon-Modells als

$$J_z = -\frac{2\gamma}{\pi \sin(\gamma)\delta} \quad (\text{A.32})$$

²Tatsächlich ist in [34] ein mit $-1/2$ multiplizierter Hamiltonoperator angegeben, jedoch wird für die eigentliche Rechnung der Hamiltonoperator (A.25) verwendet, um die Resultate für die TBA-Gleichungen aus [91] direkt verwenden zu können.

zu wählen, siehe Gleichung (B25) in [34].

Diese Verschiebung des Spektralparameters muss nun in den nichtlinearen Integralgleichungen aus [57] vorgenommen werden. Diese verwenden allerdings die Ausdrücke für *dressed excitations* und eine andere Parametrisierung des Hamiltonoperators

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2} \sum_{j=1}^L \left(J_x \sigma_{j-1}^x \sigma_j^x + J_y \sigma_{j-1}^y \sigma_j^y + J_z \sigma_{j-1}^z \sigma_j^z \right) \quad (\text{A.33})$$

mit

$$J_x = i \frac{1 - k \operatorname{sn}^2(i\omega)}{2 \operatorname{sn}(i\omega)}, \quad (\text{A.34a})$$

$$J_y = i \frac{1 + k \operatorname{sn}^2(i\omega)}{2 \operatorname{sn}(i\omega)}, \quad (\text{A.34b})$$

$$J_z = -i \frac{\operatorname{cn}(i\omega) \operatorname{dn}(i\omega)}{2 \operatorname{sn}(i\omega)}, \quad (\text{A.34c})$$

wobei k den elliptischen Modul und K_k und K'_k die zugehörigen vollständigen elliptischen Integrale bezeichnet. Im Limes $k \rightarrow 1$ gilt $2\omega = \gamma$. Eine Transformation dieser unterschiedlichen Parametrisierungen findet sich im Lehrbuch [88]. Es gilt

$$k = \frac{1 - l}{1 + l}. \quad (\text{A.35})$$

Die nichtlinearen Integralgleichungen lauten

$$\begin{aligned} \ln \mathbf{a}(x) = & -\frac{2\pi}{T} c(x) + \int_{-2K_k}^{2K_k} k(x-y) \ln(1 + \mathbf{a}(y)) dy \\ & - \int_{-2K_k}^{2K_k} k(x-y - i2\omega + i\varepsilon) \ln(1 + \bar{\mathbf{a}}(y)) dy, \quad (\text{A.36a}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \ln \bar{\mathbf{a}}(x) = & -\frac{2\pi}{T} c(x) + \int_{-2K_k}^{2K_k} k(x-y) \ln(1 + \bar{\mathbf{a}}(y)) dy \\ & - \int_{-2K_k}^{2K_k} k(x-y + i2\omega - i\varepsilon) \ln(1 + \mathbf{a}(y)) dy, \quad (\text{A.36b}) \end{aligned}$$

mit

$$c(x) = \frac{1}{4K_k} \left[\frac{1}{2} + \sum_{j=1}^{\infty} \frac{\cos(\frac{\pi}{2K_k} jx)}{\operatorname{ch}(\frac{\pi}{2K_k} j\omega)} \right] \quad (\text{A.37})$$

und

$$k(x) = \frac{1}{4K_k} \left[\frac{1}{2} + \sum_{j=1}^{\infty} \frac{\operatorname{sh}\left(\frac{\pi}{2K_k}(K'_k - 2\omega)j\right) \cos\left(\frac{\pi}{2K_k}jx\right)}{\operatorname{ch}\left(\frac{\pi}{2K_k}j\omega\right) \operatorname{sh}\left(\frac{\pi}{2K_k}(K'_k - \omega)j\right)} \right]. \quad (\text{A.38})$$

Hierbei lässt sich $c(x)$ mit der Jacobischen elliptischen Funktion [41]

$$c(x) = \frac{K_s}{4\pi K_k} \operatorname{dn}\left(\frac{K_s}{2K_k}x, s\right) \quad (\text{A.39})$$

identifizieren, wobei die Relation

$$\frac{\omega}{2K_k} = \frac{K'_s}{K_s} \quad (\text{A.40})$$

gilt, welche auch s festlegt.

Im Sine-Gordon-Limes gelten damit die folgenden Beziehungen

$$l \rightarrow 0, \quad K'_l \rightarrow \infty, \quad K_l \rightarrow \frac{\pi}{2}, \quad (\text{A.41a})$$

$$k' \rightarrow 0, \quad K_k \rightarrow \infty, \quad K'_k \rightarrow \frac{\pi}{2}, \quad (\text{A.41b})$$

$$s' \rightarrow 0, \quad K_s \rightarrow \infty, \quad K'_s \rightarrow \frac{\pi}{2}, \quad (\text{A.41c})$$

und

$$K'_l \rightarrow \ln \frac{4}{l}, \quad K_s \rightarrow \frac{4}{s'}, \quad (\text{A.42})$$

bzw.

$$\frac{\omega}{2K_k} = \frac{K'_s}{K_s} = \frac{\omega}{K'_l}. \quad (\text{A.43})$$

Somit folgt

$$\frac{s'}{4} = \left(\frac{l}{4}\right)^{K_s/K'_l} = \left(\frac{l}{4}\right)^{\pi/\gamma}. \quad (\text{A.44})$$

Die Inhomogenität $c(x)$ aus (A.39), die in den nichtlinearen Integralgleichungen (A.36) vorkommt, entspricht der *dressed energy* der XYZ-Kette [48]. Vergleicht man die *dressed energy* in [34] mit $c(x)$, so ergibt sich, dass die Reskalierung des Spektralparameters (A.30) hier

$$x = K'_l - \lambda \quad (\text{A.45})$$

entspricht. Wird dies in die Inhomogenität (A.39) eingesetzt, so folgt im Limes $l \rightarrow 0$ bzw. $s \rightarrow 1$

$$2\pi c(K'_l - \lambda) = \underbrace{\frac{K_s}{2K_k}}_{=2K'_s/\gamma} \operatorname{dn}\left(\underbrace{\frac{K_s K'_l}{2K_k}}_{=K_s} - \underbrace{\frac{K_s \lambda}{2K_k}}_{=2K'_s \lambda/\gamma}, s\right) \quad (\text{A.46a})$$

$$= \frac{\pi}{\gamma} s' \operatorname{nd}\left(\frac{K'_s}{\gamma} \lambda, s\right) \quad (\text{A.46b})$$

$$= \frac{\pi}{\gamma} 4 \left(\frac{l}{4}\right)^{\pi/\gamma} \operatorname{ch}\left(\frac{\pi}{\gamma} \lambda\right). \quad (\text{A.46c})$$

Die Kernfunktion k der XYZ-Kette (A.38) geht direkt in die Kernfunktion K der kritischen XXZ-Kette und damit in die des Sine-Gordon-Modells (4.6a) über. Aus Gleichung (B24) in [34] ergibt sich, dass $4(l/4)^{\pi/\gamma} = m\delta$ gilt.

Für das weitere Vorgehen gilt es zu beachten, dass für festes J_z im Grenzfall zur XXZ-Kette, d.h. $l \rightarrow 0$ bzw. $k \rightarrow 1$, eine andere Normierung der beiden Hamiltonoperatoren (A.25) und (A.33) vorliegt. Es ist

$$\mathcal{H}(\text{A.25}) = -\sin(\gamma)/2\mathcal{H}(\text{A.33}), \quad (\text{A.47})$$

somit muss in den Integralgleichungen nicht obiges J_z (A.32), sondern $J_z = \gamma/(\pi\delta)$ eingesetzt werden. Die Kopplung kann in den Integralgleichungen eingeführt werden, indem die Temperatur T durch T/J_z ersetzt wird. Damit ergeben sich im Sine-Gordon-Limes die Gleichungen³

$$\begin{aligned} \ln \mathbf{a}(x) = & -\frac{m}{T} \operatorname{ch}\left(\frac{\pi}{\gamma}x\right) + \int_{-\infty}^{\infty} K(x-y) \ln(1 + \mathbf{a}(y)) dy \\ & - \int_{-\infty}^{\infty} K(x-y - i\gamma + i\varepsilon) \ln(1 + \bar{\mathbf{a}}(y)) dy, \quad (\text{A.48a}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \ln \bar{\mathbf{a}}(x) = & -\frac{m}{T} \operatorname{ch}\left(\frac{\pi}{\gamma}x\right) + \int_{-\infty}^{\infty} K(x-y) \ln(1 + \bar{\mathbf{a}}(y)) dy \\ & - \int_{-\infty}^{\infty} K(x-y + i\gamma - i\varepsilon) \ln(1 + \mathbf{a}(y)) dy, \quad (\text{A.48b}) \end{aligned}$$

welche genau den Gleichungen (4.7) entsprechen, falls \mathbf{a} mit $\bar{\mathbf{b}}$ und $\bar{\mathbf{a}}$ mit \mathbf{b} identifiziert wird.

Zur Bestimmung der freien Energie wird Gleichung (3.17) aus [57] benötigt, die den größten Eigenwert der Quantentransfermatrix durch die Hilfsfunktionen \mathbf{a} und $\bar{\mathbf{a}}$ ausdrückt

$$\begin{aligned} \ln \Lambda(x) = & N \sum_{j=1}^{\infty} \frac{\operatorname{ch}\left(\frac{\pi}{2K_k}j\omega\right) - \cos\left(\frac{\pi}{2K_k}jx\right) \operatorname{ch}\left(\frac{\pi}{2K_k}j(\omega - 1/NT)\right)}{j \operatorname{ch}\left(\frac{\pi}{2K_k}j\omega\right) \operatorname{sh}\left(\frac{\pi}{2K_k}K'_k j\right)} \operatorname{ch}\left(\frac{\pi}{2K_k}j(K'_k - 2\omega)\right) \\ & + \int_{-2K_k}^{2K_k} c(x-y) [\ln(1 + \mathbf{a}(y)) + \ln(1 + \bar{\mathbf{a}}(y))] dy. \quad (\text{A.49}) \end{aligned}$$

In diesem Ausdruck ist noch die Temperatur T durch T/J_z zu ersetzen. Diese Gleichung ist für die Bestimmung der freien Energie an der Stelle $\lambda = 0$, d.h. $x = K'_l$, auszuwerten. Somit folgt über

$$f = -\lim_{\delta \rightarrow 0} \lim_{l \rightarrow 0} \lim_{N \rightarrow \infty} \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{T}{\delta} \ln \Lambda(K'_l) \quad (\text{A.50})$$

unter Verwendung von (A.46) im Sine-Gordon-Limes der Ausdruck

$$f = e_0 - \frac{mT}{2\gamma} \int_{-\infty}^{\infty} \operatorname{ch}\left(\frac{\pi}{\gamma}y\right) [\ln(1 + \mathbf{a}(y)) + \ln(1 + \bar{\mathbf{a}}(y))] dy \quad (\text{A.51})$$

³Streng genommen sind dies hier andere Hilfsfunktionen, da $\mathbf{a}(K'_l - \lambda)$ aus (A.36a) nun mit $\mathbf{a}(\lambda)$ bezeichnet wird.

für die freie Energie. Dabei bezeichnet e_0 den Grenzwert des ersten Summanden in (A.49) im Sine-Gordon-Limes. Dieser Ausdruck für die freie Energie stimmt für den von den Hilfsfunktionen abhängigen Anteil mit dem in Gleichung (4.9), der ausgehend vom 6-Vertex-Modell hergeleitet wurde, überein.

B. Herleitung der Integralgleichungen für die massive XXZ-Kette

In diesem Kapitel wird die Umschreibung der Integralgleichungen, die den physikalischen Anteil der Korrelationsfunktionen der massiven XXZ-Kette beschreiben, von der \mathfrak{a} -Form, wie sie in [13] verwendet wurde, in die für numerische Berechnungen effiziente Form aus Kapitel 6.2 beschrieben. Die Transformation für die Funktionen \mathfrak{a} in \mathfrak{b} , $\bar{\mathfrak{b}}$ und G in g^\pm findet sich bereits in [18], sie wird hier nur der Vollständigkeit halber mitbeschrieben. Zu beachten ist, dass in [13] die Integralgleichungen für die Funktion mit dem Unordnungsparameter α verwendet werden. Im Folgenden werden direkt die Integralgleichungen für $\alpha = 0$ als zugrundeliegende Gleichungen verwendet. Für die Notation bedeutet dies, dass gilt $G(\lambda, \nu) = G(\lambda, \nu; \alpha)|_{\alpha=0}$, $G'(\lambda, \nu) = \partial_\alpha G(\lambda, \nu; \alpha)|_{\alpha=0}$, $\varphi(\nu) = \varphi(\nu, \alpha)|_{\alpha=0}$, $\omega(\nu_1, \nu_2) = G(\nu_1, \nu_2; \alpha)|_{\alpha=0}$ und $\omega'(\nu_1, \nu_2) = \omega'(\nu_1, \nu_2; \alpha)|_{\alpha=0}$.

Da ein großer Teil der Rechnungen im Fourierraum geschieht, ist es sinnvoll einen Überblick über die auftretenden Funktionen und ihre Darstellungen im Fourierraum zu geben. Diese ist in Tabelle B.1 zu sehen. Dabei wurde für die Fourierreihe die Konvention

$$f(x) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} f_k e^{i2kx} \quad (\text{B.1})$$

mit

$$f_k = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi/2}^{\pi/2} f(x) e^{-i2kx} dx \quad (\text{B.2})$$

verwendet. Für eine Faltung der Form $\frac{1}{\pi}[f * g](x)$ ergibt sich dann im Fourierraum $f_k g_k$.

Die Funktion \mathfrak{a} steht im Zusammenhang mit den Betheansatzgleichungen der Quantentransfermatrix, siehe Kapitel 2. Es gilt

$$\mathfrak{a}(\lambda) = e^{-h/T} \left(\frac{\text{sh}(\lambda - \beta/N) \text{sh}(\lambda + \beta/N - \eta)}{\text{sh}(\lambda + \beta/N) \text{sh}(\lambda - \beta/N + \eta)} \right)^{N/2} \prod_{j=1}^{N/2} \frac{\text{sh}(\lambda - \lambda_j + \eta)}{\text{sh}(\lambda - \lambda_j - \eta)} \quad (\text{B.3})$$

wobei die Betheansatzgleichungen dann gegeben sind durch $\mathfrak{a}(\lambda_j) = -1$ mit $j = 1, \dots, M$. Für sie kann die folgende nichtlineare Integralgleichung hergeleitet werden [58]

$$\ln \mathfrak{a}(\lambda) = -\beta h - 2Ji\beta \text{sh}(\eta) K_{\eta/2}(\lambda + \eta/2) - \int_c \frac{d\omega}{2\pi} K_\eta(\lambda - \omega) \ln(1 + \mathfrak{a}(\omega)) \quad (\text{B.4})$$

wobei hier der Trotter-Limes $N \rightarrow \infty$ bereits durchgeführt ist. Die Funktion $K_\eta(\lambda)$ ist gegeben durch

$$K_\eta(\lambda) = \frac{\text{sh}(2\eta)}{i \text{sh}(\lambda - \eta) \text{sh}(\lambda + \eta)}. \quad (\text{B.5})$$

$$\begin{aligned}
 \tilde{K}_{\eta,k} &= e^{-2\eta|k|} = \left(\tilde{K}_{\eta/2,k} \right)^2 & \tilde{K}_{\eta,k}^{\pm} &= e^{-2\eta(|k|\pm k)} \\
 \kappa_k &= \frac{1}{1 + e^{2\eta|k|}} = \frac{\tilde{K}_{\eta,k}}{1 + \tilde{K}_{\eta,k}} & \kappa_k^{\pm} &= \frac{e^{\mp 2\eta k}}{1 + e^{2\eta|k|}} \\
 d_k &= \frac{1}{\text{ch}(\eta k)} = \frac{2\tilde{K}_{\eta/2,k}}{1 + \tilde{K}_{\eta,k}} & \tilde{P}_k^- &= \Theta(k) \left(e^{-3\eta k} - e^{-\eta k} \right) \\
 \tilde{L}_{\eta,k} &= \text{sign}(k) \tilde{K}_{\eta,k} & \tilde{L}_{\eta,k}^{\pm} &= \text{sign}(k) \tilde{K}_{\eta,k}^{\pm} \\
 l_k &= \text{sign}(k) \frac{1}{4 \text{ch}^2(\eta k)} & l_k^{\pm} &= \text{sign}(k) \frac{e^{\mp 2\eta k}}{4 \text{ch}^2(\eta k)} \\
 c_{\pm,k} &= \pm \frac{e^{\pm \eta k}}{2 \text{ch}^2(\eta k)} \\
 [\text{i cot}(x + \text{i}\xi)]_k &= \text{sign}(\xi) \left(\Theta(\text{sign}(\xi)k) 2e^{-2k|\xi|} - \delta_{0,k} \right), & \xi &\neq 0
 \end{aligned}$$

Tabelle B.1.: Tabelle der Fourierkoeffizienten der für dieses Kapitel relevanten Funktionen und einiger einfacher Zusammenhänge untereinander. $\Theta(x)$ bezeichnet hierbei die Heaviside-Funktion.

Alternativ lässt sich eine Integralgleichung für $\bar{a}(\lambda) = 1/a(\lambda)$ finden. Diese lautet

$$\ln \bar{a}(\lambda) = \beta h - 2J\text{i}\beta \text{sh}(\eta) K_{\eta/2}(\lambda - \eta/2) + \int_{\mathcal{C}} \frac{d\omega}{2\pi} K_{\eta}(\lambda - \omega) \ln(1 + \bar{a}(\omega)). \quad (\text{B.6})$$

Der Integrationsweg \mathcal{C} , die sogenannte kanonische Kontur, in der komplexen Ebene ist in Abbildung B.1 dargestellt und ist die Summe der Wege \mathcal{C}_j , $j \in \{1, +, 2, -\}$. Mit $\Re \mathcal{C}_{\pm} = \pm \eta/2 \mp \varepsilon$ und $\Im \mathcal{C}_{1/2} = \mp \pi/2$, wobei ε eine positive kleine Zahl ist. Der Limes $\varepsilon \rightarrow 0$ ist hier implizit enthalten. Die Funktionen $\ln a$ und $\ln \bar{a}$ und auch die Funktionen G und G' sind in dem Teil der komplexen Ebene, die von \mathcal{C} eingeschlossen wird, bekannt, sobald sie auf der Kontur \mathcal{C} bekannt sind. Für die Berechnung der Korrelationsfunktionen und insbesondere das Umschreiben auf die alternative Form der Hilfsfunktionen genügt allerdings schon die Kenntnis der Funktionen auf der Kontur \mathcal{C} . Hierbei ist zu beachten, dass wegen der $\text{i}\pi$ -Periodizität der Funktionen die Integrale entlang der Wege \mathcal{C}_1 und \mathcal{C}_2 sich gegenseitig aufheben. Daher genügt es die Funktionen entlang zweier gerader Linien parallel zur imaginären Achse zu kennen. Dies erlaubt eine Transformation der Integralgleichungen in den Fourierraum und damit das Umschreiben auf die $\mathfrak{b}\bar{\mathfrak{b}}$ -Form.

Die Funktionen $\mathfrak{b}(x)$ und $\bar{\mathfrak{b}}(x)$ werden nun wie folgt definiert

$$\mathfrak{b}(x) = a(\text{i}x + \eta/2) \quad \wedge \quad \bar{\mathfrak{b}}(x) = \bar{a}(\text{i}x - \eta/2). \quad (\text{B.7})$$

Dann wird auf den Integrationswegen \mathcal{C}_{\pm} unter Ausnutzung der Tatsache $\ln(1 + \bar{a}) = \ln(1 + a) - \ln a$

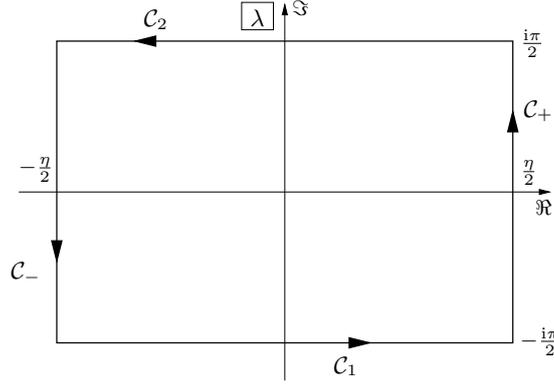


Abbildung B.1.: Die kanonische Kontur \mathcal{C} für die massive XXZ-Kette, d.h. $\Delta = \text{ch}(\eta) > 1$.

die Substitution

$$\ln(1 + \bar{\mathbf{a}}(\omega)) = \begin{cases} \ln(1 + \mathbf{b}(-i\omega + i\eta/2)) - \ln \mathbf{b}(-i\omega + i\eta/2) & \omega \in \mathcal{C}_+ \\ \ln(1 + \bar{\mathbf{b}}(-i\omega - i\eta/2)) & \omega \in \mathcal{C}_- \end{cases}, \quad (\text{B.8a})$$

$$\ln(1 + \mathbf{a}(\omega)) = \begin{cases} \ln(1 + \mathbf{b}(-i\omega + i\eta/2)) & \omega \in \mathcal{C}_+ \\ \ln(1 + \bar{\mathbf{b}}(-i\omega - i\eta/2)) - \ln \bar{\mathbf{b}}(-i\omega - i\eta/2) & \omega \in \mathcal{C}_- \end{cases}, \quad (\text{B.8b})$$

vorgenommen. Damit ergibt sich aus den Integralgleichungen (B.6) bzw. (B.4) nach Verschieben der Integrationswege auf die nun reelle Achse

$$\begin{aligned} \ln \mathbf{b}(x) &= -\beta h - 4J\beta \text{sh}(\eta) \tilde{K}_{\eta/2}(x) \\ &+ \frac{1}{\pi} \left[\tilde{K}_{\eta} * \ln(1 + \mathbf{b})(x) - \tilde{K}_{\eta} * \ln \mathbf{b}(x) - \tilde{K}_{\eta}^- * \ln(1 + \bar{\mathbf{b}})(x) \right], \end{aligned} \quad (\text{B.9a})$$

$$\begin{aligned} \ln \bar{\mathbf{b}}(x) &= \beta h - 4J\beta \text{sh}(\eta) \tilde{K}_{\eta/2}(x) \\ &+ \frac{1}{\pi} \left[\tilde{K}_{\eta} * \ln(1 + \bar{\mathbf{b}})(x) - \tilde{K}_{\eta} * \ln \bar{\mathbf{b}}(x) - \tilde{K}_{\eta}^+ * \ln(1 + \mathbf{b})(x) \right], \end{aligned} \quad (\text{B.9b})$$

wobei zu beachten ist, dass für die Herleitung der Integralgleichung für \mathbf{b} die Gleichung (B.6) und der Integralgleichung für $\bar{\mathbf{b}}$ die Gleichung (B.4) verwendet wurde. Die Integrationskerne sind in Gleichung (6.23) definiert wobei gilt

$$\tilde{K}_{\eta}^{\pm}(x) = \tilde{K}_{\eta}(x \pm i(\eta - \varepsilon)). \quad (\text{B.10})$$

Hierbei dient das ε in obiger Gleichung der Regularisierung der Kernfunktionen. Es ist dadurch begründet, dass die ursprünglichen Integrationswege wie oben erwähnt streng genommen nicht bei $\Re\omega = \pm\eta/2$ sondern leicht verschoben liegen. Im Folgenden wird dieser Sachverhalt in den Kernfunktionen mit η^- notiert. Die Gleichungen (B.9) werden in den Fourierraum transformiert

$$\begin{aligned} [\ln \mathbf{b}]_k &= -\beta h \delta_{k,0} - 4J\beta \text{sh}(\eta) \tilde{K}_{\eta/2,k} \\ &+ \tilde{K}_{\eta,k} [\ln(1 + \mathbf{b})]_k - \tilde{K}_{\eta,k} [\ln \mathbf{b}]_k - \tilde{K}_{\eta,k}^- [\ln(1 + \bar{\mathbf{b}})]_k, \end{aligned} \quad (\text{B.11a})$$

$$\begin{aligned} [\ln \bar{\mathbf{b}}]_k &= \beta h \delta_{k,0} - 4J\beta \operatorname{sh}(\eta) \tilde{K}_{\eta/2,k} \\ &\quad + \tilde{K}_{\eta,k} [\ln(1 + \bar{\mathbf{b}})]_k - \tilde{K}_{\eta,k} [\ln \bar{\mathbf{b}}]_k - \tilde{K}_{\eta,k}^+ [\ln(1 + \mathbf{b})]_k, \end{aligned} \quad (\text{B.11b})$$

und dort nach $[\ln \mathbf{b}]_k$ bzw. $[\ln \bar{\mathbf{b}}]_k$ aufgelöst und in den Realraum zurücktransformiert. Damit ergeben sich die Gleichungen (6.9) in Kapitel 6.2.

Die nächste Funktion, die es umzuschreiben gilt, ist die verallgemeinerte Dichtefunktion $G(\lambda, \nu)$. Sie erfüllt eine lineare Integralgleichung, in die wahlweise \mathbf{a} oder $\bar{\mathbf{a}}$ als äußere Parameter eingehen

$$G(\lambda, \nu) = iK_{\eta/2}(\lambda - \nu - \eta/2) + \int_{\mathcal{C}} \frac{d\omega}{2\pi} K_{\eta}(\lambda - \omega) \frac{G(\omega, \nu)}{1 + \mathbf{a}(\omega)}, \quad (\text{B.12a})$$

$$G(\lambda, \nu) = -iK_{\eta/2}(\lambda - \nu + \eta/2) - \int_{\mathcal{C}} \frac{d\omega}{2\pi} K_{\eta}(\lambda - \omega) \frac{G(\omega, \nu)}{1 + \bar{\mathbf{a}}(\omega)}. \quad (\text{B.12b})$$

Die für die $\mathbf{b}\bar{\mathbf{b}}$ -Formulierung geeigneten Funktionen sind

$$g_{\nu}^+(x) = G(ix + \eta/2, i\nu) \quad \wedge \quad g_{\nu}^-(x) = -G(ix - \eta/2, i\nu). \quad (\text{B.13})$$

Auf den Integrationslinien \mathcal{C}_{\pm} wird in (B.12) die Substitution

$$\frac{G(\omega, i\nu)}{1 + \mathbf{a}(\omega)} = \begin{cases} g_{\nu}^+(-i\omega + i\eta/2) - \frac{g_{\nu}^+(-i\omega + i\eta/2)}{1 + \mathbf{b}^{-1}(-i\omega + i\eta/2)} & \omega \in \mathcal{C}_+ \\ -\frac{g_{\nu}^-(-i\omega - i\eta/2)}{1 + \bar{\mathbf{b}}^{-1}(-i\omega - i\eta/2)} & \omega \in \mathcal{C}_- \end{cases}, \quad (\text{B.14a})$$

$$\frac{G(\omega, i\nu)}{1 + \bar{\mathbf{a}}(\omega)} = \begin{cases} \frac{g_{\nu}^+(-i\omega + i\eta/2)}{1 + \mathbf{b}^{-1}(-i\omega + i\eta/2)} & \omega \in \mathcal{C}_+ \\ -\frac{g_{\nu}^-(-i\omega - i\eta/2)}{1 + \bar{\mathbf{b}}^{-1}(-i\omega - i\eta/2)} - g_{\nu}^-(-i\omega - i\eta/2) & \omega \in \mathcal{C}_- \end{cases}, \quad (\text{B.14b})$$

vorgenommen, wobei $1/(1 + \mathbf{a}) = 1 - 1/(1 + \bar{\mathbf{a}})$ verwendet wurde. Die resultierenden Gleichungen für g_{ν}^{\pm} im Realraum werden in den Fourierraum transformiert. Dort lauten sie

$$g_{\nu,k}^+ = -2\tilde{K}_{\eta/2,k} e^{-i2k\nu} - \tilde{K}_{\eta,k} g_{\nu,k}^+ + \tilde{K}_{\eta,k} \left[\frac{g_{\nu}^+}{1 + \mathbf{b}^{-1}} \right]_k - \tilde{K}_{\eta,k}^- \left[\frac{g_{\nu}^-}{1 + \bar{\mathbf{b}}^{-1}} \right]_k, \quad (\text{B.15a})$$

$$g_{\nu,k}^- = -2\tilde{K}_{\eta/2,k} e^{-i2k\nu} - \tilde{K}_{\eta,k} g_{\nu,k}^- + \tilde{K}_{\eta,k} \left[\frac{g_{\nu}^-}{1 + \bar{\mathbf{b}}^{-1}} \right]_k - \tilde{K}_{\eta,k}^+ \left[\frac{g_{\nu}^+}{1 + \mathbf{b}^{-1}} \right]_k. \quad (\text{B.15b})$$

Auflösen dieser Gleichungen nach $g_{\nu,k}^{\pm}$ und Rücktransformation in den Realraum liefert (6.16).

Mittels der bisher bestimmten Gleichungen lassen sich nun die ersten zwei für die Korrelationsfunktionen relevanten Funktionen φ und ω bestimmen. Für die verallgemeinerte Magnetisierung gilt

$$\varphi(\nu) = 1 + \int_{\mathcal{C}} \frac{d\omega}{i\pi} \frac{G(\omega, \nu)}{1 + \mathbf{a}(\omega)}. \quad (\text{B.16})$$

Da diese Gleichung nur implizit von ν abhängig ist, lässt sich nach Einsetzen von (B.14a) φ trivial durch Fourierkoeffizienten der obigen Funktionen ausdrücken. Es ergibt sich

$$\varphi(\nu) - 1 = g_{\nu,0}^+ - \left[\frac{g_{\nu}^+}{1 + \mathbf{b}^{-1}} \right]_0 + \left[\frac{g_{\nu}^-}{1 + \bar{\mathbf{b}}^{-1}} \right]_0. \quad (\text{B.17})$$

mit $\tilde{\nu} = -i\nu$. Unter Zuhilfenahme von (B.15a), d.h. Auflösen der Gleichung nach $g_{\tilde{\nu},0}^+$ und Einsetzen des Resultates, ergibt sich direkt (6.20), wenn die dort auftretenden Integrale mit Faltungen ausgewertet an der Stelle Null identifiziert werden.

Anstatt direkt die Funktion ω zu betrachten wird eine Funktion Ψ definiert, die sich nur um eine triviale Funktion von ω unterscheidet

$$\omega(\nu_1, \nu_2) + \frac{i}{2} K_\eta(\nu_2 - \nu_1) = -\Psi(\nu_1, \nu_2). \quad (\text{B.18})$$

Diese ist durch das folgende Integral gegeben

$$\Psi(\nu_1, \nu_2) = \int_{\mathcal{C}} \frac{d\omega}{\pi} K_{\eta/2}(\omega - \nu_2 - \eta/2) \frac{G(\omega, \nu_1)}{1 + \mathbf{a}(\omega)}, \quad (\text{B.19})$$

welches explizit nur von ν_2 abhängig ist. Setzt man nun (B.14a) ein um das Integral auf der Kontur auszuwerten, so erhält man

$$\Psi(\nu_1, \nu_2) = -\frac{2}{\pi} \left[\tilde{K}_{\eta/2} * g_{\tilde{\nu}_1}^+(\tilde{\nu}_2) - \tilde{K}_{\eta/2} * \frac{g_{\tilde{\nu}_1}^+}{1 + \mathbf{b}^{-1}}(\tilde{\nu}_2) - \tilde{P}^- * \frac{g_{\tilde{\nu}_1}^-}{1 + \mathbf{b}^{-1}}(\tilde{\nu}_2) \right], \quad (\text{B.20})$$

mit $\tilde{\nu}_j = -i\nu_j$ und

$$\tilde{P}^-(x) = \tilde{K}_{\eta/2}(x - i\eta). \quad (\text{B.21})$$

Für letztere Funktion wurde eine neue Bezeichnung eingeführt, da ihre Darstellung im Fourierraum sich auf nichttriviale Art von der von $\tilde{K}_{\eta/2}$ unterscheidet, siehe Tabelle B.1. Gleichung (B.20) lässt sich nun bezüglich $\tilde{\nu}_2$ in den Fourierraum transformieren. Dort wird wiederum die Lösung von $g_{\tilde{\nu}_1,k}^+$ aus (B.15a) eingesetzt und unter Verwendung der Identität

$$\frac{\tilde{K}_{\eta/2,k} \tilde{K}_{\eta,k}}{1 + \tilde{K}_{\eta,k}} e^{2\eta k} - \tilde{P}_k^- = \frac{d_k}{2} \quad (\text{B.22})$$

ergibt sich nach Einsetzen in (B.18) schließlich (6.22) für ω .

Nun müssen noch die Funktionen betrachtet werden, die sich aus den Ableitungen nach dem Unordnungsparameter α ergeben. Dies ist zunächst die Funktion G' , für die es wiederum zwei alternative Integralgleichungen gibt

$$G'(\lambda, \nu) = \eta \operatorname{cth}(\lambda - \nu - \eta) + \eta \int_{\mathcal{C}} \frac{d\omega}{2\pi} L_\eta(\lambda - \omega) \frac{G(\omega, \nu)}{1 + \mathbf{a}(\omega)} + \int_{\mathcal{C}} \frac{d\omega}{2\pi} K_\eta(\lambda - \omega) \frac{G'(\omega, \nu)}{1 + \mathbf{a}(\omega)}, \quad (\text{B.23a})$$

$$G'(\lambda, \nu) = -\eta \operatorname{cth}(\lambda - \nu + \eta) - \eta \int_{\mathcal{C}} \frac{d\omega}{2\pi} L_\eta(\lambda - \omega) \frac{G(\omega, \nu)}{1 + \bar{\mathbf{a}}(\omega)} - \int_{\mathcal{C}} \frac{d\omega}{2\pi} K_\eta(\lambda - \omega) \frac{G'(\omega, \nu)}{1 + \bar{\mathbf{a}}(\omega)}, \quad (\text{B.23b})$$

mit

$$L_\eta(x) = \frac{1}{i} (\operatorname{cth}(x - \eta) + \operatorname{cth}(x + \eta)). \quad (\text{B.24})$$

Die zwei korrespondierenden Funktionen in der $\bar{\mathbf{b}}\mathbf{b}$ -Formulierung werden wie folgt definiert

$$g_\nu^+(x) = \frac{G'(ix + \eta/2, i\nu)}{\eta} \quad \wedge \quad g_\nu^-(x) = -\frac{G'(ix - \eta/2, i\nu)}{\eta}. \quad (\text{B.25})$$

Die für die Wegstücke \mathcal{C}_\pm vorzunehmende Ersetzung ist analog zu der für G in (B.14)

$$g'_{\nu,k}^+ = - [i \cot(x + i\eta/2)]_k e^{-i2k\nu} - \tilde{L}_{\eta,k} g_{\nu,k}^+ + \tilde{L}_{\eta,k} \left[\frac{g_\nu^+}{1 + \mathfrak{b}^{-1}} \right]_k - \tilde{L}_{\eta,k}^- \left[\frac{g_\nu^-}{1 + \mathfrak{b}^{-1}} \right]_k \\ - \tilde{K}_{\eta,k} g'_{\nu,k}^+ + \tilde{K}_{\eta,k} \left[\frac{g_\nu^+}{1 + \mathfrak{b}^{-1}} \right]_k - \tilde{K}_{\eta,k}^- \left[\frac{g_\nu^-}{1 + \mathfrak{b}^{-1}} \right]_k, \quad (\text{B.26a})$$

$$g'_{\nu,k}^- = - [i \cot(x - i\eta/2)]_k e^{-i2k\nu} - \tilde{L}_{\eta,k} g_{\nu,k}^- + \tilde{L}_{\eta,k} \left[\frac{g_\nu^-}{1 + \mathfrak{b}^{-1}} \right]_k - \tilde{L}_{\eta,k}^+ \left[\frac{g_\nu^+}{1 + \mathfrak{b}^{-1}} \right]_k \\ - \tilde{K}_{\eta,k} g'_{\nu,k}^- + \tilde{K}_{\eta,k} \left[\frac{g_\nu^-}{1 + \mathfrak{b}^{-1}} \right]_k - \tilde{K}_{\eta,k}^+ \left[\frac{g_\nu^+}{1 + \mathfrak{b}^{-1}} \right]_k. \quad (\text{B.26b})$$

In diese Gleichungen müssen nun die Lösungen der Gleichungen (B.15) eingesetzt und die resultierenden Gleichungen nach $g'_{\nu,k}^\pm$ aufgelöst werden. Dies liefert die Gleichungen (6.17) wobei die nichttriviale Identitäten

$$\frac{1}{1 + \tilde{K}_{\eta,k}} \left([i \cot(x \pm i\eta/2)]_k - 2\tilde{K}_{\eta/2,k} \frac{\tilde{L}_{\eta,k}}{1 + \tilde{K}_{\eta,k}} \right) = c_{\pm,k} \quad (\text{B.27})$$

eingehen.

Zuletzt fehlt noch die Funktion ω' . Für sie gibt es eine Feinheit zu beachten, wenn die α -abhängige Integralgleichung für ω in [13] betrachtet wird. Und zwar ist ω' nicht einfach die Ableitung von ω nach dem Unordnungsparameter, sondern es gilt $\omega'(\nu_1, \nu_2; \alpha) = \partial_\alpha (e^{\alpha(\nu_2 - \nu_1)} \omega(\nu_1, \nu_2; \alpha))$. Wie bereits bei der Funktion ω ist es auch hier günstig, zunächst eine sich um eine triviale Funktion unterscheidende Funktion Ψ' zu definieren

$$\omega'(\nu_1, \nu_2) - \eta \tilde{L}_\eta(\tilde{\nu}_2 - \tilde{\nu}_1) = -\Psi'(\nu_1, \nu_2). \quad (\text{B.28})$$

Dabei ist Ψ' gegeben durch

$$\Psi'(\nu_1, \nu_2) = \int_{\mathcal{C}} \frac{d\omega}{\pi} K_{\eta/2}(\nu_2 - \omega + \eta/2) \frac{G'(\omega, \nu_1)}{1 + \mathfrak{a}(\omega)} + \eta \int_{\mathcal{C}} \frac{d\omega}{i\pi} \text{cth}(\nu_2 - \omega + \eta) \frac{G(\omega, \nu_1)}{1 + \mathfrak{a}(\omega)}. \quad (\text{B.29})$$

Genau wie bei Ψ ist hier ν_2 der explizit auftretende Parameter bezüglich dem nach der Umschreibung (B.14a) für G und der analogen Umschreibung für G' eine Transformation in den Fourierraum vorgenommen werden kann. Genau genommen erfolgt die Transformation wie bei Ψ bezüglich $\tilde{\nu}_2$. Es ergibt sich

$$\frac{\Psi'(\nu_1)_k}{\eta} = -2\tilde{k}_{\eta/2,k} \left(g'_{\tilde{\nu}_1,k}^+ - \left[\frac{g_{\tilde{\nu}_1}^+}{1 + \mathfrak{b}^{-1}} \right]_k \right) - 2\tilde{P}_k^- \left[\frac{g_{\tilde{\nu}_1}^-}{1 + \mathfrak{b}^{-1}} \right]_k \\ - [i \cot(x - i\eta/2)]_k \left(g_{\tilde{\nu}_1,k}^+ - \left[\frac{g_{\tilde{\nu}_1}^+}{1 + \mathfrak{b}^{-1}} \right]_k \right) - [i \cot(x - i3\eta/2)]_k \left[\frac{g_{\tilde{\nu}_1}^-}{1 + \mathfrak{b}^{-1}} \right]_k. \quad (\text{B.30})$$

Einsetzen der Lösungen für $g_{\tilde{\nu}_1, k}^+$ und $g'_{\tilde{\nu}_1, k}$ liefert unter Verwendung der Identitäten

$$\tilde{K}_{\eta/2, k} \left(c_{+, k} + \frac{[\mathrm{i} \cot(x - \mathrm{i}\eta/2)]_k}{1 + \tilde{K}_{\eta, k}} \right) = 2l_k, \quad (\text{B.31a})$$

$$[\mathrm{i} \cot(x - \mathrm{i}\eta/2)]_k (1 - \kappa_k) - 2\tilde{K}_{\eta/2, k} l_k = c_{-, k}, \quad (\text{B.31b})$$

$$c_{-, k} e^{2k\eta} = -c_{+, k}, \quad (\text{B.31c})$$

(B.22) und (B.28) schließlich (6.24).

C. Technische Details zu den Grenzfällen der massiven XXZ-Kette

In diesem Anhang werden einige technische Details zu den in Kapitel 8 betrachteten Grenzfällen der XXZ-Kette präsentiert.

C.1. Ising-Kette

Zunächst wird der Grenzfall der Ising-Kette aus Kapitel 8.2 besprochen. Betrachtet man die nichtlinearen Integralgleichungen (6.9) für \mathfrak{b} und $\bar{\mathfrak{b}}$, so findet man, dass diese in einfache vom Spektralparameter unabhängige Gleichungen übergehen

$$\ln \mathfrak{b} = -\frac{h}{2T} - \frac{2J}{T} + \frac{1}{2} \ln(1 + \mathfrak{b}) - \frac{1}{2} \ln(1 + \bar{\mathfrak{b}}), \quad (\text{C.1a})$$

$$\ln \bar{\mathfrak{b}}(x) = \frac{h}{2T} - \frac{2J}{T} + \frac{1}{2} \ln(1 + \bar{\mathfrak{b}}) - \frac{1}{2} \ln(1 + \mathfrak{b}). \quad (\text{C.1b})$$

Diese führen auf eine einfache quadratische Gleichung für \mathfrak{b} . Das hat zur Konsequenz, dass die Lösung nicht eindeutig ist

$$\mathfrak{b}_{\pm} = e^{-(h/2+4J)/T} \left(-\operatorname{sh}\left(\frac{h}{2T}\right) \pm \sqrt{\operatorname{sh}^2\left(\frac{h}{2T}\right) + e^{4J/T}} \right), \quad (\text{C.2a})$$

$$\bar{\mathfrak{b}}_{\pm} = \frac{e^{h/2T}}{-\operatorname{sh}\left(\frac{h}{2T}\right) \pm \sqrt{\operatorname{sh}^2\left(\frac{h}{2T}\right) + e^{4J/T}}}. \quad (\text{C.2b})$$

Die Wahl des Vorzeichens wird erst dadurch festgelegt, dass obige Resultate in die Gleichung (6.10) für die freie Energie bzw. deren Grenzfall im Ising-Limes eingesetzt werden und die zur betragsmäßig größeren freien Energie gehörende Lösung (+) gewählt wird.

Da die weiteren Gleichungen für die restlichen Hilfsfunktionen g^{\pm} und g'^{\pm} linear sind, treten bei diesen keine weiteren Zweideutigkeiten auf. Es sei für die weiteren Rechnungen noch darauf hingewiesen, dass die in den Integralgleichungen auftretenden Integrationskerne κ und κ^{\pm} bzw. l und l^{\pm} sich in diesem Limes insofern unterscheiden, dass bei κ^{\pm} und l^{\pm} im Gegensatz zu κ und l alle negativen bzw. positiven Moden im Fourierraum von Null verschieden sind, siehe Tabelle B.1. Genau genommen ist daher die obige Gleichung (C.1) auch die Gleichung für die Null-Mode im Fourierraum. Jedoch ist direkt klar, dass alle weiteren Gleichungen im Fourierraum gelöst werden, falls \mathfrak{b} und $\bar{\mathfrak{b}}$ Konstanten sind. Wichtig für die Rechnungen wird dies jedoch bei der Berechnung der Funktionen f^{\pm} und h^{\pm} , siehe Gleichung (8.11), da diese Funktionen nicht konstant sind, sondern nichtverschwindende Koeffizienten in den niedrigsten Moden der Fourierreihe besitzen, siehe Gleichung (8.12).

C.2. Störungsrechnung für den Hamiltonoperator der XXZ-Kette

In diesem Abschnitt wird die Störungsrechnung für den Hamiltonoperator (8.16) der XXZ -Kette in Kapitel 8.3 skizziert. Dieser lautet

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_I(h_c) + \underbrace{\frac{J}{\Delta} \sum_{j=1}^L \left(\sigma_{j-1}^x \sigma_j^x + \sigma_{j-1}^y \sigma_j^y - 2\alpha \sigma_j^z \right)}_{:=H_s}. \quad (\text{C.3})$$

Die zugehörige Rechnung erfolgt größtenteils mittels Fermioperatoren und ist analog zu der für das Hubbardmodell im Limes starker Kopplung (siehe z.B. Anhang 2.A in [26]). Da für die Energie der Heisenbergkette am kritischen Punkt nur die Anzahl benachbarter parallel nach unten zeigender Spins relevant ist, werden zunächst entsprechende Operatoren eingeführt. Sei

$$n_j = \frac{1 - \sigma_j^z}{2} \quad (\text{C.4})$$

der Teilchenzahloperator für den Platz j , so sind die Operatoren

$$G(a) = \prod_{j=1}^L (1 - a n_{j-1} n_j) \quad (\text{C.5})$$

Erzeuger der Projektoren

$$P_n = \frac{(-)^n}{n!} \partial_a^n G(a)|_{a=1}. \quad (\text{C.6})$$

Dabei projiziert der Projektor P_n auf den Unterraum der Zustände, die n Paare benachbarter nach unten zeigender Spins besitzen. Hierbei werden z.B. drei benachbarte nach unten zeigende Spins, beispielsweise auf den Plätzen $j - 1$, j und $j + 1$, als zwei Paare benachbarter Spins gewertet.

Für die Störungsreihe ergibt sich damit

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_I(h_c) + \frac{J}{\Delta} P_0 H_s P_0 + \frac{J^2}{\Delta^2} \sum_{m=1}^L \frac{P_0 H_s P_m H_s P_0}{E_0 - E_m} + O(1/\Delta^3), \quad (\text{C.7})$$

wobei E_0 die Grundzustandsenergie pro Gitterplatz von $\mathcal{H}_I(h_c)$ und E_m die zu Zuständen im von P_m erzeugten Unterraum gehörende Energie ist. Es gilt $E_0 - E_m = -4Jm$. Nun ist es nützlich zunächst eine Jordan-Wigner-Transformation vorzunehmen, d.h.

$$\sigma_k^+ = \prod_{j=1}^{k-1} (1 - 2c_j^+ c_j) c_k, \quad (\text{C.8a})$$

$$\sigma_k^- = \prod_{j=1}^{k-1} (1 - 2c_j^+ c_j) c_k^+. \quad (\text{C.8b})$$

Dabei sind c_j^+ und c_j die zu n_j gehörenden Erzeugungs- bzw. Vernichtungsoperatoren. Mit ihrer Hilfe schreibt sich der Störterm im Hamiltonoperator

$$\mathcal{H}_s = 2 \sum_{j,k} \left(t_{jk} c_j^+ c_k \right) - 2\alpha L + 4\alpha \hat{N} \quad (\text{C.9})$$

mit

$$t_{jk} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & \cdots & -(-)^{\hat{N}} \\ 1 & 0 & 1 & & 0 \\ 0 & 1 & 0 & & 0 \\ \vdots & & & \ddots & \\ -(-)^{\hat{N}} & & & & 0 \end{pmatrix}, \quad (\text{C.10})$$

wobei $\hat{N} = \sum_{j=1}^L n_j$ den Teilchenzahloperator bezeichnet. Da der Term $-2\alpha L + 4\alpha\hat{N}$ die Teilchenzahl erhält, fällt er im Produkt $P_m H_s P_0$ bzw. $P_0 H_s P_m$ offensichtlich heraus, sodass er für die weitere Rechnung direkt weggelassen werden kann. Damit ist bereits die Eigenschaft, dass die Korrektur in zweiter Ordnung unabhängig vom Magnetfeld ist, erklärt.

Unter Verwendung von $P_0 n_{j-1} n_j = n_{j-1} n_j P_0 = 0$ folgt

$$G(a) H_s P_0 = 2 \sum_{jk} t_{jk} (1 - a n_{j-1} n_j) (1 - a n_j n_{j+1}) c_j^+ c_k P_0, \quad (\text{C.11})$$

womit sich direkt ergibt, dass $P_n H_s P_0 = 0$ für $n \geq 3$. Eine weitere kurze Rechnung zeigt, dass $P_0 H_s P_2 H_s P_0 = 0$ gilt, womit in der Summe für die Korrektur zweiter Ordnung in Gleichung (C.7) nur ein Summand nicht verschwindet. Somit muss nur noch $P_0 H_s P_1 H_s P_0$ berechnet werden. Die zugehörige Rechnung verwendet ausgehend von

$$P_1 H_s P_0 = 2 \sum_{jk} t_{jk} (n_{j-1} n_j + n_j n_{j+1}) c_j^+ c_k P_0 \quad (\text{C.12})$$

nur noch die oben erwähnte Tatsache, dass $P_0 n_{j-1} n_j = n_{j-1} n_j P_0 = 0$ gilt, womit sich nach der Rücktransformation auf Paulimatrizen

$$P_0 H_s P_1 H_s P_0 = 4 P_0 \sum_{j=1}^L \left[\frac{1}{2} (1 - \sigma_{j-1}^z) (1 - \sigma_{j+1}^z) + (\sigma_{j-2}^+ \sigma_{j-1}^- \sigma_j^+ \sigma_{j+1}^- + h.c.) \right] P_0 \quad (\text{C.13})$$

und damit (8.17) für die Störungsreihe ergibt.

C.3. Skalenlimes und $T=0$ -Grenzfall für große Anisotropie

Zur Herleitung der Gleichungen im Skalenlimes für große Anisotropie aus dem Kapitel 8.5 werden die Funktionen und zugehörigen Integralgleichungen aus Anhang B benötigt.

Im Grenzfall tiefer Temperaturen ergibt sich aus der Gleichung (B.12b) für G ausgedrückt durch die verschobenen Funktionen g^- , siehe Gleichung (B.13),

$$g_\nu^-(x) = -2\tilde{K}_{\eta/2}(x - \nu) - \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \frac{dy}{\pi} \tilde{K}_\eta(x - y) \frac{g_\nu^-(y)}{1 + e^{(\mu - h_c \cos(2y))/\tau}}. \quad (\text{C.14})$$

Für G' folgt ausgehend von Gleichung (B.23b) in diesem Limes

$$g'_{\nu^-}(x) = -i \cot(x - \nu - \frac{i\eta}{2}) - \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \frac{dy}{\pi} \tilde{L}_{\eta}(x-y) \frac{g_{\nu^-}(y)}{1 + e^{(\mu - h_c \cos(2y))/\tau}} - \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \frac{dy}{\pi} \tilde{K}_{\eta}(x-y) \frac{g'_{\nu^-}(y)}{1 + e^{(\mu - h_c \cos(2y))/\tau}}, \quad (\text{C.15})$$

wobei auch hier G und G' durch die verschobenen Funktionen g^- und g'^- , vergleiche Gleichung (B.25), ausgedrückt wurden. Der zweite Teil der Integrationskontur \mathcal{C} aus den ursprünglichen Gleichungen verschwindet, da dieser, analog zu der *dressed energy* (8.28), exponentiell unterdrückt ist für $\Delta \rightarrow \infty$.

Diese Gleichungen lassen sich leicht bis zur Ordnung $\exp(-2\eta)$ lösen, womit folgt

$$g_{\nu^-}(x) = -\frac{2}{1 + I_0} + e^{-\eta} \left[\frac{4I_1}{1 + I_0} \cos(2\nu) - 4 \cos(2(x - \nu)) \right] + e^{-2\eta} \left[\frac{4I_2}{1 + I_0} \cos(4\nu) - \frac{4I_1^2}{(1 + I_0)^2} - 4 \cos(4(x - \nu)) + \frac{4I_1}{1 + I_0} \cos(2x) \right], \quad (\text{C.16a})$$

$$g'_{\nu^-}(x) = \frac{1}{1 + I_0} + e^{-\eta} \left[2e^{-i2(x-\nu)} - \frac{2I_1}{1 + I_0} e^{i2\nu} \right] + e^{-2\eta} \left[2e^{-i4(x-\nu)} + \frac{i4I_1}{1 + I_0} \sin(2x) - \frac{2I_1}{1 + I_0} \cos(2x) - \frac{2I_2}{1 + I_0} e^{i4\nu} + \frac{2I_1^2}{(1 + I_0)^2} \right]. \quad (\text{C.16b})$$

Die oben verwendeten Gleichungen für G und G' sind beide von der Form, dass sie $1/(1 + \bar{\mathbf{a}})$ im Integrationsmaß besitzen. Dies ist im Gegensatz zu $1/(1 + \mathbf{a})$ das Maß, dass im Skalenlimes in die Fermiverteilung und im $T=0$ -Grenzfall in das Intervall über den Fermisee übergeht. Daher müssen die Gleichungen für ω und ω' , wie sie in [13] und hier in den Gleichungen (B.18) und (B.28) zu finden sind, auf dieses Integrationsmaß umgeschrieben werden. Das Verfahren hierzu ist bekannt, siehe z.B. [38]. Es verwendet, dass die Funktionen G und G' nur einfache Pole besitzen. Daher wird hier auf eine ausführliche Darstellung verzichtet, sondern es werden nur die Resultate angegeben. Sie lauten

$$\omega(\nu_1, \nu_2) = -\frac{i}{2} K_{\eta}(\nu_2 - \nu_1) - \int_{\mathcal{C}} \frac{d\omega}{\pi} K_{\eta/2}(\omega - \nu_2 + \eta/2) \frac{G(\omega, \nu_1)}{1 + \bar{\mathbf{a}}(\omega)} \quad (\text{C.17})$$

und

$$\omega'(\nu_1, \nu_2) = \eta \tilde{L}_{\eta}(\tilde{\nu}_2 - \tilde{\nu}_1) - \int_{\mathcal{C}} \frac{d\omega}{\pi} K_{\eta/2}(\nu_2 - \omega - \eta/2) \frac{G'(\omega, \nu_1)}{1 + \bar{\mathbf{a}}(\omega)} - \eta \int_{\mathcal{C}} \frac{d\omega}{i\pi} \text{cth}(\nu_2 - \omega - \eta) \frac{G(\omega, \nu_1)}{1 + \bar{\mathbf{a}}(\omega)}. \quad (\text{C.18})$$

Ausgehend von dieser Form ergibt sich für tiefe Temperaturen

$$\omega(\nu_1, \nu_2) = K_\eta(\tilde{\nu}_1 - \tilde{\nu}_2) + 2 \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \frac{dx}{\pi} K_{\eta/2}(x - \tilde{\nu}_2) \frac{g_{\tilde{\nu}_1}^-(x)}{1 + e^{(\mu - h_c \cos(2x))/\tau}}, \quad (\text{C.19a})$$

$$\begin{aligned} \frac{\omega'(\nu_1, \nu_2)}{\eta} = & -L_\eta(\tilde{\nu}_1 - \tilde{\nu}_2) - \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \frac{dx}{\pi} i \cot(x - \tilde{\nu}_2 - i\eta/2) \frac{g_{\tilde{\nu}_1}^-(x)}{1 + e^{(\mu - h_c \cos(2x))/\tau}} \\ & + 2 \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \frac{dx}{\pi} K_{\eta/2}(x - \tilde{\nu}_2) \frac{g'_{\tilde{\nu}_1}^-(x)}{1 + e^{(\mu - h_c \cos(2x))/\tau}}, \quad (\text{C.19b}) \end{aligned}$$

wobei auch hier die Beiträge des zweiten Integrationsintervalls durch das Maß $1/(1 + \bar{\alpha})$ unterdrückt sind. Nach Einsetzen von (C.16) und unter Verwendung von (6.26) und (6.27) folgen die Gleichungen (8.34) für die Zweipunktfunktionen im Skalenlimes.

Für den $T=0$ -Grenzfall gehen in den obigen Gleichungen Integrale über die Fermiverteilung

$$\int_{-\pi/2}^{\pi/2} \frac{dx}{\pi} \frac{f(x)}{1 + e^{(\mu - h_c \cos(2x))/\tau}} \quad (\text{C.20})$$

in Integrale über den Fermisee über

$$\int_{-\Lambda}^{\Lambda} \frac{dx}{\pi} f(x). \quad (\text{C.21})$$

Die Funktionen I_n , die die Korrelationsfunktionen im Skalenlimes bestimmen, haben den folgenden $T=0$ -Limes

$$I_0 \rightarrow c, \quad (\text{C.22a})$$

$$I_1 \rightarrow \frac{\sin(\pi c)}{\pi}, \quad (\text{C.22b})$$

$$I_2 \rightarrow \frac{\sin(2\pi c)}{2\pi}. \quad (\text{C.22c})$$

Einsetzen dieser Identitäten in die Korrelationsfunktionen im Skalenlimes (8.34) liefert die Korrelationsfunktionen im $T=0$ -Grenzfall (8.27).

Literaturverzeichnis

- [1] N. I. Abarenkova and A. G. Pronko, *Temperature correlation function in the absolutely anisotropic XXZ Heisenberg chain*, Theor. Math. Phys. **131** (2002), 690–703.
- [2] M. Abramowitz and I. Stegun (eds.), *Handbook of mathematical functions*, 8th ed., Dover Publications, Inc., New York, 1975.
- [3] F. C. Alcaraz and R. Z. Bariev, *An Exactly Solvable Constrained XXZ Chain*, Statistical Physics in the Eve of the 21st Century (Series on Advances in Statistical Mechanics) (M.T. Bachelor and L.T. Wille, eds.), vol. 14, World Scientific, Singapore, 1999, [cond-mat/9904042].
- [4] H. M. Babujian, A. Fring, M. Karowski, and A. Zapletal, *Exact form factors in integrable quantum field theories: the sine-Gordon model*, Nucl. Phys. B **538** (1999), 535.
- [5] J. Balog and A. Hegedus, *TBA equations for excited states in the sine-Gordon model*, J. Phys. A **37** (2004), 1903.
- [6] R. J. Baxter, *Exactly solved models in statistical mechanics*, Academic Press, London, 1982.
- [7] F.A. Beresin and V.N. Sushko, *Relativistic two-dimensional model of a self-interacting fermion field with non-vanishing rest mass*, Sov. Phys. JETP **21** (1965), 865–73.
- [8] H. Bergknoff and H.B. Thacker, *Structure and solution of the massive Thirring model*, Phys. Rev. D **19** (1979), no. 12, 3666–3681.
- [9] H. Bethe, *Zur Theorie der Metalle. I. Eigenwerte und Eigenfunktionen der linearen Atomkette*, Z. Phys. **71** (1931), 205.
- [10] H. Boos, J. Damerau, F. Göhmann, A. Klümper, J. Suzuki, and A. Weiße, *Short-distance thermal correlations in the XXZ chain*, J. Stat. Mech. (2008), P08010.
- [11] H. Boos and F. Göhmann, *On the physical part of the factorized correlation functions of the XXZ chain*, J. Phys. A **41** (2009), 315001.
- [12] H. Boos, F. Göhmann, A. Klümper, and J. Suzuki, *Factorization of multiple integrals representing the density matrix of a finite segment of the Heisenberg spin chain*, J. Stat. Mech. (2006), P04001.
- [13] ———, *Factorization of the finite temperature correlation functions of the XXZ chain in a magnetic field*, J. Phys. A **40** (2007), 10699.
- [14] H. Boos, M. Jimbo, T. Miwa, and F. Smirnov, *Completeness of a fermionic basis in the homogeneous XXZ model*, J. Math. Phys. **50** (2009), no. 9, 095206.

- [15] ———, *Hidden Grassmann Structure in the XXZ Model IV: CFT limit*, preprint, <http://arxiv.org/abs/0911.3731>, 2009.
- [16] H. Boos, M. Jimbo, T. Miwa, F. Smirnov, and Y. Takeyama, *Hidden Grassmann structure in the XXZ model II: creation operators*, *Comm. Math. Phys.* **286** (2009), no. 3, 875.
- [17] H. E. Boos and V. E. Korepin, *Quantum spin chains and Riemann zeta function with odd arguments*, *J. Phys. A* **34** (2001), 5311.
- [18] M. Bortz and F. Göhmann, *Exact thermodynamic limit of short range correlation functions of the antiferromagnetic XXZ chain at finite temperatures*, *Eur. Phys. J. B* **46** (2005), 399.
- [19] S. Coleman, *Quantum sine-Gordon equation as the massive Thirring model*, *Phys. Rev. D* **11** (1975), 2088.
- [20] J. Damerau, F. Göhmann, N. P. Hasencllever, and A. Klümper, *Density matrices for finite segments of Heisenberg chains of arbitrary length*, *J. Phys. A* **40** (2007), 4439.
- [21] J. Des Cloizeaux and M. Gaudin, *Anisotropic Linear Magnetic Chain*, *J. Math. Phys.* **7** (1966), no. 8, 1384.
- [22] C. Destri and H. J. de Vega, *Light-cone lattice approach to fermionic theories in 2D*, *Nucl. Phys. B* **290** (1987), 363–391.
- [23] ———, *New thermodynamic Bethe ansatz equations without strings*, *Phys. Rev. Lett.* **69** (1992), no. 16, 2313–2317.
- [24] ———, *Unified approach to Thermodynamic Bethe Ansatz and finite size corrections for lattice models and field theories*, *Nucl. Phys. B* **438** (1995), no. 3, 413–454.
- [25] ———, *Non-linear integral equation and excited-states scaling functions in the sine-Gordon model*, *Nucl. Phys. B* **504** (1997), no. 3, 621–664.
- [26] F. H. L. Essler, H. Frahm, F. Göhmann, A. Klümper, and V. E. Korepin, *The One-Dimensional Hubbard Model*, Cambridge University Press, 2005.
- [27] F. H. L. Essler, H. Frahm, A. G. Izergin, and V. E. Korepin, *Determinant representation for correlation functions of spin-1/2 XXX and XXZ Heisenberg magnets*, *Comm. Math. Phys.* **174** (1995), 191.
- [28] F.H.L. Essler, H. Frahm, A.R. Its, and V.E. Korepin, *Determinant representation for a quantum correlation function of the lattice sine-Gordon model*, *J. Phys. A* **30** (1997), no. 1, 219–244.
- [29] G. Feverati, F. Ravanini, and G. Takács, *Scaling functions in the odd charge sector of sine-Gordon/massive Thirring theory*, *Phys. Lett. B* **444** (1998), no. 3-4, 442–450.
- [30] ———, *Truncated conformal space at $c = 1$, nonlinear integral equation and quantization rules for multi-soliton states*, *Phys. Lett. B* **430** (1998), no. 3-4, 264–273.
- [31] ———, *Non-linear integral equation and finite volume spectrum of sine-Gordon theory*, *Nucl. Phys. B* **540** (1999), no. 3, 543–586.

-
- [32] M. Fowler, *Bosonisation, cut-offs and the spin wave velocity for the Heisenberg-Ising chain*, J. Phys. C **13** (1980), 1459–67.
- [33] M. Fowler and X. Zotos, *Quantum sine-Gordon thermodynamics: The Bethe ansatz method*, Phys. Rev. B **24** (1981), no. 5, 2634–2639.
- [34] ———, *Bethe-ansatz quantum sine-Gordon thermodynamics. The specific heat*, Phys. Rev. B **25** (1982), no. 9, 5806–5817.
- [35] G. Gasper and M. Rahman, *Basic hypergeometric series*, Cambridge University Press, 1990.
- [36] M. Gaudin, *Un système à une dimension de fermions en interaction*, Phys. Lett. A **24** (1967), 55.
- [37] ———, *Thermodynamics of the Heisenberg-Ising Ring for $\Delta \geq 1$* , Phys. Rev. Lett. **26** (1971), no. 21, 1301–1304.
- [38] F. Göhmann, A. Klümper, and A. Seel, *Integral representations for correlation functions of the XXZ chain at finite temperature*, J. Phys. A **37** (2004), 7625.
- [39] ———, *Integral representation of the density matrix of the XXZ chain at finite temperature*, J. Phys. A **38** (2005), 1833.
- [40] F. Göhmann and A. Seel, *XX and Ising limits in integral formulae for finite temperature correlation functions of the XXZ chain*, Theor. Math. Phys. **146** (2006), 119.
- [41] I.S. Gradshteyn and I.M. Ryzhik, *Tafeln - Tables*, Harri Deutsch, 1981.
- [42] H. Itoyama, V. E. Korepin, and H. B. Thacker, *Fredholm determinant representation of quantum correlation function for sine-Gordon at special value of coupling constant*, Mod. Phys. Lett. B **22** (1992), no. 6, 1405–1411.
- [43] A. G. Izergin and V. E. Korepin, *The quantum inverse scattering method approach to correlation functions*, Comm. Math. Phys. **94** (1984), 67.
- [44] M. Jimbo, K. Miki, T. Miwa, and A. Nakayashiki, *Correlation functions of the XXZ model for $\Delta < -1$* , Phys. Lett. A **168** (1992), 256.
- [45] M. Jimbo and T. Miwa, *Quantum KZ equation with $|q| = 1$ and correlation functions of the XXZ model in the gapless regime*, J. Phys. A **29** (1996), 2923.
- [46] M. Jimbo, T. Miwa, and F. Smirnov, *Hidden Grassmann structure in the XXZ model III: introducing Matsubara direction*, J. Phys. A **42** (2009), 304018.
- [47] ———, *On one-point functions of descendants in sine-Gordon model*, preprint, <http://arxiv.org/abs/0912.0934>, 2009.
- [48] J.D. Johnson, S. Krinsky, and B.M. McCoy, *Vertical-Arrow Correlation Length in the Eight-Vertex Model and the Low-Lying Excitations of the X-Y-Z Hamiltonian*, Phys. Rev. A **8** (1973), no. 5, 2526–2547.

- [49] K. Johnson, *Solution of the Equations for the Green's Functions of a two Dimensional Relativistic Field Theory*, Il Nuovo Cimento **20** (1961), no. 4, 773–790.
- [50] M.D. Johnson and M. Fowler, *Finite temperature excitations of the quantum sine-Gordon – massive Thirring model: Variation of the soliton mass with coupling constant and temperature*, Phys. Rev. B **31** (1985), no. 1, 536–545.
- [51] G. Kato, M. Shiroishi, M. Takahashi, and K. Sakai, *Third-neighbour and other four-point correlation functions of spin-1/2 XXZ chain*, J. Phys. A **37** (2004), 5097.
- [52] N. Kitanine, K. Kozłowski, J. M. Maillet, N. A. Slavnov, and V. Terras, *On correlation functions of integrable models associated with the six-vertex R-matrix*, J. Stat. Mech. (2007), P01022.
- [53] N. Kitanine, K. K. Kozłowski, J. M. Maillet, N. A. Slavnov, and V. Terras, *Algebraic Bethe ansatz approach to the asymptotic behavior of correlation functions*, J. Stat. Mech. (2009), P04003.
- [54] N. Kitanine, J. M. Maillet, N. A. Slavnov, and V. Terras, *Correlation functions of the XXZ spin- $\frac{1}{2}$ Heisenberg chain at the free fermion point from their multiple integral representations*, Nucl. Phys. B **642** (2002), 433.
- [55] N. Kitanine, J. M. Maillet, and V. Terras, *Correlation functions of the XXZ Heisenberg spin- $\frac{1}{2}$ chain in a magnetic field*, Nucl. Phys. B **567** (2000), 554.
- [56] A. Klümper, *Free energy and correlation length of quantum chains related to restricted solid-on-solid lattice models*, Ann. Physik **1** (1992), 540.
- [57] ———, *Thermodynamics of the anisotropic spin-1/2 Heisenberg chain and related quantum chains*, Z. Phys. B **91** (1993), 507.
- [58] ———, *Integrability of quantum chains: theory and applications to the spin-1/2 XXZ chain*, Lecture Notes in Physics 645, Springer Verlag, Berlin, 2004, p. 349.
- [59] A. Klümper and M. T. Batchelor, *An analytic treatment of finite-size corrections in the spin-1 antiferromagnetic XXZ chain*, J. Phys. A **23** (1990), no. 5, L189–L195.
- [60] A. Klümper, M.T. Batchelor, and P.A. Pearce, *Central charges of the 6- and 19-vertex models with twisted boundary conditions*, J. Phys. A **24** (1991), no. 13, 3111–3133.
- [61] T. Koma, *Thermal Bethe-ansatz method for the one-dimensional Heisenberg model*, Prog. Theor. Phys. **78** (1987), 1213–1218.
- [62] V. E. Korepin, *The Mass Spectrum and the S Matrix of the Massive Thirring Model in the Repulsive Case*, Comm. Math. Phys. **76** (1980), 165–176.
- [63] V. E. Korepin, N. M. Bogoliubov, and A. G. Izergin, *Quantum inverse scattering method and correlation functions*, Cambridge University Press, 1993.
- [64] V.E. Korepin, *Direct calculation of the S matrix in the massive Thirring model*, Teor. Mat. Fiz. **41** (1979), no. 2, 953–967.
- [65] E. H. Lieb, *Exact solution of the F model of an antiferroelectric*, Phys. Rev. Lett. **18** (1967), no. 24, 1046–1048.

- [66] ———, *Exact solution of the problem of the entropy of two-dimensional ice*, Phys. Rev. Lett. **18** (1967), no. 17, 692–694.
- [67] ———, *Exact solution of the two-dimensional Slater KDP model of a ferroelectric*, Phys. Rev. Lett. **19** (1967), no. 3, 108–110.
- [68] ———, *Residual entropy of square ice*, Phys. Rev. **162** (1967), no. 1, 162–172.
- [69] E. H. Lieb and W. Liniger, *Exact analysis of an interacting Bose gas. I. The general solution and the ground state*, Phys. Rev. **130** (1963), 1605.
- [70] A. Luther, *Eigenvalue spectrum of interacting massive fermions in one dimension*, Phys. Rev. B **14** (1976), 2153.
- [71] S. Mandelstam, *Soliton operators for the quantized sine-Gordon equation*, Phys. Rev. D **11** (1975), 3026.
- [72] L. Onsager, *Crystal statistics. I. A two-dimensional model with an order-disorder transition*, Phys. Rev. **65** (1944), no. 3-4, 117–149.
- [73] A.V. Prokofiev, W. Assmus, K. Removic-Langer, V. Pashchenko, Y. Tsui, B. Wolf, and M. Lang, *Crystal growth and magnetic properties of the copper coordination polymer $[\text{Cu}(\mu - \text{C}_2\text{O}_4)(4 - \text{aminopyridine})_2(\text{H}_2\text{O})]_n$* , Cryst. Res. Technol. **42** (2007), no. 4, 394–399.
- [74] S. N. M. Ruijsenaars, *First order analytic difference equations and integrable quantum systems*, J. Math. Phys. **38** (1997), no. 2, 1069.
- [75] F. Schwabl, *Statistische Mechanik*, 2. ed., Springer-Verlag, Berlin, 2004.
- [76] A. Seel, *Die XXZ-Kette: Statische Korrelationen bei endlichen Temperaturen*, Ph.D. thesis, Bergische Universität Wuppertal, 2005.
- [77] A. Seel, T. Bhattacharyya, F. Göhmann, and A. Klümper, *A note on the spin-1/2 XXZ chain concerning its relation to the Bose gas*, J. Stat. Mech. (2007), P08030.
- [78] A. Seel, F. Göhmann, and A. Klümper, *From multiple integrals to Fredholm determinants*, Prog. Theor. Phys. Suppl. **176** (2008), 375–383.
- [79] E. K. Sklyanin, L. A. Takhtadzhyan, and L. D. Faddeev, *Quantum inverse problem method I*, Theor. Math. Phys. **40** (1979), 688–706.
- [80] F. A. Smirnov, *Form factors in completely integrable models of quantum field theory*, World Scientific, Singapore, 1992.
- [81] C.M. Sommerfield, *On the Definition of Currents and the Action Principle in Field Theories of One Spatial Dimension*, Ann. Phys. **26** (1963), 1–43.
- [82] B. Sutherland, *Exact solution of a two-dimensional model for hydrogen-bonded crystals*, Phys. Rev. Lett. **19** (1967), 103.

- [83] M. Suzuki, *Generalized Trotter's formula and systematic approximants of exponential operators and inner derivations with applications to many-body problems*, Comm. Math. Phys. **51** (1976), no. 2, 183–190.
- [84] ———, *Relationship between d -dimensional quantal spin systems and $(d+1)$ -dimensional Ising systems*, Prog. Theor. Phys **56** (1976), 1454.
- [85] ———, *Transfer-matrix method and Monte Carlo simulation in quantum spin systems*, Phys. Rev. B **31** (1985), 2957.
- [86] M. Suzuki and M. Inoue, *The ST-transformation approach to analytic solutions of quantum systems. I. General formulations and basic limit theorems*, Prog. Theor. Phys. **78** (1987), 787.
- [87] M. Takahashi, *One-dimensional Heisenberg model at finite temperature*, Prog. Theor. Phys. **46** (1971), 401.
- [88] ———, *Thermodynamics of one-dimensional solvable models*, Cambridge University Press, 1999.
- [89] ———, *Simplification of thermodynamic Bethe ansatz equations*, Physics and Combinatorics (A. K. Kirillov and N. Liskova, eds.), World Scientific, Singapore, 2001, pp. 299–304.
- [90] M. Takahashi, G. Kato, and M. Shiroishi, *Next nearest-neighbor correlation functions of the spin-1/2 XXZ chain at massive region*, J. Phys. Soc. Jpn. **73** (2004), 245.
- [91] M. Takahashi and M. Suzuki, *One-Dimensional Anisotropic Heisenberg Model at Finite Temperatures*, Prog. Theor. Phys. **48** (1972), 2187.
- [92] W.E. Thirring, *A Soluble Relativistic Field Theory*, Ann. Phys. **3** (1958), 91–112.
- [93] C. Trippe, F. Göhmann, and A. Klümper, *Short-distance thermal correlations in the massive XXZ chain*, Eur. Phys. J. B **73** (2010), 253–264.
- [94] ———, *Thermodynamics and short-range correlations of the XXZ chain close to its triple point*, J. Stat. Mech.: Theor. Exp. **2010** (2010), no. 01, P01021.
- [95] C. Trippe, A. Honecker, A. Klümper, and V. Ohanyan, *Exact calculation of the magnetocaloric effect in the spin-1/2 XXZ chain*, Phys. Rev. B **81** (2010), no. 5, 054402.
- [96] C. Trippe and A. Klümper, *Quantum phase transitions and thermodynamics of quantum anti-ferromagnets with competing interactions*, Low Temp. Phys. **33** (2007), 920.
- [97] Z. Tsuboi and M. Shiroishi, *High temperature expansion of the emptiness formation probability for the isotropic Heisenberg chain*, J. Phys. A **38** (2005), L363.
- [98] M.F. Weiss and K.D. Schotte, *Lattice approach to the spectrum of the massive Thirring model*, Nucl. Phys. B **225** (1983), 247–260.
- [99] E. T. Whittaker and G. N. Watson, *A course of modern analysis*, fourth ed., ch. 21, Cambridge University Press, 1963.

- [100] C. N. Yang, *Some exact results for the many-body problem in one dimension with repulsive delta-function interaction*, Phys. Rev. Lett. **19** (1967), 1312.
- [101] C. N. Yang and C. P. Yang, *One-dimensional chain of anisotropic spin-spin interactions. III. Applications*, Phys. Rep. **151** (1966), 258.
- [102] ———, *Thermodynamics of a one-dimensional system of Bosons with repulsive delta-function interaction*, J. Math. Phys. **10** (1969), 1115.
- [103] C. P. Yang, *One-Dimensional System of Bosons with Repulsive δ -Function Interactions at a Finite Temperature T* , Phys. Rev. A **2** (1970), no. 1, 154–157.
- [104] X. Zotos and M. Fowler, *Bethe-ansatz quantum sine-Gordon thermodynamics. Finite-temperature excitation spectrum*, Phys. Rev. B **26** (1982), no. 3, 1430–1433.

Danksagung

An dieser Stelle möchte ich allen danken, die zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen haben.

Zunächst möchte ich Herrn Prof. Dr. Andreas Klümper für seine Unterstützung während der Arbeit an dieser Dissertation danken. Seine Anregungen und sein Optimismus waren von unschätzbarem Wert während dieser Zeit.

Ebenfalls gilt mein Dank Herrn Priv.-Doz. Dr. Frank Göhmann, der mich auf das Projekt zu den Korrelationsfunktionen der massiven XXZ-Kette aufmerksam gemacht hat und mich bei meiner Arbeit daran stets mit Rat und Hilfe unterstützt hat.

Ebenso bin ich Herrn Dr. Jens Damerau, Herrn Dr. Alexander Seel, Herrn Dr. Stefan Glocke, Herrn Dr. Nils P. Hasenclever und Frau Dipl.-Phys. Britta Aufgebauer für viele interessante und erhellende Diskussionen zu Dank verpflichtet. Besonderer Dank gilt Herrn Dr. Jens Damerau darüber hinaus für sein Programm zur Lösung der Integralgleichungen, das ich nur für meine Zwecke erweitern und nicht vollständig neu entwickeln musste.

Mein spezieller Dank gilt Frau Dipl.-Phys. Britta Aufgebauer und Herrn Dipl.-Phys. Michael Brockmann, die das Manuskript Korrektur gelesen haben.

Allen Mitgliedern der gesamten Arbeitsgruppe „Vielteilchensysteme“, sowie des Graduiertenkollegs „Darstellungstheorie und ihre Anwendung in Mathematik und Physik“ danke ich für eine hervorragende Arbeitsatmosphäre und ein angenehmes Umfeld.

Während dieser Arbeit erfuhr ich finanzielle Unterstützung durch das Graduiertenkolleg „Darstellungstheorie und ihre Anwendung in Mathematik und Physik“ der Deutschen Forschungsgemeinschaft. Dafür bin ich sehr dankbar.

Mein besonderer Dank gilt meiner Mutter und ihrem Lebensgefährten sowie meinen Schwiegereltern, sie haben mich immer unterstützt. Meine Kinder Michael, Fynn und Jonas haben stets für Freude und Ablenkung gesorgt, wofür ich sehr dankbar bin.

Abschließend möchte ich meiner Frau Kirsten für Ihre Liebe, Geduld und Unterstützung danken.