

# **Untersuchung statischer Korrelationen anisotroper Heisenberg-Spinketten**

Dissertation

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

vorgelegt von

Nils Peter Hasenclever

September 2008

WUB-DIS 2008-07

Die Dissertation kann wie folgt zitiert werden:

urn:nbn:de:hbz:468-20080562

[<http://nbn-resolving.de/urn/resolver.pl?urn=urn%3Anbn%3Ade%3Ahbz%3A468-20080562>]

*Das Richtige konnte man schon tun, aber es war immer möglich, daß alle anderen es für das Falsche hielten. Sie konnten sogar recht haben.*

STEN NADOLNY – DIE ENTDECKUNG DER LANGSAMKEIT



# Inhaltsverzeichnis

<b>1. Einleitung</b>	<b>1</b>
1.1. Integrable Gittermodelle . . . . .	1
1.2. Einbettung, Aufbau und Ergebnisse dieser Arbeit . . . . .	2
<b>2. Grundlagen</b>	<b>7</b>
2.1. Die Spin-1/2-XXZ-Heisenberg-Kette . . . . .	7
2.2. Yang-Baxter-Algebra und Yang-Baxter-Gleichung . . . . .	7
2.3. Transfermatrix und Quanten-Transfermatrix . . . . .	8
2.3.1. Transfermatrixformalismus . . . . .	8
2.3.2. Quanten-Transfermatrixformalismus . . . . .	11
2.4. Algebraischer Bethe-Ansatz . . . . .	13
2.4.1. Darstellungsfreie Formulierung . . . . .	13
2.4.2. Anwendung auf den Fall endlicher Kettenlänge . . . . .	14
2.4.3. Anwendung auf den Fall endlicher Temperatur . . . . .	14
2.4.4. Gemeinsamkeiten und Unterschiede der beiden Zugänge . . . . .	15
2.5. Korrelationen . . . . .	16
2.5.1. Quanten-Transfermatrixformalismus . . . . .	16
2.5.2. Dichtematrix . . . . .	16
<b>I. Dichtematrixelemente</b>	<b>19</b>
<b>3. Korrelationsfunktionen auf Ketten endlicher Länge</b>	<b>21</b>
3.1. Hilfsfunktionen und NLIE . . . . .	21
3.1.1. XXZ-Kette bei endlicher Länge und $T = 0$ . . . . .	21
3.2. Integraldarstellung der Eigenwerte . . . . .	26
3.3. Skalarprodukte und die Dichte-Funktion $G$ . . . . .	28
3.3.1. Slavnov-Formel . . . . .	28
3.3.2. Die Dichte-Funktion $G$ . . . . .	28
3.4. Integraldarstellung der Dichtematrixelemente . . . . .	30
3.4.1. Allgemeine Linkswirkung . . . . .	31
3.4.2. Integraldarstellung . . . . .	32
3.5. Der isotrope Limes . . . . .	33
3.5.1. Die Hilfsfunktionen, der führende Eigenwert und die $G$ -Funktion . . . . .	33
3.5.2. Integraldarstellung der Dichtematrixelemente im isotropen Limes . . . . .	36

3.6.	Separation der Integrale für kleine Abstände . . . . .	36
3.6.1.	Die <i>Emptiness Formation Probability</i> . . . . .	36
3.7.	Numerische Ergebnisse . . . . .	41
3.7.1.	Der Algorithmus . . . . .	41
3.7.2.	Ergebnisse . . . . .	41
<b>4.</b>	<b>Die Dichtematrix im <math>XX</math>-Limes</b>	<b>45</b>
4.1.	Dichtematrix im homogenen Fall . . . . .	46
4.2.	Dichtematrix im inhomogenen Fall . . . . .	49
4.3.	Spezialfälle . . . . .	50
4.3.1.	Die Emptiness Formation Probability . . . . .	50
4.3.2.	Tieftemperaturlimes . . . . .	51
4.4.	Verbindung zu Korrelationsfunktionen . . . . .	51
<b>II.</b>	<b>Asymptotik von Korrelationsfunktionen</b>	<b>53</b>
<b>5.</b>	<b>Bethe-Ansatz</b>	<b>55</b>
5.1.	Lösung der Bethe-Ansatz-Gleichungen . . . . .	55
5.2.	Eigenschaften der Bethe-Ansatz-Zahlen . . . . .	56
5.2.1.	Zerlegung in Real- und Imaginärteil . . . . .	57
5.2.2.	Die Trajektorie der Bethe-Ansatz-Zahlen . . . . .	58
5.3.	Eigenwerte und Korrelationslängen . . . . .	61
5.3.1.	Produktdarstellung . . . . .	62
5.3.2.	Integraldarstellung für den Logarithmus des Eigenwertes . . . . .	63
5.3.3.	Freie Energie und Korrelationslängen . . . . .	66
<b>6.</b>	<b>Die Korrelationsfunktion <math>\langle \sigma_1^z \sigma_{m+1}^z \rangle</math></b>	<b>71</b>
6.1.	Zustände und Entartung . . . . .	72
6.2.	Korrelationslängen . . . . .	73
6.3.	Amplituden . . . . .	74
6.4.	Asymptotisches Ergebnis . . . . .	75
6.5.	Numerische Ergebnisse und Vergleich mit exakten Resultaten . . . . .	77
<b>7.</b>	<b>Die Korrelationsfunktion <math>\langle \sigma_1^- \sigma_{m+1}^+ \rangle</math></b>	<b>81</b>
7.1.	Berechnung der Amplituden . . . . .	81
7.1.1.	Der $XX$ -Limes . . . . .	83
7.2.	Korrelationslängen . . . . .	83
7.3.	Formfaktorentwicklung . . . . .	84
7.4.	Numerische Ergebnisse und Vergleich mit exakten Resultaten . . . . .	84
<b>8.</b>	<b>Zusammenfassung und Ausblick</b>	<b>87</b>

<b>A. Nebenbemerkungen zu Kapitel 3</b>	<b>89</b>
A.1. Der Limes $L \rightarrow \infty$ . . . . .	89
A.2. Verbindung zwischen der Dichtefunktion $G$ und dem Eigenwert . . . . .	89
<b>B. Formelsammlung zur Numerik in Kapitel 3.7</b>	<b>91</b>
B.1. Die Funktionen $\gamma$ , $\gamma_{xx}$ und $\gamma_{xy}$ im homogenen Limes . . . . .	91
B.2. Die Funktionen $g_0^{(+)}$ und $g_0^{(-)}$ auf der reellen Achse . . . . .	92
<b>C. Nebenbemerkungen zu Kapitel 5</b>	<b>95</b>
C.1. Eigenschaften des größten Eigenwertes der QTM . . . . .	95
<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>97</b>



# 1. Einleitung

Die Theorie der kondensierten Materie, in deren Umfeld die vorliegende Arbeit verwurzelt ist, verfolgt das Ziel, die Eigenschaften von Festkörpern auf mikroskopischer Ebene zu verstehen und zu beschreiben. Die größte Herausforderung liegt dabei in der Tatsache, dass auch für vergleichsweise kleine Systeme eine sehr große Anzahl von miteinander wechselwirkenden Konstituenten berücksichtigt werden muss. Bedenken wir, dass schon das Drei-Körper-Problem in der klassischen Mechanik nicht mehr exakt lösbar ist, so verwundert es nicht, dass die quantenmechanische Wechselwirkung einer Vielzahl von Teilchen im Allgemeinen einer exakten Lösung entbehrt. Möchte man trotzdem das Verhalten von Vielteilchen-Systemen untersuchen, ist man gezwungen, Näherungsverfahren zu benutzen, welche die Komplexität des Problems soweit reduzieren, dass eine Lösung des vereinfachten Systems möglich wird. Eine gängige Methode ist beispielsweise, die Wechselwirkung der Teilchen näherungsweise mit Hilfe eines effektiven Potentials darzustellen und zu beobachten, wie sich ein einzelnes Teilchen in diesem effektiven Potential verhält. Damit hat man das Vielteilchen-Problem auf ein Ein-Teilchen-Problem reduziert. Einen genauso bekannten wie erfolgreichen Zugang dieser Art stellt das Bänder-Modell dar [4]. Zur Erlangung verlässlicher numerischer Ergebnisse werden die Resultate dieser Theorien oft noch weiterführend mit störungstheoretischen Methoden verbessert.

Festkörper zeigen jedoch auch kollektive Phänomene, die sich nur aus ihrem Charakter als Vielteilchen-Systeme erklären lassen. Bekannte Vertreter dieser Erscheinungen sind zum Beispiel die Supraleitung, das Verhalten bei Phasenübergängen oder auch der Antiferromagnetismus. Es ist einleuchtend, dass diese Phänomene mit Ein-Teilchen-Methoden nur unzureichend beschrieben werden können. Daher mussten und müssen weitere Zugänge zur Beschreibung von Vielteilchen-Systemen gefunden werden.

## 1.1. Integrale Gittermodelle

Eine Möglichkeit, etwas über Vielteilchen-Systeme und ihre kollektiven Zustände zu lernen, liegt in der Konstruktion von geeigneten Modellen, die bestimmte Aspekte der Wirklichkeit nachbilden und zugänglich machen. Betrachten wir in einem Festkörper nur die niedrig liegenden Anregungen mit Wechselwirkung zwischen den Spins, so gelangen wir auf natürliche Weise zu Spin-Modellen wie dem Hubbard-Modell bzw. dem Heisenberg-Modell (welches sich als Hubbard-Modell im Limes starker Kopplung verstehen läßt) [17]. Diese Modelle beschreiben einen Festkörper in drei Dimensionen immer noch in so hoher Komplexität, dass exakte Lösungen im Allgemeinen nicht möglich sind. Die Beschränkung auf eine Raumdimension allerdings erlaubt die exakte Lösung derartiger Modelle in einigen Spezialfällen,

ohne die Benutzung von effektiven Ein-Teilchen-Näherungen. Die so erhaltenen Resultate sind wichtig, da mit Hilfe dieser Modelle die theoretischen Mechanismen von Vielteilchen-Systemen untersucht werden können. Außerdem erlauben Universalitätseigenschaften auf der Grundlage von exakten Ergebnissen auch Aussagen über nicht exakt lösbare Modelle in der Nähe von kritischen Punkten bzw. Phasenübergängen [2, 9, 11]. Weiterhin wurden im Laufe der Zeit Substanzen gefunden, die quasi-eindimensionales Verhalten zeigen. Neutronen-Streuexperimente an solchen Substanzen liefern die Fourier-Transformierten der Zwei-Punkt-Korrelationsfunktionen der entsprechenden eindimensionalen Modelle (vgl. [49] und Zitate darin). Da einige dieser Substanzen hinreichend genau durch eindimensionale Modelle beschrieben werden, bildet sich eine Verbindung zwischen Theorie und Experiment. Somit lassen sich theoretische Vorhersagen und numerische Verfahren oder Näherungen am Experiment überprüfen und Theorie und Experiment können sich gegenseitig stützen und vorantreiben.

In der vorliegenden Arbeit benutzen wir eine eindimensionale Variante des Heisenberg-Modells [28]. Es beschreibt einen Isolator in einer Dimension mit Hilfe einer Kette von Teilchen, die nur über die Austauschwechselwirkung der Spins interagieren. Alle anderen Wechselwirkungen wie z.B. das (für das Hubbard-Modell entscheidende) Hüpfen von Spins oder Gitteroszillationen werden vernachlässigt. Außerdem wird angenommen, dass die Wechselwirkung nur für die jeweils nächsten Nachbarn spürbar ist. Ist diese Wechselwirkung in allen drei Richtungen des Spinraums unterschiedlich, so spricht man vom XYZ-Modell [7, 19]. Wenn die Wechselwirkung in  $x$ - und  $y$ -Richtung gleich ist, wird hingegen vom XXZ-Modell gesprochen. Diese Modelle lassen sich auf klassische zweidimensionale Vertex-Modelle abbilden [8]. So entspricht das XYZ-Modell dem 8-Vertex-Modell, während die XXZ-Kette äquivalent zum 6-Vertex-Modell ist. Die XXZ-Kette enthält außerdem interessante Grenzfälle wie den Ising-Limes oder den XX-Limes, in denen sie sich weiter vereinfacht und zu einem eindimensionalen klassischen Modell [30, 45] bzw. zu einem Modell für freie Fermionen wird [47].

## 1.2. Einbettung, Aufbau und Ergebnisse dieser Arbeit

Ziel dieser Arbeit ist die Untersuchung statischer Korrelationen zwischen Spins auf eindimensionalen Heisenberg-Ketten. Wir haben uns dabei auf die XXZ-Kette und ihre Spezialfälle, den isotropen Limes (d.h. die Wechselwirkung ist in allen Raumrichtungen gleich) sowie den XX-Limes, konzentriert, da diese noch in vielen Bereichen exakte Berechnungen erlauben. Die Grundlage für die analytische Bearbeitung der Heisenberg-Kette liefert der Koordinaten-Bethe-Ansatz [10], mit dem Bethe den Grundzustand der eindimensionalen Heisenberg-Kette mit Hilfe von Parametern darstellen konnte, die bestimmte Gleichungen erfüllen mussten. Die entscheidende Verbesserung lag dabei darin, dass Bethe durch diesen Ansatz-Gleichungen das Problem von exponentieller Komplexität bezüglich der Kettenlänge auf lineare Komplexität reduzieren konnte. Es folgte die Weiterentwicklung dieses Ansatzes [52, 63, 66–68], die in die Algebraisierung des Koordinaten-Bethe-Ansatzes

durch Baxter mündete [6]. So gelang durch Einführung von sogenannten  $R$ -Matrizen die Verbindung mit der Yang-Baxter-Algebra und der zugehörigen Yang-Baxter-Gleichung. Dies ebnete den Weg zum algebraischen Bethe-Ansatz [20]. Dabei betrachtet man Modelle, deren Hamilton-Operatoren sich durch die obigen  $R$ -Matrizen darstellen lassen. Diese Modelle sind in dem Sinne integrabel, dass das Eigenwertspektrum der zugehörigen Hamilton-Operatoren durch den Bethe-Ansatz bestimmt ist, und ihr Grundzustand angegeben werden kann. Ein großer Vorteil des algebraischen Bethe-Ansatzes ist weiterhin, dass er vergleichsweise einfache Ausdrücke für die Eigenzustände liefert. Dies ermöglicht die Berechnung von Übergangsmatrixelementen, was die Berechnung von Korrelationsfunktionen zugänglich macht.

Auch die  $XXZ$ -Kette ist ein mit Hilfe des algebraischen Bethe-Ansatzes lösbares Modell. Dazu wird ihr Hamilton-Operator mit Hilfe der  $R$ -Matrizen formuliert, die ihrerseits die Konstruktion von Transfer- bzw. Quanten-Transfermatrizen erlauben. Nach Einführung eines geeigneten Bethe-Vakuums ermöglichen die Kommutator-Relationen aus der Yang-Baxter-Algebra die Diagonalisierung dieser Transfermatrizen. Die Eigenwerte und Eigenvektoren werden dabei durch die so genannten Bethe-Ansatz-Zahlen parametrisiert, die als Lösungen der Bethe-Ansatz-Gleichungen gegeben sind. Transfermatrixzugang und Quanten-Transfermatrixzugang unterscheiden sich in der Hauptsache dadurch, dass die Eigenzustände der Transfermatrix direkt zu den Eigenzuständen der Heisenberg-Kette korrespondieren und die zugehörigen Eigenwerte das Energiespektrum festlegen, während die Eigenwerte der Quanten-Transfermatrix (QTM) die Zustandssumme des Systems über den statistischen Operator sowie die Korrelationslängen beschreiben und die zugehörigen Eigenzustände alle Informationen über die Korrelationen enthalten [23, 53].

### Dichtematrixelemente

Ein wichtiger Schritt in der Berechnung von Korrelationsfunktionen wurde in [31] geleistet, wo der Blickwinkel von der direkten Berechnung der Zwei-Punkt-Funktion auf die Dichtematrix-Elemente verschoben wurde (vgl. auch [32]). Ausgehend von Ecken-Transfermatrizen [8] wird dort eine Integraldarstellung für die Dichtematrixelemente der  $XXZ$ -Kette bei  $T = 0$  mit Hilfe von Vertex-Operatoren [21] im so genannten nicht-kritischen Fall bestimmt. Für den kritischen Fall konnte dort eine Vermutung unter Benutzung der  $qKZ$ -Gleichungen [21, 41, 56, 57] angegeben werden. Die Anwendung des algebraischen Bethe-Ansatzes auf dieses Problem erfolgte erstmals in [36] und ermöglichte den endgültigen Beweis der Integraldarstellung im kritischen Bereich, wobei ein endliches Magnetfeld berücksichtigt werden konnte. Dies wurde in [33] benutzt, um Spin-Spin-Korrelationsfunktionen bei  $T = 0$  durch Dichtematrixelemente darzustellen. Später gelang in [34] die Aufsummation von Dichtematrixelementen, was die Berechnung von Zwei-Punkt-Funktionen erlaubte. Die Verallgemeinerung auf den Fall endlicher Temperatur gelang in [23], wo eine handhabbare Integraldarstellung für die erzeugende Funktion der Spin-Spin-Korrelationsfunktion hergeleitet wurde. Ausgehend davon konnte in [24] eine Integraldarstellung für die Dichtematrixelemente der  $XXZ$ -Kette bei endlicher Temperatur angegeben werden, die in [22, 27]

schließlich bewiesen werden konnte. In [22] konnte auch die Aufsummationstechnik aus [34] benutzt werden, um im Fall endlicher Temperatur Integraldarstellungen für Zwei-Punkt-Funktionen zu berechnen.

Im ersten Hauptteil dieser Arbeit konnte eine neue Integraldarstellung der Dichtematrixelemente für Ketten endlicher Länge bei  $T = 0$  hergeleitet werden. Dabei konnten Methoden aus [22, 24] angewendet werden. Dies wurde dadurch ermöglicht, dass integrable Modelle endlicher Länge für  $T = 0$  formal sehr ähnlich zu Modellen im thermodynamischen Limes bei  $T > 0$  sind, was sich durch die in beiden Fällen vorhandenen Anregungslücken in den Spektren erklärt. Es war weiterhin möglich, im isotropen Limes die Faktorisierungsmethode aus [13] auf diesen Fall anzuwenden. Dies erlaubt die Berechnung von Zwei-Punkt-Korrelationen nahe benachbarter Spins auf Ketten endlicher Länge als Korrektur zu den asymptotischen Werten [29, 60]. In [48] konnten die im Rahmen dieser Arbeit erzeugten Daten benutzt werden, um dort erzeugte Quantum Monte Carlo Daten zu überprüfen. Die Faktorisierung der Integraldarstellung der Dichtematrixelemente ist mittlerweile auch im allgemeinen  $XXZ$ -Fall für endliche Temperatur im thermodynamischen Limes geleistet [12, 14], und es scheint möglich zu sein, auch diese Ergebnisse durch die Analogie  $T = 0, L < \infty \leftrightarrow 1/L = 0, 1/T < \infty$  auf Ketten endlicher Länge bei  $T = 0$  zu übertragen.

Die Integraldarstellung für den Fall endlicher Temperatur aus [22] wurde außerdem noch [25] folgend in den  $XX$ -Limes transformiert, was prinzipiell auch für  $T = 0$  und  $L < \infty$  möglich ist und ebenso analoge Ergebnisse hervorbringen sollte. Es konnte so eine kompakte Integraldarstellung für die Dichtematrixelemente bei endlicher Temperatur im  $XX$ -Limes erzeugt werden, die verwendet wurde, um Zwei-Punkt-Korrelationen für kleine Abstände numerisch zu berechnen. Diese Ergebnisse wurden später auch dazu benutzt, die Ergebnisse bzgl. des asymptotischen Verhaltens von  $\langle \sigma^- \sigma^+ \rangle$ -Korrelationen zu testen.

## Asymptotik von Korrelationsfunktionen

Eine weitere interessante Fragestellung beschäftigt sich mit der Asymptotik von Korrelationsfunktionen. Ein wichtiges offenes Problem ist dabei das asymptotische Verhalten von Spin-Spin-Korrelationsfunktionen bei endlichen Temperaturen im allgemeinen  $XXZ$ -Fall [42]. Wir haben hier Vorarbeiten für die Betrachtung des allgemeinen Falls geleistet, und den  $XX$ -Limes bei  $T > 0$  mit Hilfe des algebraischen Bethe-Ansatzes untersucht.

Die Anfänge der Beschäftigung mit den Korrelationsfunktionen der  $XX$ -Kette sind in [46] und dortigen Referenzen dargestellt. Aufbauend auf diese Grundlagen berechneten Wu *et al.* mit Hilfe von Toeplitz-Determinanten die Asymptotik der Korrelationsfunktionen des zweidimensionalen Ising-Modells [65] unter Benutzung eines Theorems von Szegö [26]. Diese Ergebnisse wurden in [5, 50] auf die  $XY$ -Kette angewandt und es konnten Ergebnisse für  $T = 0$  und  $T > 0$  berechnet werden. In [59] wurde die  $XX$ -Kette mit Hilfe von speziellen Transfermatrizen (virtual-space transfer matrix) bzw. Pfaffschen Determinanten [51] untersucht. Dabei konnten die Freie Energie, Anregungslücken und Korrelationslängen bestimmt und die Ergebnisse aus [5, 50] bestätigt werden. Die Ergebnisse für die Eigenwerte und Korrelationslängen konnten in [61] als Grenzfall der  $XXZ$ -Kette mit Hilfe des Bethe-Ansatzes

ebenfalls verifiziert werden. Auch [44] erzielte wieder die bekannten Ergebnisse für die  $XX$ -Kette, jedoch unter Benutzung der Quanten-Transfermatrix. Eine erneute Untersuchung der Asymptotik wurde in [54] durchgeführt, wo die Emptiness Formation Probability (EFP) untersucht wurde. Dort wurde die EFP ebenfalls durch Toeplitz-Determinanten dargestellt, woraufhin die Asymptotik wieder durch das Theorem von Szegö [26] zugänglich wurde.

Es folgt aus dem Quanten-Transfermatrixformalismus, dass die Korrelationsfunktionen eindimensionaler integrierbarer Systeme bei endlicher Temperatur die Form

$$\langle \dots \rangle = \sum_n \exp\{-m/\xi_n\} A_n \quad (1.1)$$

haben. Für den führenden Term der asymptotischen Entwicklung und insbesondere für die Korrelationslängen  $\xi_n$  konnten in [37, 38, 40] Ergebnisse erzielt werden, während handhabbare Ergebnisse für die Amplituden  $A_n$  dieser Entwicklung weiter unbekannt blieben.

Die vorliegende Arbeit ging noch einmal zurück zur  $XX$ -Kette und wendete den algebraischen Bethe-Ansatz direkt auf dieses Modell an. So konnten die bekannten Ausdrücke für die Korrelationslängen und Eigenwerte ein weiteres Mal bestätigt werden. Es war jedoch zusätzlich möglich, die Phasen der Korrelationslängen, die für Oszillationen in der Korrelation sorgen, explizit zu bestimmen. Zudem konnte für die Amplituden  $A_n$  der Formfaktorentwicklung der  $\langle \sigma^z \sigma^z \rangle$ -Korrelationen im  $XX$ -Limes erstmals ein geschlossener Ausdruck angegeben und somit das asymptotische Verhalten der Korrelationen exakt berechnet werden. Für die  $\langle \sigma^- \sigma^+ \rangle$ -Korrelationen konnte für die Amplituden ein noch von den Bethe-Ansatz-Zahlen abhängender Ausdruck hergeleitet werden, der zumindest numerische Untersuchungen erlaubte.

## Aufbau

In Kapitel 2 werden die technischen Grundlagen für die weitere Arbeit kurz dargestellt. Darauf folgt der erste Hauptteil, der sich mit der Berechnung von Korrelationsfunktionen mit Hilfe von Dichtematrixelementen beschäftigt. So wird in Kapitel 3 die Integraldarstellung für die Dichtematrixelemente bei  $T = 0$  und endlicher Kettenlänge  $L$  hergeleitet. Das Ergebnis wird anschließend in den isotropen Limes überführt, wo eine Faktorisierung die numerische Untersuchung mit hoher Genauigkeit erlaubt. Außerdem wird in Kapitel 4 die Integraldarstellung bei endlicher Temperatur im thermodynamischen Limes für die  $XX$ -Kette betrachtet. Der sich anschließende zweite Hauptteil dieser Arbeit beschäftigt sich mit der asymptotischen Entwicklung von Korrelationsfunktionen mit Hilfe der Formfaktorentwicklung im  $XX$ -Limes. Diese Arbeiten dienen als Vorstudien für die noch ausstehende Formfaktorentwicklung im allgemeinen  $XXZ$ -Fall. Kapitel 5 legt die Grundlagen dazu, indem dort detailliert auf den Bethe-Ansatz im  $XX$ -Limes sowie auf die der QTM zugehörigen Eigenwerte und die entsprechenden Korrelationslängen eingegangen wird. In Kapitel 6 wird dann die asymptotische Entwicklung von  $\langle \sigma^z \sigma^z \rangle$ -Korrelationen im  $XX$ -Limes durchgeführt. Die exakten Ergebnisse werden abschließend auch numerisch untersucht. Schließlich bringt Kapitel 7 die Grundlagen für die Formfaktorentwicklung von  $\langle \sigma^- \sigma^+ \rangle$ -Korrelationsfunktionen.

## 1. Einleitung

---

Hier erfolgt eine numerische Untersuchung der Amplituden und Korrelationslängen. Zuletzt werden die Ergebnisse dieser Arbeit in Kapitel 8 zusammengefasst und ausstehende Probleme aufgezeigt.

### **Publikationen in Verbindung mit dieser Arbeit**

Die in Kapitel 3 dargestellten Ergebnisse wurden in [16] veröffentlicht.

## 2. Grundlagen

Im folgenden Kapitel werden die technischen Grundlagen für die weitere Arbeit kurz dargestellt.

### 2.1. Die Spin-1/2-XXZ-Heisenberg-Kette

Das dieser Arbeit zugrunde liegende Modell ist die eindimensionale Spin-1/2-XXZ-Heisenberg-Kette. Sie wird durch den Hamilton-Operator

$$H_{XXZ} = J \sum_{j=1}^L \left( \sigma_{j-1}^x \sigma_j^x + \sigma_{j-1}^y \sigma_j^y + \Delta (\sigma_{j-1}^z \sigma_j^z - 1) \right) \quad (2.1)$$

beschrieben. Dieser ist auf einer Kette mit  $L$  Plätzen definiert, die für Spin-1/2-Zustände durch das  $L$ -fache Tensorprodukt  $(\mathbb{C}^2)^{\otimes L}$  dargestellt wird. In der Summe über direkt benachbarte Gitterplätze parametrisiert  $J > 0$  die globale Kopplung der jeweiligen Spinkomponenten. Diese ist durch Produkte von Pauli-Matrizen  $\sigma_k^\alpha$ ,  $\alpha = x, y, z$ , die nur auf dem  $k$ -ten Kettenplatz nichttrivial wirken, implementiert. Periodische Randbedingungen sind durch  $\sigma_0^\alpha = \sigma_L^\alpha$  gegeben. Der Anisotropieparameter  $\Delta$  ermöglicht es, die Kopplung für die  $z$ -Komponente unabhängig einzustellen. So folgen beispielsweise für  $\Delta = 0$  das  $XX$ -Modell, für  $\Delta = 1$  das  $XXX$ -Modell und für  $\Delta \rightarrow \infty, J \rightarrow 0, J \cdot \Delta = \text{const.}$  das Ising-Modell. Der Bereich mit  $|\Delta| < 1$  ist der kritische Bereich, während für  $\Delta > 1$  das nicht-kritische Regime vorliegt [3].

### 2.2. Yang-Baxter-Algebra und Yang-Baxter-Gleichung

Im weiteren Verlauf der Arbeit untersuchen wir die Spinkette sowohl für endliche Länge bei  $T = 0$ , als auch bei endlicher Temperatur im thermodynamischen Limes  $L \rightarrow \infty$ . Beide Betrachtungsweisen erfordern einen eigenen Zugang, nämlich den gewöhnlichen Transfermatrixzugang einerseits und den Quanten-Transfermatrixzugang andererseits. Grundlage für beide Zugänge sind die Yang-Baxter-Algebra und die Yang-Baxter-Gleichung, die in diesem Abschnitt allgemein eingeführt werden.

Wir betrachten dazu ein quantenmechanisches System mit  $N$  Freiheitsgraden, für welches ein entsprechender Satz von Bewegungsgleichungen  $\{Y_j\}$  mit  $H \in \{Y_j\}$  und der Kommutatorrelation  $[Y_j, Y_k] = 0$  vorliegt. Da das betrachtete System quantenmechanische Eigenschaften haben soll, ist zur Erlangung von Integrabilität noch weitere Information notwendig. Zu

diesem Zweck betrachten wir die assoziative quadratische Yang-Baxter-Algebra  $\mathcal{T}_R$ . Ihre Generatoren  $T_\beta^\alpha(\lambda)$  mit  $\alpha, \beta = 1, \dots, d$ ,  $\lambda \in \mathbb{C}$  erfüllen mit

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

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

$$T_2(\lambda) = I_d \otimes T(\lambda) \quad (2.4)$$

die Yang-Baxter-Algebra

$$R_{12}(\lambda, \mu)T_1(\lambda)T_2(\mu) = T_2(\mu)T_1(\lambda)R_{12}(\lambda, \mu). \quad (2.5)$$

$I_d$  ist dabei die  $d \times d$ -Einheitsmatrix und  $R(\lambda, \mu) \in \text{End}(\mathbb{C}^d \times \mathbb{C}^d)$  die  $R$ -Matrix, die die Strukturkonstanten der Algebra definiert und gleichzeitig in der fundamentalen Darstellung direkt mit dem Hamilton-Operator des zugrundeliegenden Systems verbunden ist.  $T(\lambda)$  wird im weiteren Monodromiematrix genannt. Die YBA ist konsistent und besitzt nichttriviale Darstellungen, wenn die  $R$ -Matrizen die Yang-Baxter-Gleichung (YBE)

$$R_{12}(\lambda, \mu)R_{13}(\lambda, \nu)R_{23}(\mu, \nu) = R_{23}(\mu, \nu)R_{13}(\lambda, \nu)R_{12}(\lambda, \mu) \quad (2.6)$$

mit der durch

$$R_{12}(\lambda, \mu) = R(\lambda, \mu) \otimes I_d, \quad (2.7)$$

$$R_{23}(\lambda, \mu) = I_d \otimes R(\lambda, \mu), \quad (2.8)$$

$$R_{13}^{\alpha\beta\gamma}{}_{\delta\epsilon\phi} = R_{\delta\phi}^{\alpha\gamma} \delta_\epsilon^\beta \quad (2.9)$$

gegeben Einbettung in  $\mathbb{C}^d \otimes \mathbb{C}^d \otimes \mathbb{C}^d$  erfüllen.

## 2.3. Transfermatrix und Quanten-Transfermatrix

Modelle, deren Hamilton-Operatoren direkt mit bestimmten, die YBE erfüllenden  $R$ -Matrizen zusammenhängen, heißen fundamentale Modelle. Wir betrachten zunächst den gewöhnlichen Transfermatrixformalismus und zeigen, wie sich der Hamilton-Operator der  $XXZ$ -Kette aus der  $R$ -Matrix ergibt, um diese dann nachfolgend auf den Quanten-Transfermatrixformalismus umzuformulieren.

### 2.3.1. Transfermatrixformalismus

Ausgehend von der expliziten  $R$ -Matrix

$$R(\lambda, \mu) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & b(\lambda, \mu) & c(\lambda, \mu) & 0 \\ 0 & c(\lambda, \mu) & b(\lambda, \mu) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \begin{aligned} b(\lambda, \mu) &= \frac{\text{sh}(\lambda - \mu)}{\text{sh}(\lambda - \mu + \eta)} \\ c(\lambda, \mu) &= \frac{\text{sh}(\eta)}{\text{sh}(\lambda - \mu + \eta)} \end{aligned} \quad (2.10)$$

und der  $gl(d)$ -Standardbasis  $e_\alpha^\beta \in \text{End}(\mathbb{C}^d)$  mit

$$(e_\alpha^\beta)_{\beta'}^{\alpha'} = \delta_\alpha^{\alpha'} \delta_{\beta'}^\beta, \quad e_\alpha^\beta e_\gamma^\delta = \delta_\gamma^\beta e_\alpha^\delta \quad (2.11)$$

unter der kanonischen Einbettung in den  $\text{End}(\mathbb{C}^d)^{\otimes L}$  definieren wir eine  $L$ -Matrix der Form

$$L_j^\alpha(\lambda, \mu) = R_{\beta\delta}^{\alpha\gamma}(\lambda, \mu) e_{j\gamma}^\delta \in \text{End}(\mathbb{C}^d)^{\otimes L}. \quad (2.12)$$

Die Koordinatendarstellung der Yang-Baxter-Gleichung (2.6) lautet

$$R_{\alpha'\beta'}^{\alpha\beta}(\lambda, \mu) R_{\alpha''\gamma'}^{\alpha'\gamma}(\lambda, \nu) R_{\beta''\gamma''}^{\beta'\gamma'}(\mu, \nu) = R_{\beta'\gamma'}^{\beta\gamma}(\mu, \nu) R_{\alpha'\gamma''}^{\alpha\gamma'}(\lambda, \nu) R_{\alpha''\beta''}^{\alpha'\beta'}(\lambda, \mu). \quad (2.13)$$

Mit (2.12) und  $\check{R}_{\beta\delta}^{\alpha\gamma} = R_{\beta\delta}^{\gamma\alpha}$  folgt aus (2.13) durch Multiplikation mit  $e_{j\gamma}^{\gamma''}$

$$\check{R}(\lambda, \mu) [L_j(\lambda, \nu) \otimes L_j(\mu, \nu)] = [L_j(\mu, \nu) \otimes L_j(\lambda, \nu)] \check{R}(\lambda, \mu). \quad (2.14)$$

Damit ist  $L_j(\lambda, \mu)$  eine Darstellung der Yang-Baxter-Algebra und wird fundamentale Darstellung genannt. Zur Konstruktion der Monodromiematrix benötigen wir noch die Eigenschaft der Co-Multiplikation, die besagt, dass das Produkt von zwei Darstellungen der YBA wieder eine Darstellung der YBA ist. Dies folgt mit

$$[L_{j+1}^\alpha(\lambda, \nu_{j+1}), L_j^\gamma(\lambda, \nu_j)] = 0 \quad (2.15)$$

aus

$$\begin{aligned} & (L_{j+1}(\lambda, \nu_{j+1}) \otimes L_{j+1}(\mu, \nu_{j+1})) (L_j(\lambda, \nu_j) \otimes L_j(\mu, \nu_j)) \\ &= L_{j+1}(\lambda, \nu_{j+1}) L_j(\lambda, \nu_j) \otimes L_{j+1}(\mu, \nu_{j+1}) L_j(\mu, \nu_j), \end{aligned} \quad (2.16)$$

da (2.16) impliziert, dass auch  $L_{j+1}(\lambda, \nu_{j+1}) L_j(\lambda, \nu_j)$  wieder eine Darstellung der YBA ist. Nach diesen Vorarbeiten können wir die Monodromiematrix definieren als

$$T(\lambda) = L_L(\lambda, \nu_L) \cdot \dots \cdot L_1(\lambda, \nu_1), \quad (2.17)$$

und erhalten unmittelbar wieder eine Darstellung der YBA zur ursprünglichen  $R$ -Matrix. Mittels  $t(\lambda) = T_\gamma^\gamma(\lambda) = \text{tr}(T(\lambda))$  folgt aus der Monodromiematrix eine kommutierende Familie von Transfermatrizen mit  $[t(\lambda), t(\mu)] = 0$ .

Da  $R$  regulär ist und damit  $R_{\beta\delta}^{\alpha\gamma}(\lambda_0, \nu_0) = \delta_\delta^\alpha \delta_\beta^\gamma$  für ein bestimmtes Parameterpaar  $\lambda_0, \nu_0 \in \mathbb{C}$  gilt, folgt  $L_j^\alpha(\lambda_0, \nu_0) = e_{j\beta}^\alpha$ . Im homogenen Fall  $\nu_j = \nu_0$  für  $j = 1, \dots, L$  lässt sich  $t(\lambda)$  um  $\lambda_0$  entwickeln. Mit dem Permutationsoperator  $P_{jk} = e_{j\alpha}^\beta e_{k\beta}^\alpha$  und dem damit verbundenen Rechtsschiebeoperator  $\hat{U} = t(\lambda_0) = P_{12} P_{23} \dots P_{L-1, L}$  folgt

$$t(\lambda) = \hat{U} \exp\{(\lambda - \lambda_0) H_L + \mathcal{O}(\lambda - \lambda_0)^2\}. \quad (2.18)$$

Dabei ist auf der durch  $\check{R}_{01} = \check{R}_{L1}$  periodisch geschlossenen Kette per Definition der Hamilton-Operator der fundamentalen Darstellung

$$H_L := \hat{U}^{-1}t'(\lambda_0) = \sum_{j=1}^L \partial_\lambda \check{R}_{j-1,j}(\lambda_0, \nu_0) \quad (2.19)$$

definiert. Mit der expliziten  $R$ -Matrix (2.10) führt (2.19) auf

$$H_L = \frac{1}{2\text{sh}(\eta)} \sum_{j=1}^L \left[ \sigma_{j-1}^x \sigma_j^x + \sigma_{j-1}^y \sigma_j^y + \text{ch}(\eta)(\sigma_{j-1}^z \sigma_j^z - 1) \right], \quad (2.20)$$

so dass mit  $\Delta = \text{ch}(\eta)$  die Beziehung  $H_{XXZ} = 2J\text{sh}(\eta)H_L$  gilt.

### Modifikation zur Anwendung auf die $XXZ$ -Kette endlicher Länge

In Kapitel 3 werden wir den Transfermatrixzugang nutzen, um die  $XXZ$ -Kette endlicher Länge  $L$  bei  $T = 0$  zu betrachten. Dabei wollen wir der Notation aus [39] folgen, was eine Modifikation der obigen Rechnung erforderlich macht.

Um zu erreichen, dass die Transfermatrix später eine ganze Funktion des Spektralparameters wird, definieren wir eine neue  $L$ -Matrix in Differenzenform über

$$\mathcal{L}(\lambda) = \text{sh}(\lambda + \frac{\eta}{2})L(\lambda - \frac{\eta}{2}) = \begin{pmatrix} \text{sh}(\lambda + \frac{\eta}{2})e_1^1 + \text{sh}(\lambda - \frac{\eta}{2})e_2^2 & \text{sh}(\eta)e_2^1 \\ \text{sh}(\eta)e_1^2 & \text{sh}(\lambda - \frac{\eta}{2})e_1^1 + \text{sh}(\lambda + \frac{\eta}{2})e_2^2 \end{pmatrix}. \quad (2.21)$$

Dann folgt für die Monodromiematrix

$$\mathcal{T}(\lambda) = \Theta \mathcal{L}_L(\lambda) \dots \mathcal{L}_1(\lambda), \quad (2.22)$$

wobei  $\Theta = \text{diag}(e^{i\phi}, e^{-i\phi})$  die getwisteten Randbedingungen definiert. Wir erhalten so über  $\tau(\lambda) = \text{tr} \mathcal{T}(\lambda)$  die getwistete Transfermatrix  $\tau(\lambda)$ .

Diese Transfermatrix ist mit der ursprünglichen Transfermatrix  $t(\lambda)$  über

$$\tau(\lambda) = \text{sh}^L(\lambda + \frac{\eta}{2})t(\lambda - \frac{\eta}{2}) \quad (2.23)$$

verbunden. Wir definieren nun die Größe

$$\Gamma(\lambda) = \ln(\tau^{-1}(\frac{\eta}{2})\tau(\lambda)) \quad (2.24)$$

und erhalten  $\Gamma(\frac{\eta}{2}) = 0$ , so dass mit  $\tau^{-1}(\frac{\eta}{2}) = \text{sh}^{-L}(\eta)\hat{U}^{-1}$  aus  $\Gamma'(\frac{\eta}{2})$  der Hamilton-Operator folgt:

$$\begin{aligned} \Gamma'(\frac{\eta}{2}) &= \partial_\lambda \ln \left( \hat{U}^{-1} \frac{\text{sh}^L(\lambda + \frac{\eta}{2})}{\text{sh}^L(\eta)} \tau(\lambda - \frac{\eta}{2}) \right) \Big|_{\lambda=\frac{\eta}{2}} \\ &= L \tanh(\eta) + \hat{U}^{-1}\tau'(0) = L \tanh(\eta) + H_L =: \mathcal{H} \\ &= \frac{1}{2\text{sh}(\eta)} \sum_{j=1}^L \left\{ \sigma_{j-1}^x \sigma_j^x + \sigma_{j-1}^y \sigma_j^y + \Delta(\sigma_{j-1}^z \sigma_j^z + 1) \right\}. \end{aligned} \quad (2.25)$$

### 2.3.2. Quanten-Transfermatrixformalismus

Wir wenden uns nun dem Fall endlicher Temperatur bei unendlicher Kettenlänge zu. Unser Ziel ist dabei die Berechnung der Zustandssumme  $Z = \text{tr} e^{-\beta H}$  mit der inversen Temperatur  $\beta$ . Dazu betrachten wir eine alternative Definition der  $L$ -Matrix

$$\bar{L}_{j\beta}^\alpha(\lambda, \nu_j) = R_{\delta\beta}^{\gamma\alpha}(\nu_j, \lambda) e_{j\gamma}^\delta \in \text{End}(\mathbb{C}^d)^{\otimes L} \quad (2.26)$$

mit  $T(\lambda) = \bar{L}_1(\lambda, \nu_1) \bar{L}_2(\lambda, \nu_2) \dots \bar{L}_L(\lambda, \nu_L)$ . Aus dieser konstruieren wir in Analogie zum vorhergehenden Abschnitt die entsprechende Monodromiematrix und die daraus folgende Transfermatrix, die im homogenen Fall mit  $\nu_j = \lambda_0$ ,  $j = 1, \dots, L$  der Entwicklung

$$\bar{t}(\lambda) = \exp \left[ -(\lambda - \nu_0) H_L + \mathcal{O}(\lambda - \nu_0)^2 \right] \hat{U}^{-1} \quad (2.27)$$

um  $\lambda = \nu_0$  genügt.

Als weiteres technisches Hilfsmittel benötigen wir die Trotter-Suzuki-Formel [58]

$$\lim_{M \rightarrow \infty} \left( 1 + \frac{X_M}{M} \right)^M = e^X. \quad (2.28)$$

Dieser Grenzwert gilt nicht nur für eine gegen  $X$  konvergierende Folge komplexer Zahlen  $(X_M)_{M \in \mathbb{N}}$ , sondern auch für quadratische Matrizen. Aus (2.18) folgt dann mit (2.28)

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \left[ \hat{U}^{-1} t(\lambda_0 - \frac{\beta}{N}) \right]^N = \lim_{N \rightarrow \infty} \left[ 1 + \frac{1}{N} \left( -\beta H_L + \mathcal{O} \left( \frac{1}{N} \right) \right) \right]^N = e^{-\beta H_L}. \quad (2.29)$$

$N$  heißt hier Trotter-Zahl. Die Verwendung von  $\hat{U}^{-1}$  lässt sich durch Benutzung beider Transfermatrizen  $t(\lambda)$  und  $\bar{t}(\lambda)$  mittels der Beziehung

$$\bar{t}(-\lambda + \nu_0) t(\lambda + \lambda_0) = 1 + 2\lambda H_L + \mathcal{O}(\lambda^2) = 1 + 2\lambda X(\lambda) \quad (2.30)$$

vermeiden. Für die approximierende Darstellung endlicher Trotter-Zahl  $N$  des Dichteoperators  $\rho_{N,L}$  folgt dann

$$\rho_{N,L} = \left[ \bar{t} \left( \frac{\beta}{N} + \nu_0 \right) t \left( -\frac{\beta}{N} + \lambda_0 \right) \right]^{\frac{N}{2}} = \left[ 1 + \frac{2}{N} \left( -\beta H_L + \mathcal{O} \left( \frac{1}{N} \right) \right) \right]^{\frac{N}{2}} \quad (2.31)$$

mit  $\lambda = -\beta/N$ ,  $N/2 \in \mathbb{N}$  und  $\lim_{\lambda \rightarrow 0} X(\lambda) = H_L$ . Um nun

$$Z_L = \text{tr}(e^{-\beta H_L}) = \lim_{N \rightarrow \infty} \text{tr}_{1, \dots, L} Z_{N,L} \quad (2.32)$$

mit  $Z_{N,L} = \text{tr}_{1, \dots, L} \rho_{N,L}$  und  $\rho_L = e^{-\beta H_L}$  zu bestimmen, definieren wir zuerst Monodromiematrizen unter Zuhilfenahme von  $N$  Hilfsräumen  $\bar{1}, \dots, \bar{N}$ :

$$T_{\bar{j}}(\lambda) = R_{\bar{j}L}(\lambda, \mu) \dots R_{\bar{j}1}(\lambda, \mu), \quad \bar{T}_{\bar{j}}(\lambda) = R_{1\bar{j}}(\mu, \lambda) \dots R_{L\bar{j}}(\mu, \lambda). \quad (2.33)$$

## 2. Grundlagen

---

Wenn  $R$  unitär ist, also  $R_{12}(\lambda, \mu)R_{21}(\mu, \lambda) = \text{id}$  gilt, folgt  $\bar{T}_{\bar{j}}(\lambda) = T_{\bar{j}}^{-1}$  und für die Transfermatrizen ergibt sich analog zu Kapitel 2.3.1:

$$t(\lambda) = \text{tr}_{\bar{j}} T_{\bar{j}}(\lambda), \quad (2.34)$$

$$\bar{t}(\lambda) = \text{tr}_{\bar{j}} \bar{T}_{\bar{j}}(\lambda). \quad (2.35)$$

Um  $\rho_{N,L}$  umzuformulieren benutzen wir beide Monodromiematrizen und erhalten

$$\rho_{N,L} = \text{tr}_{\bar{1}, \dots, \bar{N}} \left[ \bar{T}_{\bar{N}} \left( \frac{\beta}{N} + \nu_0 \right) T_{\bar{N}-1} \left( -\frac{\beta}{N} + \lambda_0 \right) \dots \bar{T}_{\bar{2}} \left( \frac{\beta}{N} + \nu_0 \right) T_{\bar{1}} \left( -\frac{\beta}{N} + \lambda_0 \right) \right]. \quad (2.36)$$

Durch geschickte Umsortierung der in  $T$  und  $\bar{T}$  enthaltenen  $R$ -Matrizen unter der Spur lässt sich dies schreiben als

$$\rho_{N,L} = \text{tr}_{\bar{1}, \dots, \bar{N}} \left[ T_{\bar{1}}^{QTM}(\lambda_0) \dots T_{\bar{L}}^{QTM}(\lambda_0) \right], \quad (2.37)$$

wobei  $R_{\beta\delta}^{t_1\alpha\gamma} = R_{\alpha\delta}^{\beta\gamma}$  (Transposition des Hilfsraumes) benutzt wurde, und die Quanten-Monodromiematrix  $T_j^{QTM}(\lambda)$  über

$$T_j^{QTM}(\lambda) = R_{j\bar{N}} \left( \lambda, \frac{\beta}{N} + \nu_0 \right) R_{\bar{N}-1j}^{t_1} \left( -\frac{\beta}{N} + \lambda_0, \lambda \right) \dots R_{\bar{1}j}^{t_1} \left( -\frac{\beta}{N} + \lambda_0, \lambda \right) \quad (2.38)$$

definiert ist. Aus dieser folgt dann durch Spurbildung direkt die Quanten-Transfermatrix

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

Mit (2.37–2.39) lässt sich die Zustandssumme durch die Eigenwerte der Quanten-Transfermatrix ausdrücken,

$$Z_L = \lim_{N \rightarrow \infty} \text{tr}_{\bar{1}, \dots, \bar{N}} \left[ t^{QTM}(\lambda_0) \right]^L = \sum_{n=0}^{\infty} \Lambda_n^L(\lambda_0), \quad (2.40)$$

wobei die  $\Lambda_n(0)$  ihre Eigenwerte im Trotterlimes ( $N \rightarrow \infty$ ) beim Spektralparameter  $\lambda_0 = 0$  sind. Unter den Annahmen, dass sich

1. die Limes  $L \rightarrow \infty$  und  $N \rightarrow \infty$  vertauschen lassen, und dass
2. der führende Eigenwert im Trotterlimes vom nächstführenden durch eine endliche Lücke getrennt ist [58, 59],

lässt sich die Freie Energie pro Gitterplatz durch den führenden Eigenwert der Quanten-Transfermatrix ausdrücken:

$$f = - \lim_{N \rightarrow \infty} \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{\ln Z_{N,L}}{\beta L} = - \frac{\ln \Lambda_0(\lambda_0)}{\beta}. \quad (2.41)$$

Dabei ist  $Z_{N,L} = \text{tr}_{1\dots L} \rho_{N,L}$  die approximierte Zustandssumme bei endlicher Trotter-Zahl  $N$ .

Die Spektren der Quanten-Transfermatrix und der gewöhnlichen Transfermatrix lassen sich nun mit Hilfe des algebraischen Bethe-Ansatzes bestimmen. Um diesen anzuwenden ist es noch notwendig zu zeigen, dass auch die Quantentransfermatrix eine Darstellung der YBA ist. Wir betrachten dazu die Yang-Baxter-Gleichung (2.6) sowie die Transponierte bezüglich des Hilfsraumes 1 in (2.6) und erhalten dann mit (2.38) direkt die Gleichung

$$R_{jk}(\lambda, \mu) T_j^{QTM}(\lambda) T_k^{QTM}(\mu) = T_k^{QTM}(\mu) T_j^{QTM}(\lambda) R_{jk}(\lambda, \mu). \quad (2.42)$$

## 2.4. Algebraischer Bethe-Ansatz

Um die Transfermatrix zu diagonalisieren, benutzen wir den algebraischen Bethe-Ansatz. Grundlage dafür sind die quadratischen Vertauschungsregeln aus der Yang-Baxter-Algebra. Der erste Teil des Bethe-Ansatzes lässt sich darstellungsfrei formulieren. Daran anschließend werden die Anwendungen auf die endliche Heisenberg-Kette bei  $T = 0$  und auf die unendlich lange Heisenberg-Kette bei  $T > 0$  diskutiert, und die enge Verwandtschaft der beiden Zugänge aufgezeigt.

### 2.4.1. Darstellungsfreie Formulierung

Die quadratischen Vertauschungsregeln für die Monodromiematrixelemente ergeben sich direkt aus der Yang-Baxter-Gleichung, wenn wir  $T = \begin{pmatrix} A & B \\ C & D \end{pmatrix}$  einsetzen:

$$\begin{aligned} \check{R}(\lambda, \mu) & \left[ \begin{pmatrix} A(\lambda) & B(\lambda) \\ C(\lambda) & D(\lambda) \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} A(\mu) & B(\mu) \\ C(\mu) & D(\mu) \end{pmatrix} \right] \\ & = \left[ \begin{pmatrix} A(\mu) & B(\mu) \\ C(\mu) & D(\mu) \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} A(\lambda) & B(\lambda) \\ C(\lambda) & D(\lambda) \end{pmatrix} \right] \check{R}(\lambda, \mu). \end{aligned} \quad (2.43)$$

Weiterhin muß die Existenz eines Pseudovakuums  $|0\rangle$  gegeben sein, auf welches die Monodromiematrix als obere Dreiecksmatrix wirkt:

$$A(\lambda)|0\rangle = a(\lambda)|0\rangle, \quad B(\lambda)|0\rangle \neq 0, \quad C(\lambda)|0\rangle = 0, \quad D(\lambda)|0\rangle = d(\lambda)|0\rangle. \quad (2.44)$$

Die Eigenwerte  $a(\lambda)$  und  $d(\lambda)$  der Diagonaleinträge der Monodromiematrix hängen von der expliziten Darstellung ab und bestimmen die endgültige Lösung des Bethe-Ansatzes.

Die zugehörigen Eigenzustände werden durch Anwendung des Operators  $B(\lambda)$  auf das Pseudovakuum erzeugt,

$$|\{\lambda\}\rangle = |\{\lambda_j\}_{j=1}^M\rangle = B(\lambda_1) \dots B(\lambda_M)|0\rangle, \quad (2.45)$$

wenn die Bethe-Ansatz-Zahlen  $\lambda_j$  das Gleichungssystem

$$\frac{a(\lambda_j)}{d(\lambda_j)} = \prod_{\substack{k=1 \\ k \neq j}}^M \frac{\text{sh}(\lambda_j - \lambda_k + \eta)}{\text{sh}(\lambda_j - \lambda_k - \eta)} \quad (2.46)$$

erfüllen. Für den Eigenwert zum Eigenzustand  $|\{\lambda\}\rangle$  gilt dann

$$\Lambda(\lambda) = a(\lambda) \prod_{j=1}^M \frac{\text{sh}(\lambda - \lambda_j - \eta)}{\text{sh}(\lambda - \lambda_j)} + d(\lambda) \prod_{j=1}^M \frac{\text{sh}(\lambda - \lambda_j + \eta)}{\text{sh}(\lambda - \lambda_j)}. \quad (2.47)$$

### 2.4.2. Anwendung auf den Fall endlicher Kettenlänge

Wir betrachten hier eine Heisenberg-Kette der Länge  $L$  im kritischen antiferromagnetischen Regime  $J > 0$  mit  $-1 < \Delta \leq 1$  und definieren die Randbedingungen mit dem Twist-Winkel  $\phi$  über

$$\begin{pmatrix} e_{01}^1 & e_{02}^1 \\ e_{01}^2 & e_{02}^2 \end{pmatrix} = \Theta \begin{pmatrix} e_{L1}^1 & e_{L2}^1 \\ e_{L1}^2 & e_{L2}^2 \end{pmatrix} \Theta^{-1}, \quad (2.48)$$

wobei  $\Theta = \text{diag}(e^{i\phi}, e^{-i\phi})$ ,  $\phi \in [0, 2\pi]$ . Die Eigenzustände zu den Eigenwerten von  $\tau(\lambda)$  werden durch die Wirkung der Operatoren  $B(\lambda)$  auf das zugehörige Vakuum

$$|0\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}^{\otimes L} \quad (2.49)$$

gebildet:

$$|\{\lambda\}\rangle = B(\lambda_1) \dots B(\lambda_M)|0\rangle. \quad (2.50)$$

Wir benutzen nun die in Kapitel 2.3.1 eingeführten Modifikationen und erhalten für die Erwartungswerte der Diagonalelemente der Monodromiematrix

$$a(\lambda) = \omega \text{sh}^L(\lambda + \frac{\eta}{2}), \quad d(\lambda) = \frac{1}{\omega} \text{sh}^L(\lambda - \frac{\eta}{2}), \quad (2.51)$$

wobei  $\omega := e^{i\phi}$ . Die Bethe-Ansatz-Gleichungen haben dann die Form

$$\frac{1}{\omega^2} \left( \frac{\text{sh}(\lambda_j - \frac{\eta}{2})}{\text{sh}(\lambda_j + \frac{\eta}{2})} \right)^L \prod_{k=1}^M \frac{\text{sh}(\lambda_j - \lambda_k + \eta)}{\text{sh}(\lambda_j - \lambda_k - \eta)} = -1, \quad (2.52)$$

und für die Eigenwerte der Transfermatrix folgt

$$\Lambda(\lambda) = \omega \text{sh}^L(\lambda + \frac{\eta}{2}) \prod_{j=1}^M \frac{\text{sh}(\lambda - \lambda_j - \eta)}{\text{sh}(\lambda - \lambda_j)} + \frac{1}{\omega} \text{sh}^L(\lambda - \frac{\eta}{2}) \prod_{j=1}^M \frac{\text{sh}(\lambda - \lambda_j + \eta)}{\text{sh}(\lambda - \lambda_j)}. \quad (2.53)$$

### 2.4.3. Anwendung auf den Fall endlicher Temperatur

Im Fall endlicher Temperatur betrachten wir eine unendlich lange Heisenberg-Kette mit periodischen Randbedingungen. Zur Anwendung des algebraischen Bethe-Ansatzes definieren wir das Pseudovakuum

$$|0\rangle = \left[ \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \right]^{\otimes \frac{N}{2}} \quad (2.54)$$

mit den Zuständen  $\binom{1}{0}$  auf den geraden und  $\binom{0}{1}$  auf den ungeraden Plätzen. Die analog zu Kapitel 2.3.2 konstruierten  $L$ -Matrizen

$$L_j(\lambda, \nu) = \begin{pmatrix} e_{\bar{j}1}^{-1} + b(\lambda, \nu)e_{\bar{j}2}^{-2} & c(\lambda, \nu)e_{\bar{j}2}^{-1} \\ c(\lambda, \nu)e_{\bar{j}1}^{-2} & b(\lambda, \nu)e_{\bar{j}1}^{-1} + e_{\bar{j}2}^{-2} \end{pmatrix}, \quad (2.55)$$

$$\tilde{L}_j(-\nu, \lambda) = \begin{pmatrix} e_{\bar{j}1}^{-1} + b(-\nu, \lambda)e_{\bar{j}2}^{-2} & c(-\nu, \lambda)e_{\bar{j}1}^{-2} \\ c(-\nu, \lambda)e_{\bar{j}2}^{-1} & b(-\nu, \lambda)e_{\bar{j}1}^{-1} + e_{\bar{j}2}^{-2} \end{pmatrix}, \quad (2.56)$$

wirken dann an den entsprechenden Plätzen als obere Dreiecksmatrizen auf das Vakuum. Damit folgt die Quanten-Monodromiematrix

$$T^{QTM}(\lambda) = L_N(\lambda, \frac{\beta}{N})\tilde{L}_{N-1}(-\frac{\beta}{N}, \lambda) \dots \tilde{L}_1(-\frac{\beta}{N}, \lambda), \quad (2.57)$$

und die expliziten Darstellungen von  $a(\lambda)$  und  $d(\lambda)$  lauten

$$a(\lambda) = b\left(-\frac{\beta}{N}, \lambda\right)^{\frac{N}{2}} = \left(\frac{\text{sh}(\lambda + \frac{\beta}{N})}{\text{sh}(\lambda + \frac{\beta}{N} - \eta)}\right)^{\frac{N}{2}}, \quad (2.58)$$

$$d(\lambda) = b\left(\lambda, \frac{\beta}{N}\right)^{\frac{N}{2}} = \left(\frac{\text{sh}(\lambda - \frac{\beta}{N})}{\text{sh}(\lambda - \frac{\beta}{N} + \eta)}\right)^{\frac{N}{2}}. \quad (2.59)$$

Die Eigenzustände werden durch

$$|\{\lambda\}\rangle = |\{\lambda_j\}_{j=1}^M\rangle = B(\lambda_1) \dots B(\lambda_M)|0\rangle \quad (2.60)$$

gebildet und die explizite Form der Bethe-Ansatz-Gleichungen, die hier wieder die Menge  $\{\lambda_j\}_{j=1}^M$  festlegen, erhält man durch Einsetzen von (2.58, 2.59) in (2.46), während der Ausdruck für die Eigenwerte durch das Einsetzen von (2.58, 2.59) in (2.47) folgt.

Weiterhin erfordert die Beziehung  $H_{XZX} = 2J\text{sh}(\eta)H_L$  die Umskalierung  $T = \frac{2J\text{sh}(\eta)}{\beta}$  der physikalischen Temperatur  $T$ .

#### 2.4.4. Gemeinsamkeiten und Unterschiede der beiden Zugänge

Im Vergleich der beiden Zugänge (endliche Temperatur im Quanten-Transfermatrixzugang vs. endliche Länge im gewöhnlichen Transfermatrixzugang) wird deutlich, dass beide stark verwandt sind und sich nur durch die Wahl des Vakuums und der damit verbundenen Konstruktion der  $L$ - und Monodromiematrizen unterscheiden. Dies wirkt sich in relevanter Form nur auf die explizite Darstellung der Grundzustandseigenwerte  $a(\lambda)$  und  $d(\lambda)$  der Diagonalelemente der Monodromiematrizen aus. Der algebraische Teil ist identisch, was es ermöglicht, Rechnungen die z.B. für endliche Temperatur auf unendlichen Ketten durchgeführt wurden, mit geringem Aufwand auf eine Heisenberg-Kette endlicher Länge bei  $T = 0$  zu übertragen.

Physikalisch gesehen bestimmen die Eigenwerte der gewöhnlichen Transfermatrix das Energiespektrum der Kette. Ihre Eigenvektoren sind die Eigenzustände der Kette, während andererseits der führende Eigenwert der Quanten-Transfermatrix im thermodynamischen Limes die Zustandssumme generiert und die entsprechenden Eigenvektoren des führenden Eigenwertes die statischen Korrelationen zugänglich machen, wie in Kapitel 2.5.1 skizziert wird.

Es ist außerdem zu beachten, dass im Fall endlicher Länge eine Verschiebung der Bethe-Ansatz-Zahlen um  $\frac{i\gamma}{2}$  eingeführt wurde. Sie erlaubt den Anschluß an die Notation von [39] und sorgt dafür, dass die Bethe-Ansatz-Zahlen auf der reellen Achse liegen. Im weiteren Verlauf der Rechnung von Kapitel 3 wird diese Verschiebung durch ebenfalls verschobene Inhomogenitäten berücksichtigt.

## 2.5. Korrelationen

Im Zentrum dieser Arbeit steht die Berechnung von Korrelationsfunktionen der  $XXZ$ -Kette mit verschiedenen Methoden und in verschiedenen Grenzfällen.

In Teil I wird die Darstellbarkeit von Korrelationsfunktionen mit Hilfe von Dichtematrixelementen ausgenutzt, während in Teil II dieser Arbeit die Asymptotik von Korrelationsfunktionen direkt in der Darstellung durch Monodromiematrixelemente untersucht wird.

### 2.5.1. Quanten-Transfermatrixformalismus

Korrelationsfunktionen beliebiger lokaler Operatoren  $X_j^{(1)}, \dots, X_k^{(k-j+1)}$  lassen sich mit Hilfe von Monodromiematrixelementen ausdrücken. Wir betrachten bei endlicher Temperatur Korrelationsfunktionen der Form

$$\langle X_j^{(1)} \dots X_k^{(k-j+1)} \rangle_T = \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{\text{tr}_{1, \dots, L} e^{-\beta H_L} X_j^{(1)} \dots X_k^{(k-j+1)}}{\text{tr}_{1, \dots, L} e^{-\beta H_L}}. \quad (2.61)$$

Aus dem Quanten-Transfermatrixformalismus (vgl. Glgn. (2.37) und (2.40)) folgt für die  $XXZ$ -Kette mit  $j, k \in \{1, \dots, L\}$ ,  $j \leq k$  aus der Tatsache, dass die Quanten-Transfermatrix diagonalisierbar ist im thermodynamischen Limes unter Einführung von Inhomogenitäten  $\xi_j$ ,  $j = 1 \dots, m$  als Ergebnis gemäß [23] (mit ab hier unterdrücktem oberem Index  $QTM$ ):

$$\langle X_j^{(1)} \dots X_k^{(m)} \rangle_T = \lim_{N \rightarrow \infty} \lim_{\xi_1, \dots, \xi_m \rightarrow 0} \frac{\langle \{\lambda\} | (\text{tr} T(\xi_1) X^{(1)}) \dots (\text{tr} T(\xi_m) X^{(m)}) | \{\lambda\} \rangle}{\langle \{\lambda\} | \{\lambda\} \rangle \prod_{j=1}^m \Lambda_0(\xi_j)}. \quad (2.62)$$

### 2.5.2. Dichtematrix

Die Dichtematrix wird benutzt, um ein Untersystem als Teil des übergeordneten Systems zu beschreiben. Dies erreicht man prinzipiell, indem man aus dem normierten statistischen

Operator die unerwünschten Freiheitsgrade des übergeordneten Systems herausspürt. Sei nun

$$\rho_L = \frac{e^{-H/T}}{\text{tr} e^{-H/T}} \quad (2.63)$$

der statistische Operator einer Heisenberg-Kette der Länge  $L > m$ . Die Dichtematrix eines Untersystems der Länge  $m$  ist dann definiert über

$$D_L(T, H) = \text{tr}_{m+1\dots L} \rho_L. \quad (2.64)$$

### Endliche Temperatur im thermodynamischen Limes

Der Erwartungswert eines Operators, welcher nur im Untersystem nichttrivial wirkt, lässt sich dann als

$$\langle A \rangle_{T,h} = \text{tr}_{1\dots L} A \rho_L = \text{tr}_{1\dots m} A_{1\dots m} \text{tr}_{m+1\dots L} \rho_L = \text{tr}_{1\dots m} A_{1\dots m} D_L(T, h) \quad (2.65)$$

schreiben, wobei  $A_{1\dots m}$  die Einschränkung des Operators  $A$  auf die Gitterplätze 1 bis  $m$  ist. Unter Benutzung der kanonischen  $gl(2)$ -Standardbasis folgt dann für die Dichtematrixelemente

$$D_{\beta_1\dots\beta_m}^{\alpha_1\dots\alpha_m}(T, h) = \text{tr}_{1\dots m} e_{1\beta_1}^{\alpha_1} \dots e_{m\beta_m}^{\alpha_m} D(T, h) = \langle e_{1\beta_1}^{\alpha_1} \dots e_{m\beta_m}^{\alpha_m} \rangle_{T,h}. \quad (2.66)$$

Mit den Überlegungen aus Abschnitt 2.5.1 ergibt sich unter Einführung von regularisierenden Inhomogenitäten  $\xi_j$ ,  $j = 1, \dots, m$  im thermodynamischen Limes

$$\langle e_{1\beta_1}^{\alpha_1} \dots e_{m\beta_m}^{\alpha_m} \rangle_{T,h} = \lim_{N \rightarrow \infty} \lim_{\xi_1, \dots, \xi_m \rightarrow 0} D^{(N)}_{\beta_1\dots\beta_m}^{\alpha_1\dots\alpha_m}(\xi_1, \dots, \xi_m). \quad (2.67)$$

Dabei ist

$$D^{(N)}_{\beta_1, \dots, \beta_m}^{\alpha_1, \dots, \alpha_m} = \frac{\langle \{\lambda\} | T_{\beta_1}^{\alpha_1}(\xi_1) \dots T_{\beta_m}^{\alpha_m}(\xi_m) | \{\lambda\} \rangle}{\langle \{\lambda\} | \prod_{j=1}^m t(\xi_j) | \{\lambda\} \rangle} \quad (2.68)$$

der inhomogene, approximierende Ausdruck für die Dichtematrixelemente bei endlicher Trotter-Zahl.

### Endliche Kettenlänge bei $T = 0$

Auf endlichen Ketten bei  $T = 0$  lässt sich die Dichtematrix bis auf eine Verschiebung in den Inhomogenitäten  $\xi$  ganz analog definieren. Sei  $|\psi_0\rangle$  der Grundzustand, so folgt ausgehend von

$$D_{\beta_1\dots\beta_m}^{\alpha_1\dots\alpha_m} = \lim_{T \rightarrow 0^+} D_{\beta_1\dots\beta_m}^{\alpha_1\dots\alpha_m}(T) = \langle \psi_0 | e_{1\beta_1}^{\alpha_1} \dots e_{m\beta_m}^{\alpha_m} | \psi_0 \rangle \quad (2.69)$$

mit  $\lambda = \frac{\eta}{2}$  in (2.22) unter Benutzung von  $L_j(\frac{\eta}{2}) = R_{0j}(0) = P_{0j}$  gemäß [18] und [35]

$$e_{j\beta}^{\alpha} = t^{j-1}(\frac{\eta}{2}) T_{\beta}^{\alpha}(\frac{\eta}{2}) t^{-j}(\frac{\eta}{2}). \quad (2.70)$$

## 2. Grundlagen

---

Damit lässt sich die Dichtematrix auf Ketten endlicher Länge schreiben als

$$D_{L_{\beta_1 \dots \beta_m}}^{\alpha_1 \dots \alpha_m} = \lim_{\xi_1, \dots, \xi_m \rightarrow 0} D_{L_{\beta_1 \dots \beta_m}}^{\alpha_1 \dots \alpha_m}(\xi_1, \dots, \xi_m) \quad (2.71)$$

$$= \frac{\langle \{\lambda\} | \mathcal{T}_{\beta_1}^{\alpha_1}(\frac{\eta}{2}) \dots \mathcal{T}_{\beta_m}^{\alpha_m}(\frac{\eta}{2}) | \{\lambda\} \rangle}{\langle \{\lambda\} | \{\lambda\} \rangle \prod_{j=1}^m \Lambda_0(-\frac{\eta}{2})}. \quad (2.72)$$

Die Verschiebung in den Inhomogenitäten begründet sich in den Modifikationen der Transfermatrix in Abschnitt 2.3.1 (vgl. auch Abschnitt 2.4.4).

**Teil I.**

**Bestimmung von  
Korrelationsfunktionen mit Hilfe von  
Dichtematrixelementen**



## 3. Korrelationsfunktionen auf Ketten endlicher Länge

In diesem Abschnitt wollen wir analog zu [22] eine Integraldarstellung für die Dichtematrixelemente der endlich langen  $XXZ$ -Kette herleiten. Dazu sind einige Vorarbeiten nötig, die es erlauben, die Rechnung aus [27] direkt auf diesen Fall anzuwenden. Die so erreichte Integraldarstellung wird anschließend im  $XXX$ -Limes betrachtet. Dieser ermöglicht eine Faktorisierung der Vielfachintegrale, die numerische Untersuchungen möglich macht.

### 3.1. Hilfsfunktionen und nichtlineare Integralgleichungen

Die Eigenwerte der Transfer- bzw. Quanten-Transfermatrix werden durch die Bethe-Ansatz-Zahlen bestimmt, die ihrerseits durch die Bethe-Ansatz-Gleichungen festgelegt sind. Im allgemeinen Fall für beliebige Anisotropie  $\Delta$  beschreiben diese ein nichtlineares Gleichungssystem, das nur numerisch für kleine Systemgrößen  $L$  lösbar ist.

In diesem Kapitel werden wir mit Hilfe der analytischen Eigenschaften der Bethe-Ansatz-Gleichungen im gewöhnlichen Transfermatrixzugang Hilfsfunktionen herleiten, die es einerseits ermöglichen, die explizit auftauchenden Bethe-Ansatz-Zahlen zu eliminieren und andererseits durch Integralgleichungen darzustellen. Diese Integraldarstellungen lassen sich wieder auf unterschiedliche Weisen formulieren, je nach dem ob man daran interessiert ist, diese numerisch zu lösen oder für weitere theoretische Rechnungen zu gebrauchen.

Im folgenden Kapitel werden wir zunächst in Anlehnung an [39] für die endliche  $XXZ$ -Kette bei  $T = 0$  numerisch handhabbare Integralgleichungen herleiten (die Formulierung in  $\mathfrak{b}$ ,  $\bar{\mathfrak{b}}$ ) und daraufhin die für theoretische Rechnungen nützlichere Formulierung in den Hilfsfunktionen  $\mathfrak{a}$  und  $\bar{\mathfrak{a}}$  einführen.

#### 3.1.1. $XXZ$ -Kette bei endlicher Länge und $T = 0$

Ausgehend von den Bethe-Ansatz-Gleichungen (2.52) nehmen wir  $L/2$  als gerade an und beschränken uns mit  $\eta = i\gamma$ ,  $\gamma \in [0, \frac{\pi}{2}]$  auf das kritische antiferromagnetische Regime  $J > 0$ ,  $-1 < \Delta \leq 1$ . Dann hat der antiferromagnetische Grundzustand gerade  $M = L/2$  viele Bethe-Ansatz-Zahlen. Für diese festgelegte Menge definieren wir

$$q(\lambda) := \prod_{j=1}^{L/2} \text{sh}(\lambda - \lambda_j), \quad (3.1)$$

$$\Phi(\lambda) := \text{sh}^L(\lambda). \quad (3.2)$$

Damit können wir die Bethe-Ansatz-Gleichungen schreiben als  $\mathbf{a}(\lambda) = -1$  mit

$$\mathbf{a}(\lambda) := \frac{1}{\omega^2} \frac{\Phi(\lambda - \frac{\eta}{2})q(\lambda + \eta)}{\Phi(\lambda + \frac{\eta}{2})q(\lambda - \eta)}, \quad (3.3)$$

und der Eigenwert ist

$$\Lambda(\lambda) = \omega \Phi(\lambda + \frac{\eta}{2})q(\lambda - \eta) \frac{1 + \mathbf{a}(\lambda)}{q(\lambda)}. \quad (3.4)$$

Aus den obigen Definitionen folgt, dass  $\Phi(\lambda)$  und  $q(\lambda)$  in bestimmten Streifen der komplexen Ebene analytisch und ungleich Null (ANZ, analytic, non-zero) sind. Es gilt

$$\Phi \text{ ANZ in } 0 < \text{Im } \lambda < \pi, \quad (3.5)$$

$$q \text{ ANZ in } -\pi < \text{Im } \lambda < 0. \quad (3.6)$$

Wir definieren nun die Funktionen

$$f(x) := \coth^L \left( \frac{\pi x}{2\gamma} \right), \quad (3.7)$$

$$b(\lambda) := \frac{\coth^L(\frac{\pi\lambda}{2\gamma})}{\mathbf{a}(\lambda - \frac{i\gamma}{2})} = \frac{\omega^2 \coth^L(\frac{\pi\lambda}{2\gamma}) \Phi(\lambda) q(\lambda - \frac{3i\gamma}{2})}{\Phi(\lambda - i\gamma + i\pi) q(\lambda + \frac{i\gamma}{2} - i\pi)}, \quad (3.8)$$

$$\bar{b}(\lambda) := \coth^L \left( \frac{\pi\lambda}{2\gamma} \right) \mathbf{a} \left( \lambda + \frac{i\gamma}{2} \right), \quad (3.9)$$

für die

$$b(\lambda) \text{ ANZ in } 0 < \text{Im } \lambda < \gamma \quad (0 < \gamma < \frac{\pi}{2}), \quad (3.10)$$

$$\bar{b}(\lambda) \text{ ANZ in } -\gamma < \text{Im } \lambda < 0 \quad (3.11)$$

gilt. Für diese Funktionen existieren in den angegebenen ANZ-Streifen, bzw. im Streifen  $0 < \text{Im } \lambda < \gamma$  für  $f(x)$ , die Fourier-Transformierten der zweiten logarithmischen Ableitungen. Wir schreiben die Fourier-Transformierte der zweiten logarithmischen Ableitung einer Funktion  $g(x)$  als  $\mathfrak{F}_k''[\ln g(x)]$  und erhalten für die obigen drei Gleichungen

$$\mathfrak{F}_k''[\ln f] = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-i(x+i\varepsilon)} \partial_x^2 f(x+i\varepsilon) = -\frac{kL}{1+e^{-\gamma k}}, \quad (3.12)$$

$$\mathfrak{F}_k''[\ln b] = \mathfrak{F}_k''[\ln f] + (1 - e^{(\gamma-\pi)k}) \mathfrak{F}_k''[\ln \Phi] + (e^{\frac{3\gamma}{2}k} - e^{(\pi-\frac{\gamma}{2})k}) \mathfrak{F}_k''[\ln q], \quad (3.13)$$

$$\mathfrak{F}_k''[\ln \bar{b}] = e^{-2\gamma k} \mathfrak{F}_k''[\ln f] + (e^{-\pi k} - e^{-\gamma k}) \mathfrak{F}_k''[\ln \Phi] + (e^{(\pi-\frac{3}{2}\gamma k)} - e^{\frac{\gamma}{2}k}) \mathfrak{F}_k''[\ln q]. \quad (3.14)$$

Ziel ist jetzt,  $\mathfrak{F}_k''[\ln q]$  aus (3.13, 3.14) zu eliminieren und nur durch von  $b$  und  $\bar{b}$  abhängige Größen zu ersetzen. Dazu definieren wir neue Hilfsfunktionen  $\mathfrak{b}$ ,  $\bar{\mathfrak{b}}$  und  $h(\lambda)$  über

$$\mathfrak{b}(\lambda) = b(\lambda) \tanh^L \left( \frac{\pi\lambda}{2\gamma} \right) \quad (3.15)$$

$$\bar{\mathfrak{b}}(\lambda) = \bar{b}(\lambda) \tanh^L \left( \frac{\pi\lambda}{2\gamma} \right) \quad (3.16)$$

$$h(\lambda) = \frac{\Lambda(\lambda)}{\omega\Phi(\lambda + \frac{i\gamma}{2})q(\lambda - i\gamma)} = \frac{1 + \mathfrak{a}(\lambda)}{q(\lambda)}. \quad (3.17)$$

Zwischen den Hilfsfunktionen  $\mathfrak{a}$ ,  $\bar{\mathfrak{a}}$  und  $\mathfrak{b}$ ,  $\bar{\mathfrak{b}}$  gelten dann die folgenden Beziehungen:

$$\mathfrak{b}(\lambda) = \frac{1}{\mathfrak{a}(\lambda - \frac{i\gamma}{2})} = \bar{\mathfrak{a}}(\lambda - \frac{i\gamma}{2}) \quad (3.18)$$

$$\bar{\mathfrak{b}}(\lambda) = \mathfrak{a}(\lambda + \frac{i\gamma}{2}) = \frac{1}{\bar{\mathfrak{a}}(\lambda + \frac{i\gamma}{2})}. \quad (3.19)$$

Unter der Annahme, dass  $\Lambda(\lambda)$  ANZ im Streifen  $-\frac{\gamma}{2} < \text{Im } \lambda \leq \frac{\gamma}{2}$  ist, ist auch  $h(\lambda)$  ANZ in diesem Streifen. Für die Funktionen  $\mathfrak{b}$  und  $\bar{\mathfrak{b}}$  gelten die folgenden ANZ-Bereiche (die reelle Achse teilweise eingeschlossen):

$$1 + \bar{\mathfrak{b}}(\lambda) = 1 + \mathfrak{a}(\lambda + \frac{i\gamma}{2}) = q(\lambda + \frac{i\gamma}{2} - i\pi)h(\lambda + \frac{i\gamma}{2}), \quad \text{ANZ in } -\frac{\gamma}{2} < \text{Im } \lambda \leq 0, \quad (3.20)$$

$$1 + \frac{1}{\mathfrak{b}(\lambda)} = 1 + \mathfrak{a}(\lambda - \frac{i\gamma}{2}) = q(\lambda - \frac{i\gamma}{2})h(\lambda + \frac{i\gamma}{2}), \quad \text{ANZ in } 0 < \text{Im } \lambda < \frac{\gamma}{2}, \quad (3.21)$$

$$1 + \mathfrak{b}(\lambda) = \tanh^L \left( \frac{\pi\lambda}{2\gamma} \right) b(\lambda)q(\lambda - \frac{i\gamma}{2})h(\lambda - \frac{i\gamma}{2}), \quad \text{ANZ in } 0 < \text{Im } \lambda < \frac{\gamma}{2}, \quad (3.22)$$

$$1 + \frac{1}{\bar{\mathfrak{b}}(\lambda)} = \coth^L \left( \frac{\pi\lambda}{2\gamma} \right) \frac{q(\lambda + \frac{i\gamma}{2} - i\pi)h(\lambda + \frac{i\gamma}{2})}{\bar{b}(\lambda)}, \quad \text{ANZ in } -\frac{\gamma}{2} < \text{Im } \lambda \leq 0. \quad (3.23)$$

Dabei wurde benutzt, dass  $q(\lambda - i\pi) = q(\lambda)$  für  $L/2$  gerade gilt. Da  $\mathfrak{a}(\lambda)$  für  $\text{Re } \lambda \rightarrow \pm\infty$  eine konstante Asymptotik mit exponentiell abfallenden Korrekturen aufweist, kann man aus den obigen ANZ-Relationen schließen, dass die Fourier-Transformierten der zweiten logarithmischen Ableitung der Funktionen  $1 + 1/\mathfrak{b}$ ,  $1 + 1/\bar{\mathfrak{b}}$ ,  $1 + \mathfrak{b}$  und  $1 + \bar{\mathfrak{b}}$  existieren. Man erhält damit in den entsprechenden ANZ-Bereichen die folgenden Fourier-Transformierten:

$$\mathfrak{F}_k''[\ln(1 + \bar{\mathfrak{b}})] = e^{(\pi - \frac{\gamma}{2})k} \mathfrak{F}_k''[\ln q] + e^{-\frac{\gamma}{2}k} \mathfrak{F}_k''[\ln h], \quad (3.24)$$

$$\mathfrak{F}_k''[\ln(1 + \frac{1}{\mathfrak{b}})] = e^{\frac{\gamma}{2}k} \mathfrak{F}_k''[\ln q] + e^{\frac{\gamma}{2}k} \mathfrak{F}_k''[\ln h], \quad (3.25)$$

$$\mathfrak{F}_k''[\ln(1 + \mathfrak{b})] = -\mathfrak{F}_k''[\ln f] + \mathfrak{F}_k''[\ln b] + e^{\frac{\gamma}{2}k} \mathfrak{F}_k''[\ln q] + e^{\frac{\gamma}{2}k} \mathfrak{F}_k''[\ln h], \quad (3.26)$$

$$\mathfrak{F}_k''[\ln(1 + \frac{1}{\bar{\mathfrak{b}}})] = e^{2\gamma k} \mathfrak{F}_k''[\ln f] - \mathfrak{F}_k''[\ln \bar{b}] + e^{(\pi - \frac{\gamma}{2})k} \mathfrak{F}_k''[\ln q] + e^{-\frac{\gamma}{2}k} \mathfrak{F}_k''[\ln h]. \quad (3.27)$$

Mit diesen Gleichungen ist nun der Grundstein für die weiteren Herleitungen der Integralgleichungen für  $\mathfrak{a}$ ,  $\bar{\mathfrak{a}}$ ,  $\mathfrak{b}$  und  $\bar{\mathfrak{b}}$  gelegt.

### Die Formulierung in $\mathfrak{b}$ und $\bar{\mathfrak{b}}$

Zur Herleitung der Integralgleichungen in  $\mathfrak{b}$  und  $\bar{\mathfrak{b}}$  eliminieren wir  $\mathfrak{F}_k''[\ln h]$  mit Hilfe von (3.24) aus (3.26) und lösen nach  $\mathfrak{F}_k''[\ln q]$  auf. Es folgt

$$\mathfrak{F}_k''[\ln q] = \frac{e^{-\frac{\gamma}{2}k}}{1 - e^{\pi k}} \left\{ \mathfrak{F}_k''[\ln f] - \mathfrak{F}_k''[\ln \mathfrak{b}] + \mathfrak{F}_k''[\ln(1 + \mathfrak{b})] - e^{\gamma k} \mathfrak{F}_k''[\ln(1 + \bar{\mathfrak{b}})] \right\}. \quad (3.28)$$

Wenn man dies in die RHS von (3.13) einsetzt, die Fourier-Transformationen mit den Verschiebungen durch die Exponentialfunktionen geschickt zusammenfasst und die inverse Fourier-Transformation unter Beachtung des Faltungssatzes anwendet, erhält man

$$\begin{aligned} \ln(\mathfrak{b}(x + \frac{i\epsilon}{2})) &= \frac{i\pi\Phi}{\pi - \gamma} + L \ln \left[ \tanh \left( \frac{\pi(x + \frac{i\epsilon}{2})}{2\gamma} \right) \right] \\ &\quad + \int_{-\infty}^{\infty} dy F(x - y) \ln(1 + \mathfrak{b}(y + \frac{i\epsilon}{2})) \\ &\quad - \int_{-\infty}^{\infty} dy F(x + \frac{i\epsilon}{2} - i\gamma - (y - \frac{i\epsilon}{2})) \ln(1 + \bar{\mathfrak{b}}(y - \frac{i\epsilon}{2})), \end{aligned} \quad (3.29)$$

$$\begin{aligned} \ln(\bar{\mathfrak{b}}(x - \frac{i\epsilon}{2})) &= -\frac{i\pi\Phi}{\pi - \gamma} + L \ln \left[ \tanh \left( \frac{\pi(x - \frac{i\epsilon}{2})}{2\gamma} \right) \right] \\ &\quad + \int_{-\infty}^{\infty} dy F(x - y) \ln(1 + \bar{\mathfrak{b}}(y - \frac{i\epsilon}{2})) \\ &\quad - \int_{-\infty}^{\infty} dy F(x - \frac{i\epsilon}{2} + i\gamma - (y + \frac{i\epsilon}{2})) \ln(1 + \mathfrak{b}(y + \frac{i\epsilon}{2})). \end{aligned} \quad (3.30)$$

Dabei ist  $F(x)$  über

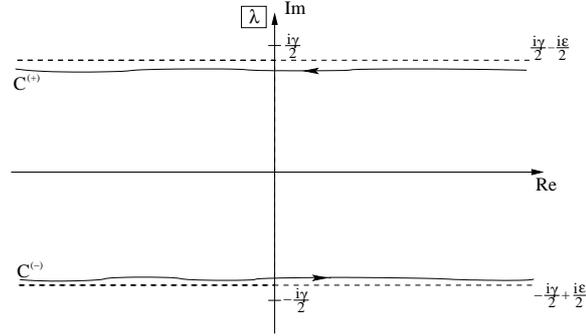
$$\int_{-\infty}^{\infty} dy e^{-iky} F(y) = 2\pi \tilde{F}(k) = \frac{\text{sh}((\frac{\pi}{2} - \gamma)k)}{2\text{ch}(\frac{\gamma}{2}k)\text{sh}(\frac{1}{2}(\pi - \gamma)k)} \quad (3.31)$$

definiert. Für eine detailliertere Darstellung der Rechnung sei auf [39] verwiesen. Im Limes  $\epsilon \rightarrow 0^+$  gehen die Gleichungen (3.29) und (3.30) in die dort bestimmten Gleichungen über.

### Die Formulierung in $\mathfrak{a}$ und $\bar{\mathfrak{a}}$

Setzt man andererseits (3.24) in (3.25) ein, um  $\mathfrak{F}_k''[\ln h]$  zu eliminieren, so ergibt sich

$$\mathfrak{F}_k''[\ln q] = \frac{e^{-\frac{\gamma}{2}k}}{1 - e^{-\pi k}} \left\{ \mathfrak{F}_k''[\ln(1 + \frac{1}{\mathfrak{b}})] - e^{\gamma k} \mathfrak{F}_k''[\ln(1 + \bar{\mathfrak{b}})] \right\}. \quad (3.32)$$


 Abbildung 3.1.: Die Integrationskonturen im kritischen Regime  $|\Delta| < 1$ .

Mit den gleichen Techniken wie im vorhergehenden Abschnitt erhält man hier eine Integralgleichung in  $\mathbf{a}$  mit Integrationswegen, die ebenfalls über die reelle Achse laufen

$$\begin{aligned} \ln(\mathbf{a}(x - \frac{i\gamma}{2} + i\frac{\epsilon}{2})) &= -2i\Phi + iL\gamma - L \ln \left( \frac{\text{sh}(x - \frac{i\epsilon}{2})}{\text{sh}(x + \frac{i\epsilon}{2} - i\gamma)} \right) \\ &- \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dy}{2\pi} K_{i\gamma}(x - \frac{i\gamma}{2} + \frac{i\epsilon}{2} - (y - \frac{i\gamma}{2} + \frac{i\epsilon}{2})) \ln(1 + \mathbf{a}(y - \frac{i\gamma}{2} + \frac{i\epsilon}{2})) \\ &+ \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dy}{2\pi} K_{i\gamma}(x - \frac{i\gamma}{2} + i\frac{\epsilon}{2} - (y + \frac{i\gamma}{2} - \frac{i\epsilon}{2})) \ln(1 + \mathbf{a}(y + \frac{i\gamma}{2} - \frac{i\epsilon}{2})). \end{aligned} \quad (3.33)$$

Dabei ist

$$K_{i\gamma}(\lambda) = \frac{\text{sh}(2i\gamma)}{i \text{sh}(\lambda - i\gamma) \text{sh}(\lambda + i\gamma)}. \quad (3.34)$$

Es ist nun zweckmäßig eine Kontur  $\mathcal{C} = \mathcal{C}^{(+)} + \mathcal{C}^{(-)}$  mit

$$\begin{aligned} \mathcal{C}^{(-)} : \mathbb{R} &\rightarrow \mathbb{C}, & \omega(y) &= y - \frac{i\gamma}{2} + \frac{i\epsilon}{2}, \\ \mathcal{C}^{(+)} : \mathbb{R} &\rightarrow \mathbb{C}, & \omega(y) &= -y + \frac{i\gamma}{2} - \frac{i\epsilon}{2} \end{aligned} \quad (3.35)$$

zu definieren. Dann lässt sich (3.33) für alle  $\lambda \in \mathcal{C}^{(-)}$  umschreiben in

$$\begin{aligned} \ln(\mathbf{a}(\lambda)) &= -2i\Phi + iL\gamma + L \ln \left( \frac{\text{sh}(\lambda - \frac{i\gamma}{2})}{\text{sh}(\lambda + \frac{i\gamma}{2})} \right) \\ &- \int_{\mathcal{C}} \frac{d\omega}{2\pi} K_{i\gamma}(\lambda - \omega) \ln(1 + \mathbf{a}(\omega)). \end{aligned} \quad (3.36)$$

Indem man obige Rechnung ausgehend von (3.32) und (3.14) wiederholt, kann man einfach zeigen, dass (3.36) für alle  $\lambda \in \mathcal{C}$  gilt. Daraus folgt, dass (3.36) die Funktion  $\mathbf{a}(\lambda)$  mittels analytischer Fortsetzung im ganzen Streifen  $-\frac{\gamma}{2} < \text{Im } \lambda < \frac{\gamma}{2}$  bestimmt. Der Limes  $L \rightarrow \infty$  dieser Integralgleichung ist in Anhang A.1 dargestellt.

### 3.2. Integraldarstellung der Eigenwerte

In diesem Kapitel werden wir zeigen, wie sich die Eigenwerte der Transformatrix durch die oben eingeführten Hilfsfunktionen ausdrücken lassen.

Ausgangspunkt ist Gleichung (2.53), die wir mit  $\bar{\mathbf{a}} = 1/\mathbf{a}$  schreiben können als

$$\Lambda(\lambda) = \frac{1}{\omega} \frac{\Phi(\lambda - \frac{i\gamma}{2})q(\lambda + i\gamma)}{q(\lambda)} (1 + \bar{\mathbf{a}}(\lambda)). \quad (3.37)$$

Wir definieren nun

$$r(\lambda) := \frac{q(\lambda + \frac{i\gamma}{2} - i\pi)}{q(\lambda - \frac{i\gamma}{2})}, \quad r(\lambda) \text{ ANZ in } 0 < \text{Im } \lambda < \frac{\gamma}{2}, \quad (3.38)$$

und beachten außerdem, dass  $\mathbf{b}(\lambda) = \bar{\mathbf{a}}(\lambda - \frac{i\gamma}{2})$  gilt. Es folgt

$$\ln \frac{\Lambda(\lambda - \frac{i\gamma}{2})}{\Phi(\lambda - i\gamma)} = -\ln \omega + \ln(1 + \mathbf{b}(\lambda)) + \ln r(\lambda). \quad (3.39)$$

Um die Eigenschaften der komplexen Fourier-Transformation ausnutzen zu können, betrachten wir jetzt  $\mathfrak{F}_k''[\ln r(\lambda)] = \left( e^{(\pi - \frac{\gamma}{2})k} - e^{\frac{\gamma}{2}k} \right) \mathfrak{F}_k''[\ln q]$ . Für  $\mathfrak{F}_k''[\ln q]$  setzen wir (3.28) ein und erhalten nach Vereinfachung des entstehenden Ausdruckes und der Anwendung der inversen Fourier-Transformation

$$\begin{aligned} \partial_x^2 \ln r(x + i\delta) = & \int_{-\infty}^{+\infty} dk e^{ik(x+i\delta)} \left\{ \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dy}{2\pi} e^{-ik(y - \frac{i\gamma}{2} + i\varepsilon)} e^{\frac{\gamma k}{2}} K_{\frac{i\gamma}{2}}(y - \frac{i\gamma}{2} + i\varepsilon) \mathfrak{F}_k''[\ln(1 + \frac{1}{\mathbf{b}})] \right. \\ & \left. - \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dy}{2\pi} e^{-ik(y + \frac{i\gamma}{2} - i\varepsilon)} e^{-\frac{\gamma k}{2}} K_{\frac{i\gamma}{2}}(y + \frac{i\gamma}{2} - i\varepsilon) \mathfrak{F}_k''[\ln(1 + \mathbf{b})] \right\}. \quad (3.40) \end{aligned}$$

Dabei wurde die Verschiebung um  $i\delta$  eingeführt, um  $r(x)$  abseits der reellen Achse zu behandeln. Nun wird die Fourier-Transformation um  $\pm i\varepsilon$  verschoben ausgeführt, um in den ANZ-Bereichen von  $\ln(1 + \mathbf{b})$  und  $\ln(1 + \bar{\mathbf{b}})$  zu bleiben. Nach zweimaliger Integration über  $x$  folgt unter Anwendung des Faltungssatzes

$$\begin{aligned} \ln r(x + i\delta) = & i\frac{L}{2}(\gamma - \pi) + \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dy}{2\pi} K_{\frac{i\gamma}{2}}(x + i\delta - (y + \frac{i\gamma}{2} - i\varepsilon + i\delta)) \ln(1 + \bar{\mathbf{a}}(y - i\varepsilon + \frac{i\gamma}{2} + i\delta)) \\ & - \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dy}{2\pi} K_{\frac{i\gamma}{2}}(x + i\delta - (y - \frac{i\gamma}{2} + i\varepsilon + i\delta)) \ln(1 + \bar{\mathbf{a}}(y + i\varepsilon - \frac{i\gamma}{2} + i\delta)) \\ & + \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dy}{2\pi} K_{\frac{i\gamma}{2}}(x + i\delta - (y - \frac{i\gamma}{2} + i\varepsilon + i\delta)) \ln(\bar{\mathbf{a}}(y + i\varepsilon - \frac{i\gamma}{2} + i\delta)) \\ & - \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dy}{2\pi} K_{\frac{i\gamma}{2}}(x + i\delta - (y + \frac{i\gamma}{2} - i\varepsilon + i\delta)) \ln(\bar{\mathbf{a}}(y - i\varepsilon + \frac{i\gamma}{2} + i\delta)). \quad (3.41) \end{aligned}$$

Die Integrationskonstanten wurden hier aus der Asymptotik von  $\ln r(x + i\delta)$  für große  $x$  bestimmt. Außerdem wurden wieder die Beziehungen zwischen den Hilfsfunktionen  $\mathbf{a}$  und  $\mathbf{b}$  nach (3.19) ausgenutzt.

Wir wollen diese Integrale wie in Kapitel 3.1.1 auf die geschlossene Kontur  $\mathcal{C}$  zurückführen. Dazu müssen zuerst Konturen  $\tilde{\mathcal{C}}^\pm$  definiert werden:

$$\begin{aligned}\tilde{\mathcal{C}}^+ : \mathbb{R} &\rightarrow \mathbb{C} & \omega(t) &= -t + \frac{i\gamma}{2} - i(\varepsilon - \delta), \\ \tilde{\mathcal{C}}^- : \mathbb{R} &\rightarrow \mathbb{C} & \omega(t) &= t - \frac{i\gamma}{2} + i(\varepsilon + \delta).\end{aligned}\tag{3.42}$$

Wenn nun die Konturen  $\tilde{\mathcal{C}}^\pm$  auf die Konturen  $\mathcal{C}^\pm$  verschoben werden sollen, ist zu beachten, dass  $K_{\frac{i\gamma}{2}}(\lambda - \omega)$  als Funktion von  $\omega$  Pole bei  $\omega = \lambda \pm \frac{i\gamma}{2} = x + i\delta \pm \frac{i\gamma}{2}$  aufweist. Unter der Annahme, dass  $\frac{\varepsilon}{2} < \delta < \varepsilon$  gelte, folgt mit

$$\operatorname{res} \left( K_{\frac{i\gamma}{2}}(\lambda - \omega) \right) \Big|_{\omega = \lambda \pm \frac{i\gamma}{2}} = \mp i\tag{3.43}$$

für den eingangs betrachteten Ausdruck (3.39)

$$\begin{aligned}\ln \frac{\Lambda(\lambda - \frac{i\gamma}{2})}{q(\lambda - i\gamma)} &= -\ln \omega + i\frac{L}{2}(\gamma - \pi) + \ln \bar{\mathbf{a}}(\lambda - \frac{i\gamma}{2}) \\ &\quad - \int_{\mathcal{C}} \frac{d\omega}{2\pi} K_{\frac{i\gamma}{2}}(\lambda - \omega) \ln(1 + \bar{\mathbf{a}}(\omega)) \\ &\quad + \int_{\mathcal{C}} \frac{d\omega}{2\pi} K_{\frac{i\gamma}{2}}(\lambda - \omega) \ln(\bar{\mathbf{a}}(\omega)).\end{aligned}\tag{3.44}$$

Für den Term  $\ln \bar{\mathbf{a}}(\lambda - \frac{i\gamma}{2})$  setzen wir die nichtlineare Integralgleichung ein und berechnen die zusätzlich entstehenden Integrale mit Hilfe des Residuensatzes. Als Endergebnis folgt

$$\ln \frac{\Lambda(\lambda - \frac{i\gamma}{2})}{\Phi(\lambda - i\gamma)} = -i\phi + i\frac{L}{2}(\gamma - \pi) - \int_{\mathcal{C}} \frac{d\omega}{2\pi} K_{\frac{i\gamma}{2}}(\lambda - \omega) \ln(1 + \bar{\mathbf{a}}(\omega)).\tag{3.45}$$

Dies gilt wegen der ANZ-Eigenschaften von  $\Lambda(\lambda)$  für  $\frac{\varepsilon}{2} < \operatorname{Im} \lambda < \frac{\gamma}{2}$ . Analog lässt sich der Eigenwert für  $-\frac{\gamma}{2} \leq \operatorname{Im} \lambda \leq \frac{\varepsilon}{2}$  durch  $\mathbf{a}(\lambda)$  ausdrücken,

$$\ln \frac{\Lambda(\lambda + \frac{i\gamma}{2})}{\Phi(\lambda + i\gamma)} = i\phi + i\frac{L}{2}(\pi - \gamma) + \int_{\mathcal{C}} \frac{d\omega}{2\pi} K_{\frac{i\gamma}{2}}(\lambda - \omega) \ln(1 + \mathbf{a}(\omega)).\tag{3.46}$$

Außerdem gilt analog zu [39] für  $\operatorname{Im} \lambda < 0$

$$\begin{aligned}\ln \frac{\Lambda(\lambda + \frac{i\gamma}{2})}{\Phi(\lambda + i\gamma)} &= i\frac{L}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk}{k} \frac{\operatorname{sh}(\frac{1}{2}(\pi - \gamma)k) \sin(k\lambda)}{\operatorname{ch}(\frac{\gamma k}{2}) \operatorname{sh}(\frac{\pi k}{2})} \\ &\quad + \int_{\mathcal{C}^+} \frac{d\omega}{2\gamma i} \frac{\ln[(1 + \mathbf{b}(\omega))(1 + \bar{\mathbf{b}}(\omega))]}{\operatorname{sh}(\frac{\pi}{\gamma}(\lambda - \omega))}.\end{aligned}\tag{3.47}$$

### 3.3. Skalarprodukte und die Dichte-Funktion $G$

Das übergeordnete Ziel ist immer noch die Herleitung einer Integraldarstellung von Dichtematrixelementen der Form (2.72). Zur Bestimmung der Skalarprodukte benötigen wir zuerst die Skalarproduktformel nach [55]. Auf diese aufbauend können wir dann analog zu [23] für Ketten endlicher Länge eine Dichte-Funktion einführen, die die Behandlung der auftauchenden Determinanten maßgeblich vereinfacht.

#### 3.3.1. Slavnov-Formel

Ausgangspunkt für die Herleitung der Dichte-Funktion ist

**Lemma 1.** [55] *Sei  $\{\lambda_j\}_{j=1}^M$  eine Lösung der Bethe-Ansatz-Gleichungen und sei  $\{\mu_k\}_{k=1}^M$  eine beliebige Menge paarweise verschiedener komplexer Zahlen. Dann gilt*

$$\begin{aligned} \langle 0|C(\mu_1)\dots C(\mu_M)B(\lambda_1)\dots B(\lambda_M)|0\rangle = \\ \frac{\left[\prod_{j=1}^M d(\lambda_j)a(\mu_j)\right] \prod_{j,k=1}^M \text{sh}(\lambda_j - \mu_k + \eta)}{\prod_{1\leq j<k\leq M} \text{sh}(\lambda_j - \lambda_k)\text{sh}(\mu_k - \mu_j)} \det \hat{N}(\lambda_j, \mu_k) \end{aligned} \quad (3.48)$$

mit

$$\hat{N}(\lambda_j, \mu_k) = t(\lambda_j, \mu_k) - t(\mu_k, \lambda_j) \frac{d(\mu_k)}{a(\mu_k)} \prod_{\ell=1}^M \frac{f(\mu_k, \lambda_\ell)}{f(\lambda_\ell, \mu_k)}, \quad (3.49)$$

wobei

$$t(\lambda, \mu) = \frac{\text{sh}(\eta)}{\text{sh}(\lambda - \mu)\text{sh}(\lambda - \mu + \eta)} \quad , \quad f(\lambda, \mu) = \frac{1}{b(\lambda, \mu)} = \frac{\text{sh}(\lambda - \mu + \eta)}{\text{sh}(\lambda - \mu)} \quad (3.50)$$

gelten.

Da die Determinantenformel und die Kombination mit der Hilfsfunktion [23] unabhängig von der Darstellung sind, gilt auch hier

$$\lim_{\mu_k \rightarrow \lambda_k} \hat{N}(\lambda_j, \mu_k) = \delta_k^j \frac{a'(\lambda_k)}{a(\lambda_k)} + \frac{\text{sh}(2\eta)}{\text{sh}(\lambda_j - \lambda_k + \eta)\text{sh}(\lambda_j - \lambda_k - \eta)}. \quad (3.51)$$

#### 3.3.2. Die Dichte-Funktion $G$

Die Menge  $\{\mu\}$  der Argumente der linksseitigen Bethe-Vektoren ist im folgenden

$$\{\mu_j\}_{j=1}^M = \{\xi_j^+ + \frac{i\gamma}{2}\} \cup \{\lambda_j^-\}. \quad (3.52)$$

wenn die Bethe-Wurzeln bzw. Inhomogenitäten die disjunkten Vereinigungen von Partitionen  $\{\lambda\} = \{\lambda^+\} \cup \{\lambda^-\}$  bzw.  $\{\xi\} = \{\xi^+\} \cup \{\xi^-\}$  mit Kardinalzahlen  $|\alpha^\pm|$ ,  $|\xi^\pm|$  sind.

Wir führen dann die folgende Notation ein:

$$\tilde{\lambda}_j = \begin{cases} \lambda_j^+ & j = 1, \dots, |\alpha^+| = n \\ \lambda_{j-|\xi^+|}^- & j = |\alpha^+| + 1, \dots, M \end{cases} \quad (3.53)$$

$$\tilde{\xi}_j + \frac{i\gamma}{2} = \xi_j^+ + \frac{i\gamma}{2}, \quad j = 1, \dots, |\xi^+| = n. \quad (3.54)$$

In voller Analogie zu [23] folgt

$$N_{nk}^j = \begin{cases} t(\tilde{\lambda}_j, \tilde{\xi}_k) - t(\tilde{\xi}_k, \tilde{\lambda}_j) \mathbf{a}(\tilde{\xi}_k) & k = 1, \dots, n \\ \delta_k^j \frac{\mathbf{a}'(\tilde{\lambda}_k)}{\mathbf{a}(\tilde{\lambda}_k)} + \frac{\text{sh}(2\eta)}{\text{sh}(\tilde{\lambda}_j - \tilde{\lambda}_k + \eta) \text{sh}(\tilde{\lambda}_j - \tilde{\lambda}_k - \eta)} & k = n + 1, \dots, N/2 \end{cases} \quad (3.55)$$

und somit

**Lemma 2.** [23] *Der Quotient zweier Determinanten  $\det N_n$  und  $\det N_0$  ist proportional zur Determinante einer  $n \times n$ -Matrix*

$$\frac{\det N_n}{\det N_0} = \left[ \prod_{\ell=1}^n \frac{1 + \mathbf{a}(\xi_\ell^+ + \frac{i\gamma}{2})}{\mathbf{a}'(\lambda_\ell^+)} \right] \left[ \det G(\lambda_j^+, \xi_k^+ + \frac{i\gamma}{2}) \right]_{j,k=1 \dots n}. \quad (3.56)$$

Die Funktion  $G(\lambda, \xi)$  ist dabei über die lineare Integralgleichung

$$G(\lambda, \xi + \frac{i\gamma}{2}) = t(\xi + \frac{i\gamma}{2}, \lambda) + \int_{\mathcal{C}} \frac{d\omega}{2\pi i} \frac{\text{sh}(2i\gamma)}{\text{sh}(\lambda - \omega - i\gamma) \text{sh}(\lambda - \omega + i\gamma)} \frac{G(\omega, \xi + \frac{i\gamma}{2})}{1 + \mathbf{a}(\omega)} \quad (3.57)$$

auf der Kontur  $\mathcal{C}$  definiert, und sowohl  $\xi$  als auch  $\xi + \frac{i\gamma}{2}$  liegen innerhalb dieser Kontur.

Für Skalarprodukte der Form, wie sie bei den Dichtematrixelementen auftreten, erhalten wir auf dieser Grundlage

$$\begin{aligned} & \frac{\langle \{\xi^+ + \frac{i\gamma}{2}\} \cup \{\lambda^-\} | \{\lambda\} \rangle}{\langle \{\lambda\} | \{\lambda\} \rangle} = \\ & \times \left[ \prod_{j=1}^{|\xi^+|} \frac{\mathbf{a}(\xi_j^+ + \frac{i\gamma}{2})}{\mathbf{a}(\lambda_j^+)} \frac{1 + \mathbf{a}(\xi_j^+ + \frac{i\gamma}{2})}{\mathbf{a}'(\lambda_j^+)} \right] \left[ \prod_{1 \leq j < k \leq |\xi^+|} \frac{\text{sh}(\lambda_k^+ - \lambda_j^+)}{\text{sh}(\xi_k^+ - \xi_j^+)} \right] \\ & \times \left[ \prod_{j=1}^{|\lambda^-|} \prod_{k=1}^{|\xi^+|} \frac{b(\lambda_j^-, \lambda_k^+)}{b(\lambda_j^-, \xi_k^+ + \frac{i\gamma}{2})} \right] \left[ \prod_{j=1}^{|\lambda^+|} \prod_{k=1}^{|\xi^+|} \frac{\text{sh}(\lambda_j^+ - \xi_k^+ + \frac{i\gamma}{2})}{\text{sh}(\lambda_j^+ - \lambda_k^+ + i\gamma)} \right] \det G(\lambda_j^+, \xi_k^+ + \frac{i\gamma}{2}). \end{aligned} \quad (3.58)$$

Diese Gleichung ist somit einer der Ausgangspunkte zur Herleitung der Integraldarstellung der Dichtematrixelemente.

### Darstellung von $G$ durch $\bar{\mathbf{a}}$

Mit der Relation

$$\frac{1}{1 + \mathbf{a}(\omega)} = 1 - \frac{1}{1 + \bar{\mathbf{a}}(\omega)} \quad (3.59)$$

lässt sich unter Anwendung des Residuensatzes  $G(\lambda, \xi + \frac{i\gamma}{2})$  auch durch  $\bar{\mathbf{a}}$  ausdrücken. Es ist

$$G(\lambda, \xi + \frac{i\gamma}{2}) = -iK_{\frac{i\gamma}{2}}(\lambda - \xi) - \int_{\mathcal{C}} \frac{d\omega}{2\pi i} K_{i\gamma}(\lambda - \omega) \frac{G(\omega, \xi + \frac{i\gamma}{2})}{1 + \bar{\mathbf{a}}(\omega)}. \quad (3.60)$$

Dabei ist zu beachten, dass die Gleichungen (3.57) und (3.60) dieselbe Struktur haben, wie die in [23] hergeleiteten Ausdrücke. Unterschiede bestehen lediglich in der vorher nicht

notwendigen Verschiebung der Inhomogenitäten um  $+\frac{i\gamma}{2}$ . Es dabei wichtig zu beachten, dass auch die verschobenen Inhomogenitäten noch innerhalb der Kontur liegen. Nur dann gilt diese Rechnung.

### Darstellung von $G$ in $\mathfrak{b}$ und $\bar{\mathfrak{b}}$

Die Funktion  $G(\lambda, \xi + \frac{i\gamma}{2})$  lässt sich auch durch die Hilfsfunktionen  $\mathfrak{b}$  und  $\bar{\mathfrak{b}}$  darstellen. Zu diesem Zweck zerlegt man die Kontur  $\mathcal{C}$  wieder in Teilkonturen, die parallel zur reellen Achse verlaufen. Diese Konturen werden dann auf die reelle Achse verschoben, und mit Hilfe der Relationen zwischen den Hilfsfunktionen  $\mathfrak{a}$ ,  $\bar{\mathfrak{a}}$ ,  $\mathfrak{b}$  und  $\bar{\mathfrak{b}}$  nach (3.19) erhält man mit  $\tilde{\xi} = \xi + \frac{i\gamma}{2}$  zwei definierende Gleichungen. Zum einen ergibt sich eine Integralgleichung für  $g_{\xi}^{(+)}(x) := G(x + \frac{i\gamma}{2}, \xi)$  :

$$\begin{aligned} g_{\xi}^{(+)}(x) &= iK_{i\gamma}(\tilde{\xi} - x) - \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} K_{i\gamma}(x - \omega + \frac{i\epsilon}{2}) g_{\xi}^{(+)}(\omega - \frac{i\epsilon}{2}) \\ &\quad + \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} K_{i\gamma}(x - \omega + \frac{i\epsilon}{2}) \frac{g_{\xi}^{(+)}(\omega - \frac{i\epsilon}{2})}{1 + \bar{\mathfrak{b}}^{-1}(\omega - \frac{i\epsilon}{2})} \\ &\quad - \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} K_{i\gamma}(x - \omega + i\gamma - \frac{i\epsilon}{2}) \frac{g_{\xi}^{(-)}(\omega + \frac{i\epsilon}{2})}{1 + \mathfrak{b}^{-1}(\omega + \frac{i\epsilon}{2})}. \end{aligned} \quad (3.61)$$

Zum anderen folgt eine Integralgleichung für  $g_{\xi}^{(-)}(x) := -G(x - \frac{i\gamma}{2}, \xi)$  :

$$\begin{aligned} -g_{\xi}^{(-)}(x) &= -iK_{i\gamma}(\tilde{\xi} - x) + \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} K_{i\gamma}(x - \omega + \frac{i\epsilon}{2}) g_{\xi}^{(-)}(\omega - \frac{i\epsilon}{2}) \\ &\quad - \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} K_{i\gamma}(x - \omega + \frac{i\epsilon}{2}) \frac{g_{\xi}^{(-)}(\omega - \frac{i\epsilon}{2})}{1 + \mathfrak{b}^{-1}(\omega - \frac{i\epsilon}{2})} \\ &\quad + \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} K_{i\gamma}(x - \omega - i\gamma - \frac{i\epsilon}{2}) \frac{g_{\xi}^{(+)}(\omega + \frac{i\epsilon}{2})}{1 + \bar{\mathfrak{b}}^{-1}(\omega + \frac{i\epsilon}{2})}. \end{aligned} \quad (3.62)$$

Dabei liegt  $x$  im Streifen  $-i\gamma < x < 0$ . Die Vereinfachung der letzten beiden Gleichungen durch Fourier-Transformation und Ausnutzung des Faltungssatzes wurde in [15] geleistet (vgl. dort Glgn. (14a),(14b),(21),(22)). Die Verbindung zwischen der Dichtefunktion  $G$  und den Eigenwerten wird in Anhang A.2 kurz diskutiert.

## 3.4. Integraldarstellung der Dichtematrixelemente

In diesem Kapitel werden wir mit der allgemeinen Linkswirkung von Monodromiematrixelementen auf Bethe-Zustände die letzte Vorbereitung zur Formulierung der Integraldarstellung der Dichtematrixelemente angeben. Daran anschließend beginnt die Betrachtung dieser Integraldarstellung.

### 3.4.1. Allgemeine Linkswirkung

Um Dichtematrixelemente der Form (2.72)

$$D_{L_{\beta_1 \dots \beta_m}}^{\alpha_1 \dots \alpha_m}(\xi_1, \dots, \xi_m) = \frac{\langle \{\lambda\} | \mathcal{T}_{\beta_1}^{\alpha_1}(\tilde{\xi}_1) \dots \mathcal{T}_{\beta_m}^{\alpha_m}(\tilde{\xi}_m) | \{\lambda\} \rangle}{\langle \{\lambda\} | \{\lambda\} \rangle \prod_{j=1}^m \Lambda_0(\tilde{\xi}_j - i\gamma)} \quad (3.63)$$

zu bestimmen, ist es notwendig zu wissen, wie beliebige Einträge der Monodromiematrix auf Bethe-Zustände wirken. Dies wurde bereits in [24] und [27] untersucht und wir zitieren das folgende

**Lemma 3.** [27] *Für die Linkswirkung von Monodromiematrixelementen auf einen allgemeinen Zustand gilt für paarweise verschiedene  $\lambda_1, \dots, \lambda_M \in \mathbb{C}$ :*

$$\begin{aligned} \langle 0 | \left[ \prod_{k=1}^M C(\lambda_k) \right] T_{\beta_1}^{\alpha_1}(\lambda_{M+1}) \dots T_{\beta_m}^{\alpha_m}(\lambda_{M+m}) = & \\ & \sum_{\substack{\ell_1, \dots, \ell_m=1 \\ \ell_j \neq \ell_k \forall j \neq k}}^{M+m} (-\text{sh}(\eta))^{|\ell^+|} \left[ \prod_{j=|\alpha^+|+1}^m \mathbf{a}(\lambda_{\ell_j}) \right] \left[ \prod_{j=1}^m a(\lambda_{\ell_j}) \prod_{\substack{k=1 \\ k \neq \ell_j}}^M \frac{1}{b(\lambda_k, \lambda_{\ell_j})} \right] \\ & \times \left[ \prod_{j=1}^m \prod_{\substack{k=1 \\ k+M \neq \ell_j}}^m \frac{1}{\text{sh}(\lambda_{\ell_j} - \tilde{\xi}_k)} \right] \left[ \prod_{1 \leq j < k \leq m} b(\lambda_{\ell_j}, \lambda_{\ell_k}) \right] \\ & \times \left[ \prod_{j=1}^{|\alpha^+|} \prod_{k=1}^{\tilde{\alpha}_j^+ - 1} \text{sh}(\lambda_{\ell_j} - \tilde{\xi}_k - \eta) \prod_{k=\tilde{\alpha}_j^+ + 1}^m \text{sh}(\lambda_{\ell_j} - \tilde{\xi}_k) \right] \\ & \times \left[ \prod_{j=1+|\alpha^+|}^m \prod_{k=1}^{\tilde{\beta}_j^- - 1} \text{sh}(\lambda_{\ell_j} - \tilde{\xi}_k + \eta) \prod_{k=\tilde{\beta}_j^- + 1}^m \text{sh}(\lambda_{\ell_j} - \tilde{\xi}_k) \right] \langle 0 | \prod_{\substack{k=1 \\ k \neq \ell_1, \dots, \ell_m}}^{M+m} C(\lambda_k). \end{aligned} \quad (3.64)$$

Hier wird die Konvention genutzt, dass die  $\lambda_j$  mit  $j = 1, \dots, M$  die Bethe-Ansatzzahlen sind und weiterhin die  $\lambda_j$  mit  $j = M+1, \dots, M+m$  den Inhomogenitäten  $\tilde{\xi}_j$  entsprechen, sodass  $\lambda_{M+k} = \tilde{\xi}_k$  gilt. Zudem wurde  $|\ell^+| = \text{card}(\{\lambda_j\}_{j=1}^M \cap \{\lambda_{\ell_j}\}_{j=1}^M)$  benutzt.

Im obigen Lemma werden die Indexmengen  $\{\alpha^\pm\}$ ,  $\{\tilde{\alpha}^\pm\}$  sowie  $\{\beta^\pm\}$ ,  $\{\tilde{\beta}^\pm\}$  benutzt. Diese werden gemäß [27] definiert: Die  $\alpha_j$ , die den Wert 1 einnehmen, werden mit  $\alpha_1^+, \dots, \alpha_{|\alpha^+|}^+$  durchnummeriert. Genauso werden die  $\beta_j$  mit Wert 2 durch  $\beta_1^-, \dots, \beta_{|\beta^-|}^-$  gezählt. Die Erhaltung des Gesamtspins  $|\alpha^+| + |\beta^-| = m$  gilt<sup>1</sup> und bedingt  $|\beta^-| = m - |\alpha^+|$ . Weiterhin

<sup>1</sup>Es muss genauso viele Operatoren  $C$  wie  $B$  geben, d.h.  $\sum_{j=1}^m \alpha_j = \sum_{j=1}^m \beta_j \Leftrightarrow |\alpha^+| + 2|\alpha^-| = |\beta^+| + 2|\beta^-|$  und außerdem  $|\alpha^+| + |\alpha^-| = |\beta^+| + |\beta^-| = m$  und damit  $|\alpha^+| + |\beta^-| = m$ .  $|\alpha^-|$  bezeichnet dabei die Anzahl der Zweien in  $\{\alpha_j\}$  und analog dazu  $|\beta^+|$  die Anzahl der Einsen in  $\{\beta_j\}$ .

zählen die  $\tilde{\alpha}_j^+$  für  $j = 1, \dots, |\alpha^+|$  die  $\alpha_j^+$  in absteigender Reihenfolge durch, und die  $\tilde{\beta}_j^-$  zählen für  $j = |\alpha^+| + 1, \dots, m$  die  $\beta_{j-|\alpha^+|}^-$  ansteigend durch:

$$\tilde{\alpha}_j^+ = \alpha_{|\alpha^+|-j+1}^+ \quad , \quad j = 1, \dots, |\alpha^+|, \quad (3.65)$$

$$\tilde{\beta}_j^- = \beta_{j-|\alpha^+|}^- \quad , \quad j = |\alpha^+| + 1, \dots, m \quad . \quad (3.66)$$

Ein Beispiel für die Notation liefert [24].

### 3.4.2. Integraldarstellung

Wir haben nun alle Grundlagen geschaffen, um für (3.63) eine Vielfachintegraldarstellung anzugeben. Die eigentliche Rechnung verläuft analog zu [27], da der algebraische Teil identisch ist. Lediglich die Hilfsfunktionen und die zugehörigen Konturen sind anders definiert (vgl. Kapitel 3.1.1), da die Grundzustandserwartungswerte  $a(\lambda)$  und  $d(\lambda)$  und das zugehörige Vakuum anders gewählt wurden. Außerdem muss die Verschiebung um  $+\frac{i\gamma}{2}$  in den Inhomogenitäten, die aus den Modifikationen in Kapitel 2.3.1 folgen, beachtet werden.

Ansonsten lassen sich analog zu [27] und [22] die Dichtematrixelemente mit Hilfe der allgemeinen Linkswirkung (3.64) der Monodromiematrixelemente ausrechnen. Anschließend werden die Skalarprodukte mit Hilfe der Slavnov-Formel (3.48) bestimmt. Die entstehenden Ausdrücke können dann, wie in [27] ausführlich beschrieben, aufsummiert werden und wir erhalten das folgende

**Theorem 1.** [16] *Für die Dichtematrixelemente der Spin- $\frac{1}{2}$ -XXZ-Heisenbergkette der Länge  $L$  bei  $T = 0$  gilt die Integraldarstellung*

$$\begin{aligned} D_{L_{\beta_1 \dots \beta_m}^{\alpha_1 \dots \alpha_m}}(\xi_1, \dots, \xi_m) &= D_{L_{\tilde{\beta}_1 \dots \tilde{\beta}_m}^{\tilde{\alpha}_1 \dots \tilde{\alpha}_m}}(\tilde{\xi}_1 - \frac{i\gamma}{2}, \dots, \tilde{\xi}_m - \frac{i\gamma}{2}) \\ &= \left[ \prod_{j=1}^{|\alpha^+|} \int_{\mathcal{C}} \frac{d\omega_j}{2\pi i} \frac{1}{1 + \mathbf{a}(\omega_j)} \right] \left[ \prod_{j=|\alpha^+|-1}^m \int_{\mathcal{C}} \frac{d\omega_j}{2\pi i} \frac{1}{1 + \bar{\mathbf{a}}(\omega_j)} \right] \\ &\times \left[ \prod_{j=1}^{|\alpha^+|} \prod_{k=1}^{\tilde{\alpha}_j^+ + 1} \text{sh}(\omega_j - \xi_k - \frac{3i\gamma}{2}) \prod_{k=\tilde{\alpha}_j^+ + 1}^m \text{sh}(\omega_j - \xi_k - \frac{i\gamma}{2}) \right] \\ &\times \left[ \prod_{j=|\alpha^+|+1}^m \prod_{k=1}^{\tilde{\beta}_j^- + 1} \text{sh}(\omega_j - \xi_k + \frac{i\gamma}{2}) \prod_{k=\tilde{\beta}_j^- + 1}^m \text{sh}(\omega_j - \xi_k - \frac{i\gamma}{2}) \right] \\ &\times \frac{\det[-G(\omega_j, \tilde{\xi}_k)]_{j,k=1, \dots, n}}{\prod_{1 \leq j < k \leq m} \text{sh}(\xi_k - \xi_j) \text{sh}(\omega_j - \omega_k - i\gamma)}. \end{aligned} \quad (3.67)$$

mit den Hilfsfunktion  $\mathbf{a}$  und  $\bar{\mathbf{a}} = 1/\mathbf{a}$  nach (3.36), der Dichtefunktion  $G(\omega, \tilde{\xi})$  nach (3.57) und den Inhomogenitäten  $\xi = \tilde{\xi} - \frac{i\gamma}{2}$  innerhalb  $\mathcal{C}$ .

Wir wollen nun diesen Ausdruck nutzen, um Korrelationsfunktionen zu bestimmen.

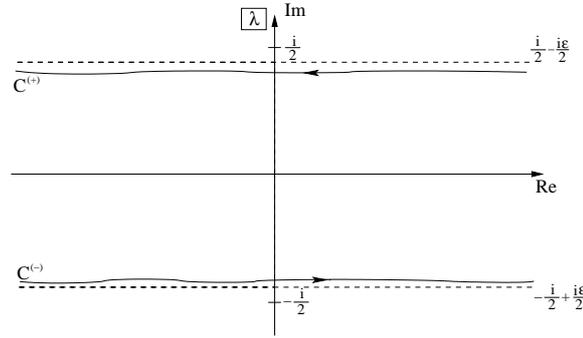


Abbildung 3.2.: Die Integrationskontur im isotropen Limes.

### 3.5. Der isotrope Limes

Um mit Hilfe des Integralausdruckes für die Dichtematrixelemente Korrelationsfunktionen explizit auszurechnen, betrachten wir (3.67) im  $XXX$ -Limes (d.h.  $\Delta = 1$ ), da wir dort den Faktorisierungsalgorithmus aus [13] anwenden können.

Lassen wir  $\Delta \rightarrow 1$  gehen, ist es sinnvoll, alle freien Parameter mit  $\gamma$  zu skalieren und dann den Limes  $\gamma \rightarrow 0$  durchzuführen. Dies hat zur Folge, dass die hyperbolischen Funktionen verschwinden und stattdessen rationale Ausdrücke auftauchen. Damit dies funktioniert, müssen die Integrationsvariablen  $\omega$  bzw. ihre Differentiale durch  $\gamma\omega$  bzw.  $\gamma d\omega$  substituiert werden. Außerdem ergeben sich die Umdefinitionen

$$\begin{aligned} \mathbf{a}(\gamma\omega) &\rightarrow \mathbf{a}(\omega), & \bar{\mathbf{a}}(\gamma\omega) &\rightarrow \bar{\mathbf{a}}(\omega), \\ \mathbf{b}(\gamma\omega) &\rightarrow \mathbf{b}(\omega), & \bar{\mathbf{b}}(\gamma\omega) &\rightarrow \bar{\mathbf{b}}(\omega), \\ i\gamma G(\gamma\lambda, \gamma\xi) &\rightarrow G(\lambda, \xi). \end{aligned} \quad (3.68)$$

Die verschobene Inhomogenität  $\tilde{\xi}$  wird durch  $\tilde{\xi} := \xi + \frac{i}{2}$  neu definiert. Auch die Kontur  $\mathcal{C}$  ändert sich, wie in Abb. 3.2 dargestellt. Zudem gelte im Weiteren  $\varepsilon \rightarrow 0^+$ .

#### 3.5.1. Die Hilfsfunktionen, der führende Eigenwert und die $G$ -Funktion

Wir müssen also die Hilfsfunktionen, den führenden Eigenwert und auch die  $G$ -Funktion im  $XXX$ -Limes darstellen. Die entsprechenden Rechnungen sind nach obigem Schema einfach durchzuführen. Wir beschränken uns hier auf die Aufzählung der Ergebnisse.

#### Nichtlineare Integralgleichungen (NLIE) für die Hilfsfunktionen

Für die Hilfsfunktionen folgt :

- NLIE für  $\ln \mathbf{a}(\lambda)$ :

$$\ln \mathbf{a}(\lambda) = -2i\phi + L \ln \left( \frac{\lambda - \frac{i}{2}}{\lambda + \frac{i}{2}} \right) - \int_{\mathcal{C}} \frac{d\omega}{\pi} \frac{\ln(1 + \mathbf{a}(\omega))}{1 + (\lambda - \omega)^2}. \quad (3.69)$$

- NLIE für  $\ln \bar{\mathbf{a}}(\lambda)$ :

$$\ln \bar{\mathbf{a}}(\lambda) = 2i\phi - L \ln \left( \frac{\lambda - \frac{i}{2}}{\lambda + \frac{i}{2}} \right) + \int_{\mathcal{C}} \frac{d\omega}{\pi} \frac{\ln(1 + \bar{\mathbf{a}}(\omega))}{1 + (\lambda - \omega)^2}. \quad (3.70)$$

- NLIE für  $\ln \mathbf{b}(\lambda)$ :

$$\begin{aligned} \ln \mathbf{b}(\lambda) = & i\phi + L \ln \left( \tanh \left( \frac{\pi}{2} \lambda \right) \right) \\ & + \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dy}{2\pi} \mathcal{K}(\lambda - y) \ln(1 + \mathbf{b}(y)) \\ & - \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dy}{2\pi} \mathcal{K}(\lambda - y - i) \ln(1 + \bar{\mathbf{b}}(y)). \end{aligned} \quad (3.71)$$

- NLIE für  $\ln \bar{\mathbf{b}}(\lambda)$ :

$$\begin{aligned} \ln \bar{\mathbf{b}}(\lambda) = & -i\phi + L \ln \left( \tanh \left( \frac{\pi}{2} \lambda \right) \right) \\ & + \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dy}{2\pi} \mathcal{K}(\lambda - y) \ln(1 + \bar{\mathbf{b}}(y)) \\ & - \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dy}{2\pi} \mathcal{K}(\lambda - y + i) \ln(1 + \mathbf{b}(y)). \end{aligned} \quad (3.72)$$

Obige Ergebnisse wurden mit Hilfe der Relationen

$$\lim_{\gamma \rightarrow 0} \gamma K_{i\gamma}(\gamma(\lambda - \omega)) = \frac{2}{1 + (\lambda - \omega)^2}, \quad (3.73)$$

$$\lim_{\gamma \rightarrow 0} 2\gamma F(\gamma y) = \int_{-\infty}^{+\infty} dq e^{iqy} \frac{e^{-\frac{|q|}{2}}}{\text{ch}(\frac{q}{2})} = \mathcal{K}(y), \quad (3.74)$$

$$\mathcal{K}(x) := i\partial_x \ln \left[ \frac{\Gamma(1 - \frac{i}{2}x)\Gamma(\frac{1}{2} + \frac{i}{2}x)}{\Gamma(1 + \frac{i}{2}x)\Gamma(\frac{1}{2} - \frac{i}{2}x)} \right] \quad (3.75)$$

bestimmt. Beachte, dass  $\mathcal{K}(x)$  gerade die Zwei-Spinon-Streuphase beschreibt, und als solche auch in späteren Ergebnissen eine zentrale Rolle spielt.

### Der Eigenwert der Transfermatrix

Für den Eigenwert gilt im isotropen Limes:

$$\lim_{\gamma \rightarrow 0} \Lambda(\gamma\lambda) = \gamma^L \tilde{\Lambda}(\lambda) \quad (3.76)$$

mit

$$\tilde{\Lambda}(\lambda) = \omega \cdot (\lambda + \frac{i}{2})^L \left[ \prod_{j=1}^{L/2} \frac{\lambda - \lambda_j - i}{\lambda - \lambda_j} \right] + \frac{1}{\omega} (\lambda - \frac{i}{2})^L \left[ \prod_{j=1}^{L/2} \frac{\lambda - \lambda_j + i}{\lambda - \lambda_j} \right]. \quad (3.77)$$

Wir erhalten dann die folgenden Integraldarstellungen:

- Der Eigenwert in Abhängigkeit von  $\mathbf{a}$ :

$$\ln \left( \frac{\tilde{\Lambda}(\lambda + \frac{i}{2})}{(\lambda + i)^L} \right) = i\phi + i\frac{\pi}{2}L + \int_{\mathcal{C}} \frac{d\omega}{2\pi i} \frac{\ln(1 + \mathbf{a}(\omega))}{\frac{1}{4} + (\lambda - \omega)^2}. \quad (3.78)$$

- Der Eigenwert in Abhängigkeit von  $\bar{\mathbf{a}}$ :

$$\ln \left( \frac{\tilde{\Lambda}(\lambda - \frac{i}{2})}{(\lambda - i)^L} \right) = -i\phi - i\frac{\pi}{2}L - \int_{\mathcal{C}} \frac{d\omega}{2\pi i} \frac{\ln(1 + \bar{\mathbf{a}}(\omega))}{\frac{1}{4} + (\lambda - \omega)^2}. \quad (3.79)$$

- Der Eigenwert in Abhängigkeit von  $\mathbf{b}$  und  $\bar{\mathbf{b}}$ :

$$\begin{aligned} \ln \left( \frac{\tilde{\Lambda}(\lambda + \frac{i}{2})}{(\lambda + i)^L} \right) &= \frac{iL}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dq}{q} e^{-q} \frac{\sin(q\lambda)}{\operatorname{ch}(\frac{q}{2})} \\ &+ \int_{\mathcal{C}^{(+)}} \frac{d\omega}{2i} \frac{\ln[(1 + \mathbf{b}(\omega))(1 + \bar{\mathbf{b}}(\omega))]}{\operatorname{sh}(\pi(\lambda - \omega))}. \end{aligned} \quad (3.80)$$

### Die $G$ -Funktion

Wir benötigen auch die verschiedenen Darstellungen der  $G$ -Funktion im isotropen Limes. Die Anwendung der obigen Manipulation liefert hier:

- Integralgleichung in Abhängigkeit von  $\mathbf{a}$ :

$$G(\lambda, \xi + \frac{i}{2}) = -\frac{1}{(\xi - \lambda + \frac{3i}{2})(\xi - \lambda + \frac{i}{2})} + \int_{\mathcal{C}} \frac{d\omega}{\pi} \frac{1}{1 + (\lambda - \omega)^2} \frac{G(\omega, \xi + \frac{i}{2})}{1 + \mathbf{a}(\omega)}. \quad (3.81)$$

- Integralgleichung in Abhängigkeit von  $\bar{\mathbf{a}}$ :

$$G(\lambda, \xi + \frac{i}{2}) = \frac{1}{(\lambda - \xi + \frac{i}{2})(\lambda - \xi - \frac{i}{2})} - \int_{\mathcal{C}} \frac{d\omega}{\pi} \frac{1}{1 + (\lambda - \omega)^2} \frac{G(\omega, \xi + \frac{i}{2})}{1 + \bar{\mathbf{a}}(\omega)}. \quad (3.82)$$

- Integralgleichung für  $g_{\xi}^{(+)}(x)$  in Abhängigkeit von  $\mathbf{b}$  und  $\bar{\mathbf{b}}$ :

$$\begin{aligned} \frac{1}{i} g_{\xi}^{(+)}(x) &= -\frac{\pi}{\operatorname{sh}(\pi(x - \xi))} + \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\nu}{2\pi} \mathcal{K}(x - \nu) \frac{\frac{1}{i} g_{\xi}^{(+)}(\nu)}{1 + \bar{\mathbf{b}}^{-1}(\nu)} \\ &- \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\nu}{2\pi} \mathcal{K}(x - \nu + i - i0) \frac{\frac{1}{i} g_{\xi}^{(-)}(\nu)}{1 + \mathbf{b}^{-1}(\nu)}. \end{aligned} \quad (3.83)$$

- Integralgleichung für  $g_\xi^{(-)}(x)$  in Abhängigkeit von  $\mathfrak{b}$  und  $\bar{\mathfrak{b}}$ :

$$\begin{aligned} \frac{1}{i} g_\xi^{(-)}(x) = & -\frac{\pi}{\text{sh}(\pi(x - \xi))} + \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\nu}{2\pi} \mathcal{K}(x - \nu) \frac{\frac{1}{i} g_\xi^{(-)}(\nu)}{1 + \mathfrak{b}^{-1}(\nu)} \\ & - \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\nu}{2\pi} \mathcal{K}(x - \nu - i + i0) \frac{\frac{1}{i} g_\xi^{(+)}(\nu)}{1 + \bar{\mathfrak{b}}^{-1}(\nu)}. \end{aligned} \quad (3.84)$$

### 3.5.2. Integraldarstellung der Dichtematrixelemente im isotropen Limes

Für die Dichtematrixelemente führen wir den isotropen Limes mit Hilfe der Ersetzung

$$D_{L\beta_1 \dots \beta_m}^{\alpha_1 \dots \alpha_m}(\gamma\xi_1, \dots, \gamma\xi_m) \rightarrow D_{L\beta_1 \dots \beta_m}^{\alpha_1 \dots \alpha_m}(\xi_1, \dots, \xi_m) \quad (3.85)$$

durch. Aus Theorem 3.4.2 folgt direkt

**Korrolar 1.** Für die Dichtematrixelemente der Spin-1/2-XXX-Heisenberg-Kette der Länge  $L$  bei  $T = 0$  gilt die Integraldarstellung

$$\begin{aligned} D_{L\beta_1 \dots \beta_m}^{\alpha_1 \dots \alpha_m}(\tilde{\xi}_1 - \frac{i}{2}, \dots, \tilde{\xi}_m - \frac{i}{2}) = & \left[ \prod_{j=1}^{|\alpha^+|} \int_{\mathcal{C}} \frac{d\omega_j}{2\pi(1 + \mathfrak{a}(\omega_j))} \right] \left[ \prod_{j=|\alpha^+|+1}^m \int_{\mathcal{C}} \frac{d\omega_j}{2\pi(1 + \bar{\mathfrak{a}}(\omega_j))} \right] \\ & \times \left[ \prod_{j=1}^{|\alpha^+|} \prod_{k=1}^{\tilde{\alpha}_j^+ - 1} (\omega_j - \tilde{\xi}_k - i) \prod_{k=\tilde{\alpha}_j^+ + 1}^m (\omega_j - \tilde{\xi}_k) \right] \left[ \prod_{j=|\alpha^+|+1}^m \prod_{k=1}^{\tilde{\beta}_j^- - 1} (\omega_j - \tilde{\xi}_k + i) \prod_{k=\tilde{\beta}_j^- + 1}^m (\omega_j - \tilde{\xi}_k) \right] \\ & \times \frac{\det[G(\omega_j, \tilde{\xi}_k)]_{j,k=1, \dots, n}}{\prod_{1 \leq j < k \leq m} (\tilde{\xi}_k - \tilde{\xi}_j)(\omega_j - \omega_k - i)}. \end{aligned} \quad (3.86)$$

## 3.6. Separation der Integrale für kleine Abstände

In diesem Abschnitt werden wir die Integraldarstellung für kleine  $m$  mit den Techniken aus [13] faktorisieren und so für exakte numerische Berechnungen zugänglich machen. Eine numerische Untersuchung der nicht-faktorierten Dichtematrixelemente wurde in [15] durchgeführt.

### 3.6.1. Die Emptiness Formation Probability

Die Faktorisierung lässt sich gut an der *Emptiness Formation Probability* (EFP) für  $m = 2$  darstellen. Die EFP ist durch die Indizes  $\alpha_1 = \alpha_2 = \beta_1 = \beta_2 = 1$  definiert, und so folgt aus (3.86)

$$\begin{aligned} D_{L11}^{11}(\tilde{\xi}_1 - \frac{i}{2}, \tilde{\xi}_2 - \frac{i}{2})(\tilde{\xi}_2 - \tilde{\xi}_1) = & \int_{\mathcal{C}} \frac{d\omega_1}{2\pi(1 + \mathfrak{a}(\omega_1))} \int_{\mathcal{C}} \frac{d\omega_2}{2\pi(1 + \mathfrak{a}(\omega_2))} \underbrace{\frac{(\omega_1 - \tilde{\xi}_1 - i)(\omega_2 - \tilde{\xi}_2)}{\omega_1 - \omega_2 - i}}_{=:r(\omega_1, \omega_2)} \det [G(\omega_j, \tilde{\xi}_k)]_{j,k=1, \dots, n}. \end{aligned} \quad (3.87)$$

Da der Integrationsbereich des Doppelintegrals symmetrisch in den Integrationsvariablen ist, können wir  $r(\omega_1, \omega_2)$  durch  $[r(\omega_1, \omega_2) - r(\omega_2, \omega_1)]/2$  ersetzen. Dies hat zur Folge, dass wir

$$\begin{aligned} r(\omega_1, \omega_2) - r(\omega_2, \omega_1) &= \\ \frac{(\omega_1 - \tilde{\xi}_1 - i)(\omega_2 - \tilde{\xi}_2)}{\omega_1 - \omega_2 - i} + \frac{(\omega_2 - \tilde{\xi}_1 - i)(\omega_1 - \tilde{\xi}_2)}{\omega_1 - \omega_2 + i} &= \frac{P(\omega_1, \omega_2)}{1 + (\omega_1 - \omega_2)^2} \end{aligned} \quad (3.88)$$

mit der Zerlegung von  $P(\omega_1, \omega_2)$  durch

$$\frac{P(\omega_1, \omega_2)}{1 + (\omega_1 - \omega_2)^2} = \frac{p(\omega_1) - p(\omega_2)}{1 + (\omega_1 - \omega_2)^2} - \frac{2}{3}(\omega_1 - \omega_2) \quad (3.89)$$

und

$$p(\omega) = \frac{2}{3}\omega^3 - (\tilde{\xi}_1 + \tilde{\xi}_2 + i)\omega^2 + [i(\tilde{\xi}_1 + \tilde{\xi}_2 + i/3) + 2\tilde{\xi}_1\tilde{\xi}_2]\omega \quad (3.90)$$

in (3.87) einsetzen können. Wir erhalten dann

$$\begin{aligned} D_{L11}^{11}(\tilde{\xi}_1 - \frac{i}{2}, \tilde{\xi}_2 - \frac{i}{2})(\tilde{\xi}_2 - \tilde{\xi}_1) &= \\ \frac{1}{4} \sum_{P \in \mathfrak{S}^2} \int_{\mathcal{C}} \frac{d\omega_1 G(\omega_1, \tilde{\xi}_{P1})}{\pi(1 + \mathfrak{a}(\omega_1))} \int_{\mathcal{C}} \frac{d\omega_2 G(\omega_2, \tilde{\xi}_{P2})}{\pi(1 + \mathfrak{a}(\omega_2))} \left[ \frac{p(\omega_1)}{1 + (\omega_2 - \omega_1)^2} - \frac{2}{3}\omega_1 \right]. \end{aligned} \quad (3.91)$$

Der zweite Term in der eckigen Klammer liegt nun schon in faktorisierte Form vor. Um auch den ersten Term zu faktorisieren, benutzen wir Gleichung (3.81), die wir umstellen zu

$$G(\lambda, \tilde{\xi}) + \frac{1}{(\lambda - \tilde{\xi})(\lambda - \tilde{\xi} - i)} = \int_{\mathcal{C}} \frac{d\omega}{\pi(1 + \mathfrak{a}(\omega))} \frac{G(\omega, \tilde{\xi})}{1 + (\lambda - \omega)^2} \quad (3.92)$$

und von rechts nach links gelesen in (3.91) einsetzen. So folgt

$$\begin{aligned} D_{L11}^{11}(\tilde{\xi}_1 - \frac{i}{2}, \tilde{\xi}_2 - \frac{i}{2})(\tilde{\xi}_2 - \tilde{\xi}_1) &= \\ \sum_{P \in \mathfrak{S}^2} \text{sign}(P) \left[ \frac{1}{12}(3\tilde{\xi}_{P1} - \tilde{\xi}_{P2} + i)\Phi_1(\tilde{\xi}_{P1}) + \frac{1}{6}\Phi_2(\tilde{\xi}_{P2}) - \frac{1}{6}\Phi_1(\tilde{\xi}_{P1})\Phi_2(\tilde{\xi}_{P2}) \right. \\ \left. \frac{1}{24}(\tilde{\xi}_{P1} - \tilde{\xi}_{P2})(1 + (\tilde{\xi}_{P1} - \tilde{\xi}_{P2})^2)\Psi(\tilde{\xi}_{P1}, \tilde{\xi}_{P2}) \right]. \end{aligned} \quad (3.93)$$

Dabei wurden die Funktion

$$\Psi(\tilde{\xi}_1, \tilde{\xi}_2) = \int_{\mathcal{C}} \frac{d\omega}{\pi(1 + \mathfrak{a}(\omega))} \frac{G(\omega, \tilde{\xi}_1)}{(\omega - \tilde{\xi}_2)(\omega - \tilde{\xi}_2 - i)} \quad (3.94)$$

sowie eine Familie von so genannten Momenten

$$\Phi_j(\tilde{\xi}) = \int_{\mathcal{C}} \frac{d\omega}{\pi} \frac{\omega^{j-1} G(\omega, \tilde{\xi})}{1 + \mathfrak{a}(\omega)}, \quad j \in \mathbb{N} \quad (3.95)$$

eingeführt.

### Eigenschaften von $\Psi(\tilde{\xi}_1, \tilde{\xi}_2)$

Mit Hilfe von (3.81) kann man zeigen, dass  $\Psi(\tilde{\xi}_1, \tilde{\xi}_2)$  symmetrisch ist. Im Limes  $L \rightarrow \infty$ ,  $\phi \rightarrow 0$  wird die physikalische Bedeutung von  $\Psi(\tilde{\xi}_1, \tilde{\xi}_2)$  klar:

$$\lim_{L \rightarrow \infty} \lim_{\phi \rightarrow 0} \Psi(\tilde{\xi}_1, \tilde{\xi}_2) = 2\mathcal{K}(x) \Big|_{x=\tilde{\xi}_1-\tilde{\xi}_2}. \quad (3.96)$$

Die in (3.75) eingeführte Größe  $\mathcal{K}(x)$  beschreibt gerade die Zwei-Spinon-Streuphase [20,43]. Wir geben nun noch die Formulierung von  $\Psi(\tilde{\xi}_1, \tilde{\xi}_2)$  in den verschiedenen Hilfsfunktionen an. Neben der oben gegebenen Definition in  $\mathfrak{a}$  lässt sich  $\Psi(\tilde{\xi}_1, \tilde{\xi}_2)$  auch durch  $\bar{\mathfrak{a}}$  ausdrücken:

$$\Psi(\tilde{\xi}_1, \tilde{\xi}_2) = \int_{\mathcal{C}} \frac{d\omega}{\pi(1 + \bar{\mathfrak{a}}(\omega))} \frac{G(\omega, \tilde{\xi}_1 - \frac{i}{2})}{(\omega - \tilde{\xi}_2)(\omega - \tilde{\xi}_2 + i)}. \quad (3.97)$$

Unter Ausnutzung der bekannten Relationen zwischen den Hilfsfunktionen lässt sich  $\Psi(\tilde{\xi}_1, \tilde{\xi}_2)$  zusätzlich auch in  $\mathfrak{b}$  und  $\bar{\mathfrak{b}}$  schreiben. Dies ist sinnvoll, da dabei die Integrationskonturen über die reelle Achse laufen und so numerischen Berechnung zugänglicher sind. Unter Benutzung der Funktionen  $g^{(\pm)}$  folgt mit  $\tilde{\xi}_{jk} = \tilde{\xi}_j - \tilde{\xi}_k$ :

$$\Psi(\tilde{\xi}_1, \tilde{\xi}_2) = 2\mathcal{K}(\tilde{\xi}_{12}) + \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\nu}{\text{ch}(\pi(\tilde{\xi}_2 - \nu))} \left[ \frac{g_{\tilde{\xi}_1 - \frac{i}{2}}^{(+)}(\nu)}{1 + \bar{\mathfrak{b}}^{-1}(\nu)} + \frac{g_{\tilde{\xi}_1 - \frac{i}{2}}^{(-)}(\nu)}{1 + \mathfrak{b}^{-1}(\nu)} \right]. \quad (3.98)$$

Um nachfolgende Ergebnisse strukturell zu vereinfachen, führen wir zusätzlich noch eine Funktion  $\gamma(\tilde{\xi}_1, \tilde{\xi}_2)$  ein, die über

$$\gamma(\tilde{\xi}_1, \tilde{\xi}_2) = [1 + (\tilde{\xi}_1 - \tilde{\xi}_2)^2] \Psi(\tilde{\xi}_1, \tilde{\xi}_2) - 1 \quad (3.99)$$

definiert ist. Außerdem sei

$$\lim_{\phi \rightarrow 0} \gamma(\tilde{\xi}_1, \tilde{\xi}_2) =: \gamma_0(\tilde{\xi}_1, \tilde{\xi}_2). \quad (3.100)$$

### Eigenschaften der Momente $\Phi_j(\tilde{\xi})$

Betrachten wir nun die Momente im Limes  $L \rightarrow \infty$ ,  $\phi \rightarrow 0$ , so finden wir Polynome in  $\tilde{\xi}$  der Ordnung  $j - 1$ ,

$$\lim_{L \rightarrow \infty} \lim_{\phi \rightarrow 0} \Phi_j(\tilde{\xi}) = \phi_j^{(0)}(\tilde{\xi}) = (-i\partial_k)^{j-1} \frac{2e^{ik\tilde{\xi}}}{1 + e^k} \Big|_{k=0}, \quad (3.101)$$

und insbesondere  $\Phi_j^{(0)}(\tilde{\xi}) = 1$ .

Diese Polynome erfüllen die Differenzgleichung

$$\Phi_j^{(0)}(\tilde{\xi}) + \Phi_j^{(0)}(\tilde{\xi} - i) = 2\tilde{\xi}^{j-1}, \quad (3.102)$$

sodass wir normierte Momente

$$\varphi_j(\tilde{\xi}) = \Phi_j(\tilde{\xi}) - \Phi_j^{(0)}(\tilde{\xi}) \quad (3.103)$$

definieren können, die für  $L \rightarrow \infty$ ,  $\phi \rightarrow 0$  verschwinden. Im Weiteren ist zu beachten, dass insbesondere

$$\lim_{\phi \rightarrow 0} \varphi_1(\tilde{\xi}) = 0 \quad (3.104)$$

gilt. Außerdem definieren wir für den späteren Gebrauch noch eine Determinante  $\Delta_n$  über

$$\Delta_n(\tilde{\xi}_1, \dots, \tilde{\xi}_n) = \frac{\det[\varphi_j(\tilde{\xi}_k)]_{j,k=1,\dots,n}}{\prod_{1 \leq j < k \leq n} \tilde{\xi}_{kj}}. \quad (3.105)$$

Wir können auch die Momente durch die anderen Hilfsfunktionen ausdrücken. Dann erhalten wir in Abhängigkeit von  $\bar{\mathbf{a}}$

$$\varphi_j(\tilde{\xi}) = - \left[ \int_{\mathcal{C}} \frac{d\omega \omega^{j-1} G(\omega, \tilde{\xi} - \frac{i}{2})}{\pi(1 + \bar{\mathbf{a}}(\omega))} - \Phi_j^{(0)}(\tilde{\xi} - i) \right]. \quad (3.106)$$

Die Formulierung durch die Hilfsfunktionen  $\mathbf{b}$  und  $\bar{\mathbf{b}}$  erfolgt hier wieder in  $g^{(\pm)}$ :

$$\varphi_1(\tilde{\xi}) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\nu}{2\pi} \left[ \frac{g_{\tilde{\xi}_1 - \frac{i}{2}}^{(+)}(\nu)}{1 + \bar{\mathbf{b}}^{-1}(\nu)} - \frac{g_{\tilde{\xi}_1 - \frac{i}{2}}^{(-)}(\nu)}{1 + \mathbf{b}^{-1}(\nu)} \right], \quad (3.107)$$

$$\varphi_2(\tilde{\xi}) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\nu}{2\pi} \left[ \frac{(\nu + \frac{i}{2})g_{\tilde{\xi}_1 - \frac{i}{2}}^{(+)}(\nu)}{1 + \bar{\mathbf{b}}^{-1}(\nu)} + \frac{(\nu - \frac{i}{2})g_{\tilde{\xi}_1 - \frac{i}{2}}^{(-)}(\nu)}{1 + \mathbf{b}^{-1}(\nu)} \right]. \quad (3.108)$$

### Ergebnisse für die EFP und die Zweipunktfunktionen bei $m = 2$

Benutzen wir die eingeführte Notation und formulieren die EFP für  $m = 2$  in den Funktionen  $\Delta$  und  $\gamma$ , so erhalten wir

$$D_{L11}^{11}(\tilde{\xi}_1 - \frac{i}{2}, \tilde{\xi}_2 - \frac{i}{2}) = \frac{1}{4} - \frac{1}{12}\gamma(\tilde{\xi}_1, \tilde{\xi}_2) + \frac{1}{4}(\Delta_1(\tilde{\xi}_1) + \Delta_2(\tilde{\xi}_2)) + \frac{1}{6}\Delta_2(\tilde{\xi}_1, \tilde{\xi}_2). \quad (3.109)$$

Aus (3.104) folgt sofort, dass

$$\lim_{\phi \rightarrow 0} \Delta_j(\tilde{\xi}) = 0, \quad \text{für alle } j \in \mathbb{N}, \quad (3.110)$$

womit für verschwindenden Twist-Winkel  $\phi \rightarrow 0$

$$D_{L11}^{11}(\tilde{\xi}_1 - \frac{i}{2}, \tilde{\xi}_2 - \frac{i}{2}) = \frac{1}{4} - \frac{1}{12}\gamma(\tilde{\xi}_1, \tilde{\xi}_2) \quad (3.111)$$

folgt.

Die Berechnung der Zwei-Punkt-Funktion  $\langle \sigma_1^z \sigma_2^z \rangle$  erfolgt nun über

$$\begin{aligned} \langle \sigma_1^z \sigma_2^z \rangle_{L,\phi} = & D_{L11}^{11}(\tilde{\xi}_1 - \frac{i}{2}, \tilde{\xi}_2 - \frac{i}{2}) + D_{L22}^{22}(\tilde{\xi}_1 - \frac{i}{2}, \tilde{\xi}_2 - \frac{i}{2}) \\ & - D_{L12}^{12}(\tilde{\xi}_1 - \frac{i}{2}, \tilde{\xi}_2 - \frac{i}{2}) - D_{L21}^{21}(\tilde{\xi}_1 - \frac{i}{2}, \tilde{\xi}_2 - \frac{i}{2}). \end{aligned} \quad (3.112)$$

Unter Ausnutzung der Relationen

$$D_{L22}^{22}(\tilde{\xi}_1 - \frac{i}{2}, \tilde{\xi}_2 - \frac{i}{2}) = D_{L11}^{11}(\tilde{\xi}_1 - \frac{i}{2}, \tilde{\xi}_2 - \frac{i}{2}) - D_{L1}^1(\tilde{\xi}_1 - \frac{i}{2}) - D_{L1}^1(\tilde{\xi}_2 - \frac{i}{2}) + 1, \quad (3.113)$$

$$D_{L11}^{11}(\tilde{\xi}_1 - \frac{i}{2}, \tilde{\xi}_2 - \frac{i}{2}) = D_{L1}^1(\tilde{\xi}_1 - \frac{i}{2}) - D_{L11}^{11}(\tilde{\xi}_1 - \frac{i}{2}, \tilde{\xi}_2 - \frac{i}{2}), \quad (3.114)$$

$$D_{L11}^{11}(\tilde{\xi}_1 - \frac{i}{2}, \tilde{\xi}_2 - \frac{i}{2}) = D_{L1}^1(\tilde{\xi}_2 - \frac{i}{2}) - D_{L11}^{11}(\tilde{\xi}_1 - \frac{i}{2}, \tilde{\xi}_2 - \frac{i}{2}) \quad (3.115)$$

folgt

$$\langle \sigma_1^z \sigma_2^z \rangle_{L,\phi} = 4D_{L11}^{11}(\tilde{\xi}_1 - \frac{i}{2}, \tilde{\xi}_2 - \frac{i}{2}) - 2D_{L1}^1(\tilde{\xi}_1 - \frac{i}{2}) - 2D_{L1}^1(\tilde{\xi}_2 - \frac{i}{2}) + 1. \quad (3.116)$$

Dies geht im homogenen Limes ( $\xi \rightarrow 0$  bzw.  $\tilde{\xi} \rightarrow \frac{i\gamma}{2}$ ) über in den faktorisierten Ausdruck

$$\langle \sigma_1^z \sigma_2^z \rangle_{L,\phi} = \frac{2}{3} \Delta_2(\frac{i}{2}, \frac{i}{2}) - \frac{1}{3} \gamma(\frac{i}{2}, \frac{i}{2}). \quad (3.117)$$

### Ergebnisse für die EFP und die Zweipunktfunktionen bei $m = 3$

Mit den gleichen Techniken wie oben und weiterhin analog zu [13] lassen sich auch für  $m = 3$  die EFP und die  $zz$ -Korrelationsfunktion bestimmen. Wir erhalten für die EFP ausgedrückt durch  $\Delta_n$  und  $\gamma$

$$\begin{aligned} D_{L111}^{111}(\tilde{\xi}_1 - \frac{i}{2}, \tilde{\xi}_2 - \frac{i}{2}, \tilde{\xi}_3 - \frac{i}{2}) = & \frac{1}{24} + \frac{1 + 5\tilde{\xi}_{12}\tilde{\xi}_{13}}{40\tilde{\xi}_{12}\tilde{\xi}_{13}} \Delta_1(\tilde{\xi}_1) + \frac{1 + 2\tilde{\xi}_{13}\tilde{\xi}_{23}}{24\tilde{\xi}_{13}\tilde{\xi}_{23}} \\ & + \frac{1}{60} \Delta_3(\tilde{\xi}_1, \tilde{\xi}_2, \tilde{\xi}_3) + \frac{3 + 2\tilde{\xi}_{12}^2 + 5\tilde{\xi}_{13}\tilde{\xi}_{23}}{120\tilde{\xi}_{13}\tilde{\xi}_{23}} \gamma(\tilde{\xi}_1, \tilde{\xi}_2) \Delta_1(\tilde{\xi}_3) \\ & + \frac{1 - \tilde{\xi}_{13}\tilde{\xi}_{23}}{24\tilde{\xi}_{13}\tilde{\xi}_{23}} \gamma(\tilde{\xi}_{12}, \tilde{\xi}_{12}) + \text{zykl. Permutationen} . \end{aligned} \quad (3.118)$$

Für  $\phi \rightarrow 0$  geht dies in

$$D_{L111}^{111}(\tilde{\xi}_1 - \frac{i}{2}, \tilde{\xi}_2 - \frac{i}{2}, \tilde{\xi}_3 - \frac{i}{2}) = \frac{1}{24} + \frac{1 - \tilde{\xi}_{13}\tilde{\xi}_{23}}{24\tilde{\xi}_{13}\tilde{\xi}_{23}} \gamma_0(\tilde{\xi}_1, \tilde{\xi}_2) + \text{zykl. Permutationen} \quad (3.119)$$

über. Auch für  $m = 3$  lässt sich die Zweipunktfunktion  $\langle \sigma_1^z \sigma_m^z \rangle$  durch die Funktionen  $\Delta_n$  und  $\gamma$  ausdrücken [13]. Man erhält die faktorisierte Form

$$\begin{aligned} \langle \sigma_1^z \sigma_3^z \rangle_{L,\phi} = & \frac{2}{3} \Delta_2(\frac{i}{2}, \frac{i}{2}) - \frac{1}{3} \gamma(\frac{i}{2}, \frac{i}{2}) - \frac{1}{6} (\Delta_2)_{xx}(\frac{i}{2}, \frac{i}{2}) + \frac{1}{3} (\Delta_2)_{xy}(\frac{i}{2}, \frac{i}{2}) \\ & - \frac{1}{6} \gamma_{xx}(\frac{i}{2}, \frac{i}{2}) + \frac{1}{3} \gamma_{xy}(0, 0). \end{aligned} \quad (3.120)$$

Die Indizes  $x$  und  $y$  bezeichnen hier Ableitungen nach dem ersten bzw. zweiten Argument. Für  $\phi \rightarrow 0$  erhalten wir im homogenen Limes den faktorisierten Ausdruck

$$\langle \sigma_1^z \sigma_3^z \rangle_L = -\frac{1}{3} \gamma(\frac{i}{2}, \frac{i}{2}) - \frac{1}{6} \gamma_{xx}(\frac{i}{2}, \frac{i}{2}) + \frac{1}{3} \gamma_{xy}(\frac{i}{2}, \frac{i}{2}). \quad (3.121)$$

### Der thermodynamische Limes

Der thermodynamische Limes  $L \rightarrow \infty$  lässt sich in obigen Ausdrücken für  $\phi = 0$  einfach durchführen. Die einzige von  $L$  abhängende Funktion ist  $\gamma_0$ . Diese zeigt im Limes das folgende Verhalten:

$$\lim_{L \rightarrow \infty} \gamma_0(\tilde{\xi}_1, \tilde{\xi}_2) = 2[1 + \tilde{\xi}_{12}^2] \mathcal{K}(\tilde{\xi}_{12}) - 1. \quad (3.122)$$

## 3.7. Numerische Ergebnisse

In diesem Kapitel werden wir zeigen, wie sich die Zweipunkt-Korrelationen im  $XXX$ -Limes für  $\phi = 0$  numerisch bestimmen lassen und die Ergebnisse diskutieren.

### 3.7.1. Der Algorithmus

Ziel ist die numerische Berechnung von (3.117) und (3.121). Um dies zu erreichen, betrachten wir die NLIE für die Hilfsfunktionen  $\mathfrak{b}$  und  $\bar{\mathfrak{b}}$ . In dieser Formulierung laufen die Integrationswege über die reelle Achse. Die NLIE werden dann im Fourier-Raum numerisch gelöst. Dies wird zusätzlich vereinfacht, da die auftauchenden Integrale vom Faltungstyp sind. Wenn die Lösungen für die Hilfsfunktionen vorliegen, kann die Funktion  $G(\lambda, \tilde{\xi})$ , ebenfalls durch  $\mathfrak{b}$  und  $\bar{\mathfrak{b}}$  ausgedrückt und mit Integrationswegen auf der reellen Achse, berechnet werden. Auf dieser Grundlage kann die Funktion  $\gamma$  gemeinsam mit ihren Ableitungen berechnet werden. Sobald  $\gamma$ ,  $\gamma_{xx}$  und  $\gamma_{xy}$  bekannt sind, sind die Erwartungswerte  $\langle \sigma_1^z \sigma_2^z \rangle_L$  und  $\langle \sigma_1^z \sigma_3^z \rangle_L$  direkt für beliebige  $L$  berechenbar<sup>2</sup>. Die benutzten Gleichungen sind in Anhang B explizit aufgeführt.

### 3.7.2. Ergebnisse

In Tabelle 3.1 sind die Zahlenwerte für verschiedene Kettenlängen der  $zz$ -Korrelationsfunktionen aufgeführt. Die Abbildungen 3.3 und 3.4 stellen die Zahlenwerte aus Tabelle 3.1 graphisch dar.

<sup>2</sup>An dieser Stelle ein besonderer Dank an Herrn Dr. Jens Damerau, der seine vorhandenen Programme zur Lösung nichtlinearer Integralgleichungen auf das vorliegende Problem umschrieb und so die schnelle Implementierung ermöglichte.

### 3. Korrelationsfunktionen auf Ketten endlicher Länge

---

$L$	$\langle \sigma_1^z \sigma_2^z \rangle$	$\langle \sigma_1^z \sigma_3^z \rangle$
2	-1.000000000000000	—
4	-0.666666666666667	0.333333333333333
8	-0.60851556815620	0.26103720534839
16	-0.59519136338473	0.24696584167998
32	-0.59193864328956	0.24374937989865
64	-0.59113127886152	0.24297329183505
128	-0.59092994011745	0.24278223127753
256	-0.59087965782193	0.24273481483257
512	-0.59086709385781	0.24272300601642
1024	-0.59086395383499	0.24272006021644
$\infty$	-0.59086290741326	0.24271907982574

Tabelle 3.1.:  $zz$ -Korrelationsfunktionen als Funktion der Systemgröße.

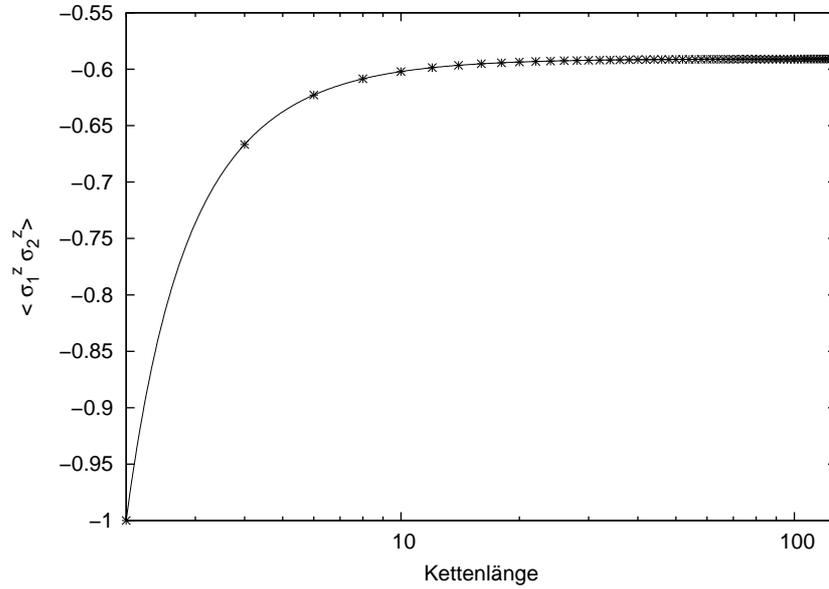
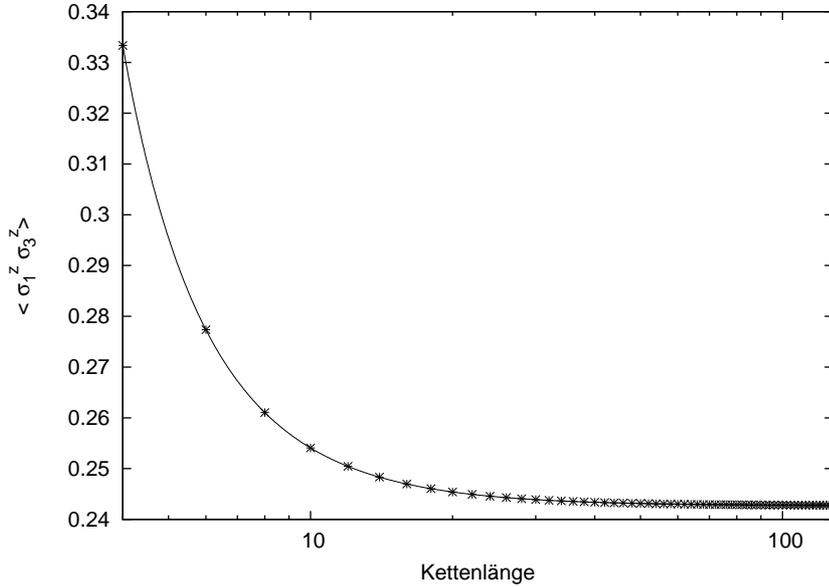


Abbildung 3.3.:  $\langle \sigma_1^z \sigma_{m+1}^z \rangle$  für  $m = 1$ .

Abbildung 3.4.:  $\langle \sigma_1^z \sigma_{m+1}^z \rangle$  für  $m = 2$ .

### Diskussion der Ergebnisse

Für  $L = 2, 4, 8$  ist es möglich exakte Ergebnisse auszurechnen. Diese Ergebnisse können genutzt werden, um die Genauigkeit der numerischen Berechnung zu testen. Es ist zu beachten, dass diese mit einer Genauigkeit von 13 Stellen reproduziert werden konnten (Tabelle 3.1). Die hier benutzte Methode erlaubt somit erstmals die Berechnung der Korrelationsfunktionen mit sehr hoher Genauigkeit. Bei der Betrachtung der Abbildungen 3.3 und 3.4 wird das antiferromagnetische Verhalten des betrachteten Modells sichtbar. Es sorgt dafür, dass die Nächste-Nachbar-Korrelation negativ ist, während die Übernächste-Nachbar-Korrelation positiv ist. Der monotone Abfall des Betrages der Korrelationen lässt sich durch den in der Festkörper-Physik 'quantum frustration' genannten Effekt erklären. Zur Veranschaulichung betrachten wir zwei XXX-Ketten der Längen 2 und 4. Die unnormierten Grundzustände lassen sich dann schreiben als

$$|gs\rangle_2 = \underbrace{|\downarrow\uparrow\rangle - |\uparrow\downarrow\rangle}_{\text{Néel}}, \quad (3.123)$$

$$|gs\rangle_4 = \underbrace{2|\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle + 2|\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle}_{\text{Néel}} - \underbrace{|\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle - |\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle - |\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\rangle}_{\text{quantum frustration}}. \quad (3.124)$$

Zustände mit abwechselnden Spins auf benachbarten Plätzen werden Néel-Zustände genannt und bilden ein Analogon zum klassischen Antiferromagneten, der eine ungestörte antiferromagnetische Ordnung der Form  $\langle \sigma_1^z \sigma_{n+1}^z \rangle = (-1)^n$  zeigt. Für die XXX-Kette wird diese Ordnung nur für  $L = 2$  erreicht: Hier zeigt die Nächste-Nachbar-Korrelationsfunktion

(3.123) das gleiche Verhalten, wie im klassischen Fall. Für  $L = 4$  zeigt sich in (3.124), dass es eine bestimmte Wahrscheinlichkeit für zwei parallele Spins auf benachbarten Plätzen gibt. Dies vermindert die Korrelation. Für anwachsende Kettenlängen wird die Néel-Ordnung mehr und mehr frustriert, womit sich das monotone Verhalten der dargestellten Korrelationen erklärt.

### Thermodynamischer Limes

Aus den Gleichungen für  $\mathfrak{b}$  und  $\bar{\mathfrak{b}}$  (vgl. (3.71) und (3.72)) ist ersichtlich, dass  $\mathfrak{b}(x)$  und  $\bar{\mathfrak{b}}(x)$  für  $L \rightarrow \infty$  verschwinden. Damit werden die Integrale in den Gleichungen für  $\gamma$ ,  $\gamma_{xx}$  und  $\gamma_{xy}$  zu Null, und wir erhalten (vgl. explizite Gleichungen im Anhang B)

$$\lim_{L \rightarrow \infty} \langle \sigma_1^z \sigma_2^z \rangle = \frac{1}{3} - \frac{4}{3} \ln 2, \quad \lim_{L \rightarrow \infty} \langle \sigma_1^z \sigma_3^z \rangle = \frac{1}{3} - \frac{16}{3} \ln 2 + 3\zeta(3). \quad (3.125)$$

Die erste Gleichung folgt sofort aus dem klassischen Resultat von Hulthén nach [29], während die zweite Gleichung dem bekannten Resultat von Takahashi [60] entspricht.

Die Korrelationsfunktionen für endliche Kettenlängen wurden also hier als Korrekturen der asymptotischen Werte mit hoher Genauigkeit berechnet.

## 4. Die Dichtematrix im $XX$ -Limes

In diesem Kapitel werden wir Integraldarstellungen für die Dichtematrixelemente der  $XXZ$ -Heisenberg-Kette bei endlicher Temperatur im Limes  $\Delta \rightarrow 0$ , dem Limes freier Fermionen, auch  $XX$ -Limes genannt, betrachten.

Wir werden zuerst kurz zeigen, wie dieser Limes mit der Beschreibung freier Fermionen verbunden ist. Anschließend werden wir Integraldarstellungen der Dichtematrixelemente im  $XX$ -Limes für verschiedene Fälle untersuchen.

### Freie Fermionen

Wir schreiben den Hamilton-Operator der  $XXZ$ -Kette bei  $\Delta = 0$  in den Auf- und Absteigeoperatoren  $S^\pm = S^x \pm iS^y$  und erhalten

$$H_{XX} = 2J \sum_{j=1}^{L-1} (S_j^+ S_{j+1}^- + S_j^- S_{j+1}^+) + 2J(S_L^+ S_1^- + S_L^- S_1^+) - h \sum_{j=1}^L S_j^z. \quad (4.1)$$

Nach Anwendung der Jordan-Wigner-Transformation

$$S_j^+ = c_j \left[ \prod_{k=1}^{j-1} (1 - 2c_k^\dagger c_k) \right], \quad S_j^- = c_j^\dagger \left[ \prod_{k=1}^{j-1} (1 - 2c_k^\dagger c_k) \right], \quad (4.2)$$

$$c_j = S_j^+ \left[ \prod_{k=1}^{j-1} (2S_k^+ S_k^- - 1) \right], \quad c_j^\dagger = S_j^- \left[ \prod_{k=1}^{j-1} (2S_k^+ S_k^- - 1) \right], \quad (4.3)$$

$$\sigma_j^z = 2S_j^z = [S_j^+, S_j^-] = 1 - 2c_j^\dagger c_j \quad (4.4)$$

folgt daraus

$$H_{XX} = 2J \sum_{j=1}^{L-1} (c_{j+1}^\dagger c_j + c_j^\dagger c_{j+1}) - 2J(c_1^\dagger c_L + c_L^\dagger c_1) \prod_{j=1}^L (1 - 2c_j^\dagger c_j) - \frac{h}{2} \sum_{j=1}^L (1 - 2c_j^\dagger c_j). \quad (4.5)$$

Dabei gehorchen die Fermi-Operatoren den kanonischen Anti-Vertauschungsrelationen. Betrachten wir andererseits freie Elektronen in tight-binding-Näherung auf einer periodisch geschlossenen Kette der Länge  $L$  in zweiter Quantisierung, so lautet der entsprechende Hamilton-Operator

$$H_{FF} = 2J \sum_{j=1}^L (c_{j+1}^\dagger c_j + c_j^\dagger c_{j+1}) - \frac{h}{2} \sum_{j=1}^L (1 - 2c_j^\dagger c_j). \quad (4.6)$$

Um die Gleichheit von  $H_{XX}$  und  $H_{FF}$  im thermodynamischen Limes zu zeigen, betrachten wir beide Operatoren in diagonalisierter Form.  $H_{FF}$  wird mit der Ein-Teilchen-Dispersion  $\varepsilon_n = h + 4J \cos(n\varphi)$  und  $n = 0, \dots, L-1$ ,  $\varphi = 2\pi/L$  über eine diskrete Fourier-Transformation diagonalisiert. Es folgt

$$H_{FF,\text{diag}} = \sum_{n=0}^{L-1} (\tilde{c}_n^\dagger \tilde{c}_n) \varepsilon_n - \frac{hL}{2} \quad (4.7)$$

mit

$$c_j^\dagger = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{n=0}^{L-1} e^{-i\varphi j n} \tilde{c}_n^\dagger, \quad \tilde{c}_j^\dagger = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{n=1}^L e^{+i\varphi j n} c_n^\dagger. \quad (4.8)$$

Da die  $z$ -Komponente  $M$  des Gesamtspins eine Erhaltungsgröße ist, kann in (4.5) der Term  $\prod_{j=1}^L (1 - 2c_j^\dagger c_j)$  durch  $(-1)^M$  ersetzt werden. Damit ergibt die Diagonalisierung von  $H_{XX}$  einen zu (4.7) äquivalenten Ausdruck mit der Dispersion

$$\varepsilon_n = \begin{cases} h + 4J \cos((n + \frac{1}{2})\varphi) & , \quad M \text{ gerade} \\ h + 4J \cos(n\varphi) & , \quad M \text{ ungerade} \end{cases}, \quad n = 0, \dots, L-1. \quad (4.9)$$

Da im thermodynamischen Limes  $L \rightarrow \infty$  die Argumente in den Kosinus-Termen kontinuierlich werden, beschreiben  $H_{FF}$  und  $H_{XX}$  gleicherweise die Thermodynamik freier Fermionen.

## 4.1. Dichtematrix im homogenen Fall

Wir betrachten hier die Integraldarstellung für die Dichtematrixelemente im  $XX$ -Limes im homogenen Fall (alle Inhomogenitäten  $\xi_j$  sind Null). Danach geben wir eine Darstellung im inhomogenen Fall an und betrachten abschließend einige Grenzfälle.

Ausgangspunkt ist die Integraldarstellung der Dichtematrixelemente gemäß [22]. Im  $XX$ -Limes gilt:

$$\Delta = \text{ch}(\eta) = 0 \Rightarrow \eta = \frac{i\pi}{2} \Rightarrow \text{sh}(\lambda \pm \eta) = \pm i \text{ch}(\eta). \quad (4.10)$$

Im homogenen Fall lässt sich die Darstellung der Dichtematrixelemente im  $XX$ -Limes durch Anwendung von (4.10) schreiben als

$$D_{N_{\text{hom}}}^{XX} = (-i)^{\frac{m(m-1)}{2}} \left[ \prod_{j=1}^m \int_{\mathcal{C}} \frac{d\omega_j}{2\pi i} \right] \left[ \prod_{j=1}^{|\alpha^+|} \frac{(-i \text{ch}(\omega_j))^{\tilde{\alpha}_j^+ - 1} (\text{sh}(\omega_j))^{m - \tilde{\alpha}_j^+}}{1 + \mathbf{a}(\omega_j)} \right] \\ \times \left[ \prod_{j=|\alpha^+|+1}^m \frac{(-i \text{ch}(\omega_j))^{\tilde{\beta}_j^- - 1} (\text{sh}(\omega_j))^{m - \tilde{\beta}_j^-}}{1 + \bar{\mathbf{a}}(\omega_j)} \right] \frac{\prod_{1 \leq j < k \leq m} \text{sh}(\omega_k - \omega_j)}{\prod_{j=1}^m \text{sh}^m(\omega_j) \text{ch}^m(\omega_j)}. \quad (4.11)$$

Die Notation in den  $\tilde{\alpha}_j$  und  $\tilde{\beta}_j$  ist in Kapitel 3.4.1 erklärt.

Die Kontur  $\mathcal{C}$  besteht aus zwei Teilkonturen  $\mathcal{C}^\pm$  die parallel zur reellen Achse durch  $\text{Im } \lambda = \pm \frac{\pi}{4}$  verlaufen. Die Stücke der Integrationspfade, die parallel zur imaginären Achse

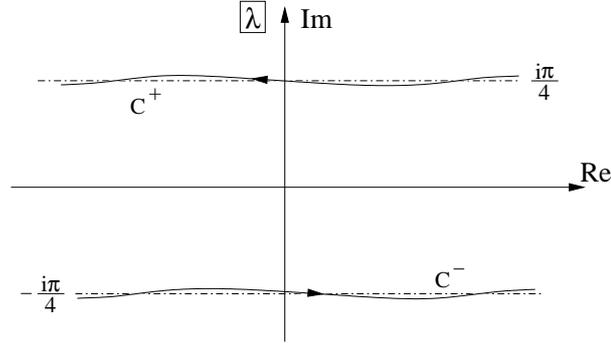


Abbildung 4.1.: Die Integrationskonturen  $\mathcal{C}^\pm$  verlaufen entlang der Linien  $\text{Im } \lambda = \pm\pi/4$ .

verlaufen, werden nach  $\pm\infty$  verschoben, wo sie durch verschwindende Asymptotik des Integranden nicht mehr beitragen.

Wir werden nun in (4.11) eine Transformation auf die erste Brillouin-Zone gemäß [25] vornehmen. Dazu werden die beiden Teilkonturen wie folgt parametrisiert:

$$\begin{aligned} \mathcal{C}^{(+)} : [\pi/2, \pi] \cup [-\pi, -\pi/2] &\rightarrow \mathbb{C}, \omega = \frac{1}{2} \text{arth}(\sin(p)) + \frac{i\pi}{4}, \\ \mathcal{C}^{(-)} : [-\pi/2, \pi/2] &\rightarrow \mathbb{C}, \omega = \frac{1}{2} \text{arth}(\sin(p)) - \frac{i\pi}{4}. \end{aligned} \quad (4.12)$$

Damit folgt

$$\text{sh}(2\omega) = \frac{1}{i \cos(p)}, \quad \text{coth}(2\omega) = \sin(p), \quad -\frac{d\omega}{\text{sh}(2\omega)} = \frac{i}{2} dp, \quad (4.13)$$

und für die Hilfsfunktion gilt

$$\begin{aligned} \mathfrak{a}(\lambda) &= e^{-\frac{h}{T}} \left( \frac{1 + \sin(\frac{4J}{NT}) \cos(p)}{1 - \sin(\frac{4J}{NT}) \cos(p)} \right)^{N/2} \\ \Rightarrow \lim_{N \rightarrow \infty} \mathfrak{a}(\lambda) &= \exp \left\{ -\frac{1}{T} (h - 4J \cos(p)) \right\}. \end{aligned} \quad (4.14)$$

Dies entspricht gerade dem Boltzmann-Gewicht eines freien Fermions im eindimensionalen Gitter mit chemischem Potential  $h$ . Um diese Transformation nun auf (4.11) anzuwenden,

schreiben wir diesen Ausdruck etwas um,

$$\begin{aligned}
 D_{N_{\text{hom}}}^{XX} &= (-i)^{\frac{m(m-1)}{2}} \left[ \prod_{j=1}^m \int_{\mathcal{C}} \frac{d\omega_j}{2\pi i} \right] \left[ \prod_{j=1}^{|\alpha^+|} \frac{(-i)^{\tilde{\alpha}_j^+ - 1} 2[\text{sh}(2\omega_j)]^{\tilde{\alpha}_j^+}}{[\text{ch}(2\omega_j) + 1][\text{ch}(2\omega_j) - 1]^{\tilde{\alpha}_j^+} (1 + \mathbf{a}(\omega_j))} \right] \\
 &\times \left[ \prod_{j=|\alpha^+|+1}^m \frac{(i)^{\tilde{\beta}_j^- - 1} 2[\text{sh}(2\omega_j)]^{\tilde{\beta}_j^-}}{[\text{ch}(2\omega_j) + 1][\text{ch}(2\omega_j) - 1]^{\tilde{\beta}_j^-} (1 + \bar{\mathbf{a}}(\omega_j))} \right] \\
 &\times \left[ \prod_{1 \leq j < k \leq m} \left( \frac{\text{ch}(2\omega_k) - 1}{\text{sh}(2\omega_k)} - \frac{\text{ch}(2\omega_j) - 1}{\text{sh}(2\omega_j)} \right) \right], \tag{4.15}
 \end{aligned}$$

föhren die Transformation (4.12) unter Anwendung der Relationen (4.13) durch und erhalten

$$\begin{aligned}
 D_{N_{\text{hom}}}^{XX} &= (-1)^{\frac{m(m-1)}{2}} \left[ \prod_{j=1}^m \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dp_j}{2\pi} \right] \left[ \prod_{1 \leq j < k \leq m} (e^{ip_k} - e^{ip_j}) \right] \\
 &\times \left[ \prod_{j=1}^{|\alpha^+|} \frac{e^{-i(\tilde{\alpha}_j^+ - 1)p_j}}{1 + \mathbf{a}(p_j)} \right] \left[ \prod_{j=|\alpha^+|+1}^m (-1)^{\tilde{\beta}_j^- - 1} \frac{e^{-i(\tilde{\beta}_j^- - 1)p_j}}{1 + \bar{\mathbf{a}}(p_j)} \right]. \tag{4.16}
 \end{aligned}$$

Wir schreiben nun das Vandermonde-artige Produkt  $\prod_{1 \leq j < k \leq m} (e^{ip_k} - e^{ip_j})$  als Summe über Permutationen und vereinfachen den Ausdruck. Es folgt

$$\begin{aligned}
 D_{N_{\text{hom}}}^{XX} &= (-1)^{\frac{m(m-1)}{2}} \left[ \prod_{j=|\alpha^+|+1}^m (-1)^{\tilde{\beta}_j^- - 1} \right] \sum_{v \in \mathfrak{S}^m} \text{sgn}(v) \\
 &\times \left[ \prod_{j=1}^{|\alpha^+|} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dp}{2\pi} \frac{e^{-(\tilde{\alpha}_j^+ - v(j))p}}{1 + \mathbf{a}(p)} \right] \left[ \prod_{j=|\alpha^+|+1}^m \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dp}{2\pi} \frac{e^{-(\tilde{\beta}_j^- - v(j))p}}{1 + \bar{\mathbf{a}}(p)} \right]. \tag{4.17}
 \end{aligned}$$

Die Summen über Permutationen schreiben wir jetzt wieder als Determinanten und erhalten

**Theorem 2.** Die homogene Form der Integraldarstellung der Dichtematrixelemente im XX-Limes lautet

$$D_{N_{\text{hom}}}^{XX} = \left[ \prod_{j=1}^{|\alpha^+|} (-1)^{\beta_j^+ + j} \right] \det [B_{jk}(p)]_{j,k=1, \dots, m} \tag{4.18}$$

mit

$$B_{jk}(p) = \begin{cases} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dp}{2\pi} \frac{\exp\{-i(\alpha_j^+ - k)p\}}{1 + \mathbf{a}(p)} & \text{für } j = 1, \dots, |\alpha^+| \\ \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dp}{2\pi} \frac{\exp\{-i(\beta_{j-|\alpha^+|}^- - k)p\}}{1 + \bar{\mathbf{a}}(p)} & \text{für } j = |\alpha^+| + 1, \dots, m. \end{cases} \tag{4.19}$$

## 4.2. Dichtematrix im inhomogenen Fall

Auch im inhomogenen Fall ist die Integraldarstellung aus [22] der Ausgangspunkt. Führen wir dort den  $XX$ -Limes durch, ohne die Inhomogenitäten gegen Null gehen zu lassen, erhalten wir

$$\begin{aligned}
 D_N^{XX} = & (-i)^{\frac{m(m-1)}{2}} \left[ \prod_{j=1}^m \int_{\mathcal{C}} \frac{d\omega}{2\pi i} \right] \left[ \prod_{j=1}^{|\alpha^+|} \frac{\prod_{k=1}^{\tilde{\alpha}_j^+ - 1} -i \operatorname{ch}(\omega_j - \xi_k) \prod_{k=\tilde{\alpha}_j^+ + 1}^m \operatorname{sh}(\omega_j - \xi_k)}{1 + \mathbf{a}(\omega_j)} \right] \\
 & \times \left[ \prod_{j=|\alpha^+|+1}^m \frac{\prod_{k=1}^{\tilde{\beta}_j^- - 1} i \operatorname{ch}(\omega_j - \xi_k) \prod_{k=\tilde{\beta}_j^- + 1}^m \operatorname{sh}(\omega_j - \xi_k)}{1 + \bar{\mathbf{a}}(\omega_j)} \right] \\
 & \times \left[ \frac{\prod_{1 \leq j < k \leq m} \operatorname{sh}(\omega_k - \omega_j) \operatorname{sh}(\xi_j - \xi_k)}{\prod_{j,k=1}^m \operatorname{sh}(\omega_j - \xi_k) \operatorname{ch}(\omega_j - \xi_k)} \right]. \tag{4.20}
 \end{aligned}$$

Diesen Ausdruck transformieren wir mit (4.12) unter Benutzung von (4.13) auf die erste Brillouin-Zone

$$\begin{aligned}
 D_N^{XX} = & (-i)^{\frac{m(m-1)}{2}} \left[ \prod_{j=1}^m \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dp_j}{2\pi i} \right] \left[ \prod_{j=1}^{|\alpha^+|} \frac{1}{1 + \mathbf{a}(p_j)} \right] \left[ \prod_{j=|\alpha^+|+1}^m \frac{1}{1 + \bar{\mathbf{a}}(p_j)} \right] \\
 & \times \left[ \prod_{j=1}^{|\alpha^+|} \frac{(-i)^{\tilde{\alpha}_j^+ - 1}}{\frac{1}{\cos(q_{\tilde{\alpha}_j^+})} - \tan(q_{\tilde{\alpha}_j^+}) \sin(p_j)} \right] \left[ \prod_{j=|\alpha^+|+1}^m \frac{(i)^{\tilde{\beta}_j^- - 1}}{\frac{1}{\cos(q_{\tilde{\beta}_j^-})} - \tan(q_{\tilde{\beta}_j^-}) \sin(p_j)} \right] \\
 & \times \left[ \prod_{j=1}^{|\alpha^+|} \left( \prod_{k=1}^{\tilde{\alpha}_j^+ - 1} \frac{1}{(-i)e^{ip_j} - \tan(q_k)} \right) \left( \prod_{k=\tilde{\alpha}_j^+ + 1}^m \frac{1}{1 - (-i)e^{ip_j} \tan(q_k)} \right) \right] \\
 & \times \left[ \prod_{j=|\alpha^+|+1}^m \left( \prod_{k=1}^{\tilde{\beta}_j^- - 1} \frac{1}{(-i)e^{ip_j} - \tan(q_k)} \right) \left( \prod_{k=\tilde{\beta}_j^- + 1}^m \frac{1}{1 - (-i)e^{ip_j} \tan(q_k)} \right) \right] \\
 & \times \left[ \prod_{1 \leq j < k \leq m} (e^{ip_k} - e^{ip_j}) (\tan(q_k/2) - \tan(q_j/2)) \frac{\cos(q_k + q_j) + 1}{\sin(q_k) - \sin(q_j)} \right]. \tag{4.21}
 \end{aligned}$$

Dabei sind die  $q_j$  die ebenfalls gemäß (4.12) transformierten Inhomogenitäten. Dieser Ausdruck lässt sich wieder mit Hilfe der Vandermonde-Determinante etwas kompakter schreiben. Wir erhalten als Ergebnis das

**Theorem 3.** Die Dichtematrixelemente der XX-Kette lauten im inhomogenen Fall

$$\begin{aligned}
 D_N^{XX} &= (-1)^{\frac{m(m-1)}{2}} \left[ \prod_{j=1}^m \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dp_j}{2\pi} \right] \left[ \prod_{1 \leq j < k \leq m} \frac{\cos(\frac{q_k - q_j}{2})}{\cos(q_k/2) \cos(q_j/2)} \right] \det [P(p_j)]_{j,k=1,\dots,n} \\
 &\times \left[ \prod_{j=1}^{|\alpha^+|} \frac{\cos(q_{\tilde{\alpha}_j^+})}{1 - \sin(q_{\tilde{\alpha}_j^+}) \sin(p_j)} \left( \prod_{k=1}^{\tilde{\alpha}_j^+ - 1} \frac{1}{1 - ie^{-ip_j} \tan(q_k)} \right) \left( \prod_{k=\tilde{\alpha}_j^+ + 1}^m \frac{1}{1 + ie^{ip_j} \tan(q_k)} \right) \right] \\
 &\times \left[ \prod_{j=|\alpha^+|+1}^m \frac{(-1)^{\tilde{\beta}_j^- - 1} \cos(q_{\tilde{\beta}_j^-})}{1 - \sin(q_{\tilde{\beta}_j^-}) \sin(p_j)} \left( \prod_{k=1}^{\tilde{\beta}_j^- - 1} \frac{1}{1 - ie^{-ip_j} \tan(q_k)} \right) \left( \prod_{k=\tilde{\beta}_j^- + 1}^m \frac{1}{1 + ie^{ip_j} \tan(q_k)} \right) \right]
 \end{aligned} \tag{4.22}$$

mit

$$[P(p_j)]_{jk} = \begin{cases} \frac{e^{-i(\tilde{\alpha}_j^+ - k)p_j}}{1 + \bar{a}(p_j)} & j = 1, \dots, |\alpha^+| \\ \frac{e^{-i(\tilde{\beta}_j^- - k)p_j}}{1 + \bar{a}(p_j)} & j = |\alpha^+| + 1, \dots, m \end{cases} . \tag{4.23}$$

### 4.3. Spezialfälle

Wir werden die obigen Ergebnisse für die Dichtematrixelemente der XX-Kette noch in einigen Spezialfällen betrachten.

#### 4.3.1. Die inhomogene *Emptiness Formation Probability*

Zuerst betrachten wir die *Emptiness Formation Probability* im inhomogenen Fall. Es sind zwei Typen zu unterscheiden:

1.  $m$  benachbarte Spins zeigen nach unten.  $\Phi_- : \alpha_j = \beta_j = 2 \forall j \Rightarrow \tilde{\beta}_j = j$
2.  $m$  benachbarte Spins zeigen nach oben.  $\Phi_+ : \alpha_j = \beta_j = 1 \forall j \Rightarrow \tilde{\alpha}_j = m - j + 1 \Rightarrow \alpha_j = j$

Beide Typen unterscheiden sich lediglich im Vorzeichen und in der verwendeten Hilfsfunktion. Wir geben daher hier nur  $\Phi_-$  an:

$$\begin{aligned}
 \Phi_- &= \left[ \prod_{j=1}^m \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dp_j}{2\pi} \right] \left[ \prod_{1 \leq j < k \leq m} \frac{\cos(\frac{q_k - q_j}{2})}{\cos(q_k/2) \cos(q_j/2)} \right] \det \left[ \frac{e^{-i(j-k)p_j}}{1 + \bar{a}(p_j)} \right] \\
 &\times \left[ \prod_{j=1}^m \frac{\cos(q_j)}{1 - \sin(q_j) \sin(p_j)} \left( \prod_{k=1}^{j-1} \frac{1}{1 - ie^{-ip_j} \tan(q_k)} \right) \left( \prod_{k=j+1}^m \frac{1}{1 + ie^{ip_j} \tan(q_k)} \right) \right] .
 \end{aligned} \tag{4.24}$$

### 4.3.2. Tieftemperaturimes

Wir betrachten den Limes  $T \rightarrow 0$  im homogenen Ausdruck des Trotter-Limes. Dort gilt

$$\mathbf{a}(p) = \exp \left[ \frac{4J \cos(p) - h}{T} \right]. \quad (4.25)$$

Wir müssen nun Fallunterscheidungen treffen, da  $1 + \mathbf{a}$  für  $T \rightarrow 0$  je nach Vorzeichen im Exponenten der  $e$ -Funktion gegen Null oder Eins geht.

1.  $h > 0$ ,  $|h| \leq 4J$ : Hier ist

$$\lim_{T \rightarrow 0^+} \mathbf{a}(p) = 0 \quad , \quad \lim_{T \rightarrow 0^+} \bar{\mathbf{a}}(p) = \infty. \quad (4.26)$$

Es folgt so

$$D_{N_{\text{hom}}}^{XX} = \left[ \prod_{j=1}^{|\alpha^+|} (-1)^{\beta_j^+ - j} \right] \begin{cases} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dp}{2\pi} e^{-i(\alpha_j^+ - k)p} = \delta_{\alpha_j^+ k} & \text{für } j = 1, \dots, |\alpha^+| \\ 0 & \text{für } j = |\alpha^+| + 1, \dots, m \end{cases}. \quad (4.27)$$

2.  $h < 0$ ,  $|h| \leq 4J$ : Hier folgt analog

$$D_{N_{\text{hom}}}^{XX} = \left[ \prod_{j=1}^{|\alpha^+|} (-1)^{\beta_j^+ - j} \right] \begin{cases} 0 & \text{für } j = 0, \dots, |\alpha^+| \\ \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dp}{2\pi} e^{-i(\beta_j^- - k)p} = \delta_{\beta_j^- k} & \text{für } j = |\alpha^+| + 1, \dots, m \end{cases}. \quad (4.28)$$

3.  $h < 4J$ : Hier gibt es einen Vorzeichenwechsel in der Hilfsfunktion in Abhängigkeit von  $p$ . Wir definieren  $p_0 := \arccos(\frac{h}{4J})$ . Damit folgt

$$\begin{aligned} |p| > |p_0| : & \quad h - 4J \cos(p) > 0, \quad 4J \cos(p) - h < 0 \\ |p| < |p_0| : & \quad h - 4J \cos(p) < 0, \quad 4J \cos(p) - h > 0, \end{aligned} \quad (4.29)$$

und wir erhalten als Ergebnis

$$D_{N_{\text{hom}}}^{XX} = \left[ \prod_{j=1}^{|\alpha^+|} (-1)^{\beta_j^+ - j} \right] \begin{cases} \frac{\sin((\alpha_j^+ - k)p_0)}{(k - \alpha_j^+)\pi} - \delta_{\alpha_j^+ k} & \text{für } j = 1, \dots, |\alpha^+| \\ \frac{\sin((\beta_j^- - k)p_0)}{(\beta_j^- - k)\pi} & \text{für } j = |\alpha^+| + 1, \dots, m \end{cases}. \quad (4.30)$$

## 4.4. Verbindung zu Korrelationsfunktionen

In diesem Abschnitt werden wir kurz zeigen, wie die Integraldarstellungen der Dichtematrixelemente benutzt werden können, um Korrelationsfunktionen explizit auszurechnen.

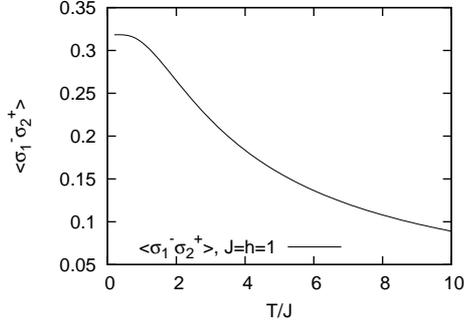


Abbildung 4.2.:  $\langle \sigma_1^- \sigma_{m+1}^+ \rangle$  für  $m = 1$ .

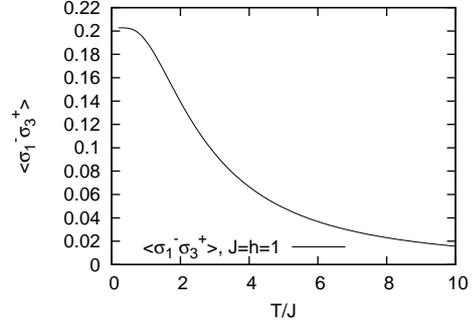


Abbildung 4.3.:  $\langle \sigma_1^- \sigma_{m+1}^+ \rangle$  für  $m = 2$ .

Dazu betrachten wir das einfache Beispiel  $\langle \sigma_1^- \sigma_2^+ \rangle$ . Im homogenen Fall gilt für endliche Trotter-Zahl

$$\langle \sigma_1^- \sigma_2^+ \rangle_N = \frac{\langle \Psi_0 | B(0) C(0) | \Psi_0 \rangle}{\Lambda_0^2 \langle \Psi_0 | \Psi_0 \rangle} = D_{N21}^{12}. \quad (4.31)$$

Die Anwendung von Theorem 4.1 liefert dann im Trotterlimes  $N \rightarrow \infty$

$$\langle \sigma_1^- \sigma_2^+ \rangle = \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dp_1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dp_2}{2\pi} \frac{e^{ip_1} - e^{ip_2}}{(1 + \mathbf{a}(p_1))(1 + \bar{\mathbf{a}}(p_2))}. \quad (4.32)$$

Der Trotter-Limes ist hier lediglich in der Hilfsfunktion zu berücksichtigen, für die das Ergebnis (4.25) eingesetzt wird. Gleichung (4.32) lässt sich nun numerisch lösen; dieses Ergebnis sowie das numerische Ergebnis für  $m = 2$  sind in den Abbildungen 4.2 und 4.3 dargestellt. Es ist deutlich sichtbar, dass die Korrelationen für größere Abstände schwächer werden und mit ansteigender Temperatur weiter abnehmen.

In Kapitel 7 werden wir dieses exakte Ergebnis mit der asymptotischen Entwicklung vergleichen.

**Teil II.**

**Asymptotik von  
Korrelationsfunktionen**



## 5. Bethe-Ansatz

In diesem Teil der Arbeit beschäftigen wir uns mit der Asymptotik der Korrelationsfunktionen im  $XX$ -Limes. Dazu benutzen wir die so genannte Formfaktorentwicklung, die wir für  $\langle \sigma^z \sigma^z \rangle$ - und  $\langle \sigma^- \sigma^+ \rangle$ -Korrelationsfunktionen durchführen werden.

Als Vorarbeit müssen wir uns zuerst detailliert mit dem Bethe-Ansatz im  $XX$ -Limes beschäftigen und die Lage der Bethe-Ansatz-Zahlen sowie die Eigenschaften der Eigenwerte der Quanten-Transfermatrix und die davon abhängenden Korrelationslängen untersuchen. Dies geschieht in diesem Kapitel.

### 5.1. Lösung der Bethe-Ansatz-Gleichungen

Für die  $XXZ$ -Kette werden die Bethe-Ansatz-Zahlen durch das gekoppelte Gleichungssystem

$$\frac{a(\lambda_j)}{d(\lambda_j)} = \left[ \prod_{\substack{k=1 \\ k \neq j}}^M \frac{\text{sh}(\lambda_j - \lambda_k + \eta)}{\text{sh}(\lambda_j - \lambda_k - \eta)} \right], \quad j = 1, \dots, M \quad (5.1)$$

bestimmt. Wenden wir  $\eta = i\pi/2$  mit  $\Delta = \text{ch}(\eta) = 0$  auf (5.1) an, so erhalten wir die Bethe-Ansatz-Gleichungen im  $XX$ -Limes für endliche Trotter-Zahl:

$$a(\lambda) = [i \tanh(\lambda + \beta/N)]^{N/2} e^{\frac{h}{2T}}, \quad d(\lambda) = [-i \tanh(\lambda - \beta/N)]^{N/2} e^{-\frac{h}{2T}} \quad (5.2)$$

$$\Rightarrow \left[ -\frac{\tanh(\lambda - \frac{\beta}{N})}{\tanh(\lambda + \frac{\beta}{N})} \right]^{\frac{N}{2}} e^{-\frac{h}{T}} = (-1)^{M-1}. \quad (5.3)$$

An dieser Stelle ist anzumerken, dass die Bethe-Ansatz-Gleichungen entkoppeln und sich somit für jede Bethe-Ansatz-Zahl einzeln lösen lassen. Um dies auszunutzen definieren wir zuerst zwei Hilfsfunktionen:

$$\mathbf{a}(\lambda) \equiv \mathbf{a}_0(\lambda) = (-1)^{\frac{N}{2}} \frac{d(\lambda)}{a(\lambda)} = \left( \frac{\tanh(\lambda - \frac{\beta}{N})}{\tanh(\lambda + \frac{\beta}{N})} \right)^{\frac{N}{2}} e^{-\frac{h}{T}}, \quad \text{für } N/2 - M \text{ gerade}, \quad (5.4)$$

$$\mathbf{a}_1(\lambda) = -\mathbf{a}_0(\lambda), \quad \text{für } N/2 - M \text{ ungerade}, \quad (5.5)$$

womit sich die Bethe-Ansatz-Gleichungen ergeben als

$$\mathbf{a}_0(\lambda) = -1 \quad \text{für } N/2 - M \text{ gerade}, \quad (5.6)$$

$$\mathbf{a}_0(\lambda) = +1 \quad \text{für } N/2 - M \text{ ungerade}. \quad (5.7)$$

Mit  $\text{sh}(\frac{2\beta}{N}) =: i \text{sh}(2\lambda) \tan(k)$  lässt sich  $\mathbf{a}(\lambda)$  ausdrücken durch

$$\mathbf{a}(\lambda) = e^{-ik(\lambda)N - \frac{h}{T}}. \quad (5.8)$$

Wir wollen nun die Gleichungen (5.6), (5.7) lösen, um über die Parametrisierung von  $k$  in  $n$  Lösungen für die Bethe-Ansatz-Zahlen  $\lambda$  zu bestimmen. Wir unterscheiden dabei zwei Fälle:

1.  $N/2 - M$  gerade:

$$\begin{aligned} \mathbf{a}(\lambda) = -1 &\Leftrightarrow -ikN - \frac{h}{T} = -i(2n-1)\pi \\ \Leftrightarrow k &= (2n+1)\frac{\pi}{N} + \frac{ih}{NT}, \quad n = 0, 1, \dots, \frac{N}{2} - 1 \end{aligned} \quad (5.9)$$

2.  $N/2 - M$  ungerade:

$$\begin{aligned} \mathbf{a}(\lambda) = 1 &\Leftrightarrow -ikN - \frac{h}{T} = -2n\pi i \\ \Leftrightarrow k &= 2n\frac{\pi}{N} + \frac{ih}{NT}, \quad n = 0, 1, \dots, \frac{N}{2} - 1 \end{aligned} \quad (5.10)$$

Die Nummerierung  $n = 0, 1, \dots, N/2$  entspricht den üblichen Konventionen und erzeugt alle möglichen  $N/2$ -vielen Werte für  $\lambda$  mit

$$\text{sh}(2\lambda) = -i \text{sh}(\frac{2\beta}{N}) \cot(k). \quad (5.11)$$

Mit der eingangs eingeführten Skalierung  $\beta = \frac{2J \text{sh}(\eta)}{T}$  und  $\eta = \frac{i\pi}{2}$  folgt schließlich

$$\text{sh}(2\lambda) = \sin(\frac{4J}{NT}) \cot(k). \quad (5.12)$$

Diese Gleichung bestimmt die einzelnen Bethe-Ansatz-Zahlen im  $XX$ -Limes in Abhängigkeit von  $k$ , wobei  $k$  gemäß (5.9, 5.10) definiert ist.

## 5.2. Eigenschaften der Bethe-Ansatz-Zahlen

Um in den Kapiteln 6 und 7 die Formfaktorentwicklung bestimmter Korrelationsfunktionen betrachten zu können, ist es zunächst nötig, Anregungen der  $XX$ -Kette zu analysieren. Diese Anregungen hängen in expliziter Form von speziellen Bethe-Ansatz-Zahlen ab, die so genannte Teilchen- bzw. Lochlösungen bilden.

Wir werden im Folgenden detailliert auf die Eigenschaften der Bethe-Ansatz-Zahlen und insbesondere auf ihre Lage in der komplexen Ebene eingehen.

### Grundsätzliches zur Symmetrie

Wir wollen zunächst zeigen, welchen Symmetrieeigenschaften die Bethe-Ansatz-Zahlen genügen. Dazu betrachten wir die LHS von (5.12). Da  $\text{sh}(2\lambda)$  periodisch mit Periode  $i\pi$  ist, beschränken wir uns auf den Streifen  $S = \{\lambda \in \mathbb{C} \mid -\frac{\pi}{2} \leq \text{Im } \lambda < \frac{\pi}{2}\}$ . Die Abbildung  $S \rightarrow \mathbb{C}$ ,  $\lambda \rightarrow \text{sh}(2\lambda)$  ist eine 1-zu-2-Abbildung, da jeder Punkt aus  $\mathbb{C}$  wegen

$$\text{sh}(2(\frac{i\pi}{2} - \lambda)) = \text{sh}(i\pi - 2\lambda) = -\text{sh}(-2\lambda) = \text{sh}(2\lambda) \quad (5.13)$$

zwei Urbilder hat. Geometrisch beschreibt dies eine Punktspiegelung in  $\pm \frac{i\pi}{4}$ . Diese Punkte sind somit Verzweigungspunkte der Inversen von  $\text{sh}(2\lambda)$ . Daher können wir uns im Weiteren auf den Streifen  $-\frac{\pi}{4} < \text{Im } \lambda < \frac{\pi}{4}$  beschränken. Bei der späteren Betrachtung der Nullstellen von  $1 + \mathbf{a}(\lambda)$ , werden wir zusätzlich die Linien  $\text{Im } \lambda = \pm \frac{\pi}{4}$  hinzunehmen sowie  $\text{Re } \lambda > 0$  annehmen.

#### 5.2.1. Zerlegung in Real- und Imaginärteil

Um in Abschnitt 5.3 die Korrelationslängen, die das asymptotische Verhalten der Korrelationsfunktionen bestimmen, nach Betrag und Phase berechnen zu können, muss zuerst der Ausdruck für die Bethe-Ansatz-Zahlen in Real- und Imaginärteil zerlegt werden.

Betrachten wir zunächst wieder die LHS von (5.12). Mit  $u = \text{Re } \lambda$  und  $v = \text{Im } \lambda$  folgt:

$$\text{sh}(2\lambda) = \text{sh}(2u) \cos(2v) + \text{ich}(2u) \sin(2v). \quad (5.14)$$

Dies führt auf elliptische Koordinaten, die eine Ellipse mit Brennpunkten bei  $\pm i$  beschreiben. Es gilt

$$\begin{aligned} |\text{sh}(2\lambda) - i| \pm |\text{sh}(2\lambda) + i| &= \text{ch}(2u) - \sin(2v) \pm (\text{ch}(2u) + \sin(2v)) \\ &= \begin{cases} 2\text{ch}(2u) & \text{für } + \\ -2\sin(2v) & \text{für } - \end{cases}. \end{aligned} \quad (5.15)$$

Der obere Term bezieht sich auf das positive Vorzeichen, während der untere Term das negative Vorzeichen berücksichtigt. Diese Beziehung nutzen wir nun aus, indem wir die RHS von (5.12) betrachten. Wir schreiben

$$\cot(x + iy) = \frac{\sin(2x) - \text{ish}(2y)}{\text{ch}(2y) - \cos(2x)} \quad (5.16)$$

und zerlegen  $k$  durch  $k = q + ip$  mit

$$p = \frac{h}{NT}, \quad q = \begin{cases} (2n+1)\frac{\pi}{N} & , \quad N/2 - M \text{ gerade} \\ 2n\frac{\pi}{N} & , \quad N/2 - M \text{ ungerade} \end{cases}. \quad (5.17)$$

Mit  $\kappa = \frac{4J}{NT}$  folgt dann

$$\operatorname{sh}(2u) \cos(2v) = \frac{\sin(\kappa) \sin(2q)}{\operatorname{ch}(2p) - \cos(2q)}, \quad (5.18)$$

$$\operatorname{ch}(2u) \sin(2v) = -\frac{\sin(\kappa) \operatorname{sh}(2p)}{\operatorname{ch}(2p) - \cos(2q)}. \quad (5.19)$$

Dies setzen wir in (5.15) ein und erhalten für den Imaginär- und Realteil von  $\lambda = u + iv$

$$\left. \begin{array}{l} \sin(2v) \\ \operatorname{ch}(2u) \end{array} \right\} = \frac{1}{2} \underbrace{\left\{ \left[ \alpha^2 + \frac{\beta_-}{x} \right]^{1/2} \mp \left[ \alpha^2 + \frac{\beta_+}{x} \right]^{1/2} \right\}}_{=: f_{\mp}(x)}, \quad (5.20)$$

mit

$$\alpha := \cos(\kappa), \quad \beta_{\pm} := 2 \sin(\kappa) [\sin(\kappa) \operatorname{ch}(2p) \pm \operatorname{sh}(2p)], \quad x := \operatorname{ch}(2p) - \cos(2q). \quad (5.21)$$

Wir haben damit  $\lambda = u + iv$  explizit in Real- und Imaginärteil aufgespalten und in der komplexen Variablen  $k = q + ip$  dargestellt.

### 5.2.2. Die Trajektorie der Bethe-Ansatz-Zahlen

Wir wollen nun die durch (5.20) und (5.21) bestimmte Trajektorie, auf der sich die Bethe-Ansatz-Zahlen aufhalten können, näher diskutieren. Dazu werden wir zuerst die Monotonie des Realteils untersuchen und anschließend den Start- und Endpunkt der Trajektorie betrachten. Dann stehen genug Informationen zur Verfügung, um die Kurven, auf denen die Bethe-Ansatz-Zahlen liegen, zu skizzieren.

#### Monotonie

In diesem Abschnitt wollen wir zeigen, dass der Realteil der Bethe-Ansatz-Zahlen als kontinuierliche Funktion von  $q$  ein Extremum besitzt. Dazu werden wir die Ausdrücke (5.20) kurz diskutieren.

Da  $\cos(2q)$  in  $[0, \pi/2]$  monoton fällt, ist  $x$  eine monoton wachsende Funktion von  $q$  für  $q \in [0, \pi/2]$ . Da auch  $\sin(2v)$  monoton in  $v$  für  $v \in [-\pi/4, \pi/4]$  ist, sind die Monotonieeigenschaften von  $v$  als Funktion von  $q$  die gleichen wie die von  $\sin(2v)$  als Funktion von  $x$ . Es genügt daher, nur  $f_-(x)$  aus (5.20) genauer zu betrachten:

Zunächst gilt

$$\begin{aligned} \beta_+ - \beta_- &= 4 \sin(\kappa) \operatorname{sh}(2p) \geq 0 \text{ für } 0 \leq \kappa \leq \pi \\ \kappa = \frac{4J}{NT} \leq \pi &\Leftrightarrow N \geq \frac{4J}{\pi T}. \end{aligned} \quad (5.22)$$

Daraus folgt, dass

$$f_-(x) \leq 0 \Rightarrow -\frac{\pi}{4} \leq v \leq 0. \quad (5.23)$$

Es lässt sich nun zeigen, dass

$$f'_-(x) > 0 \text{ für } N > \frac{4J}{\pi T}, \forall x > 0. \quad (5.24)$$

Ist  $N$  also groß genug ( $N > \frac{4J}{\pi T}$ ), so ist der Imaginärteil  $v$  eine monotone Funktion von  $q \in [0, \frac{\pi}{2}]$ .

Analog gilt, dass  $f_+(x) > 0$  für alle  $x > 0$ . Um die Extremaleigenschaften von  $f_+(x)$  zu untersuchen, betrachten wir nun

$$f'_+(x) = -\frac{1}{2x^{3/2}} \left\{ \frac{\beta_+}{(\alpha^2 x + \beta_+)^{1/2}} + \frac{\beta_-}{(\alpha^2 x + \beta_-)^{1/2}} \right\}, \quad (5.25)$$

und nehmen an, dass es ein  $x_0 > 0$  mit  $f'_+(x_0) = 0$  gäbe. Dann folgt für  $N > \frac{4J}{\pi T}$ , dass  $f'_+(x)$  höchstens eine Nullstelle für  $x_0 > 0$  hat. Setzen wir die Definition ein, so folgt aus  $x_0 = \text{ch}(2p) - \cos(2q_0)$ , dass  $u$  als Funktion von  $q$  genau dann ein Extremum hat, wenn

$$\frac{1}{\cos^2(\kappa) \text{ch}(2p)} < 1 \quad (5.26)$$

gilt. Aus den Definitionen von  $p$  und  $q$  ist schließlich ersichtlich, dass es für hinreichend große Werte von  $h$  immer ein solches Extremum in  $u$  geben muß.

### Betrachtung von Start- und Endpunkt der Trajektorie

Wir betrachten unter der Annahme, dass  $N > \frac{4J}{\pi T}$  gilt, die Funktionen  $u(q)$  und  $v(q)$  mit zunächst kontinuierlichem  $q \in [0, \frac{\pi}{2}]$ .

Am Start-Punkt gilt  $q = 0$ . Aus (5.20) folgt dann:

$$v = \begin{cases} -\frac{\pi}{4} & \text{für } \sin(\kappa) \coth(p) > 1 \\ -\frac{1}{2} \arcsin(\sin(\kappa) \coth(p)) > -\frac{\pi}{4} & \text{für } \sin(\kappa) \coth(p) < 1 \end{cases}, \quad (5.27)$$

$$u = \begin{cases} \frac{1}{2} \text{arch}(\sin(\kappa) \coth(p)) > 0 & \text{für } \sin(\kappa) \coth(p) > 1 \\ 0 & \text{für } \sin(\kappa) \coth(p) < 1 \end{cases}. \quad (5.28)$$

Der Fall  $\sin(\kappa) \coth(p) = 1$  definiert ein kritisches Magnetfeld  $h_c$ , welches gerade die beiden zu unterscheidenden Fälle trennt:

$$p_c = \frac{h_c}{NT} = \text{arth}(\sin(\kappa)) \Leftrightarrow h_c = NT \text{arth} \left( \sin \left( \frac{4J}{NT} \right) \right) \sim 4J. \quad (5.29)$$

Dies ist das bekannte kritische Feld der XX-Kette.

Für den End-Punkt mit  $q = \frac{\pi}{2}$  folgt

$$\begin{aligned} v &= -\frac{1}{2} \arcsin(\sin(\kappa) \tanh(p)) > -\frac{\pi}{4} \\ u &= 0. \end{aligned} \quad (5.30)$$

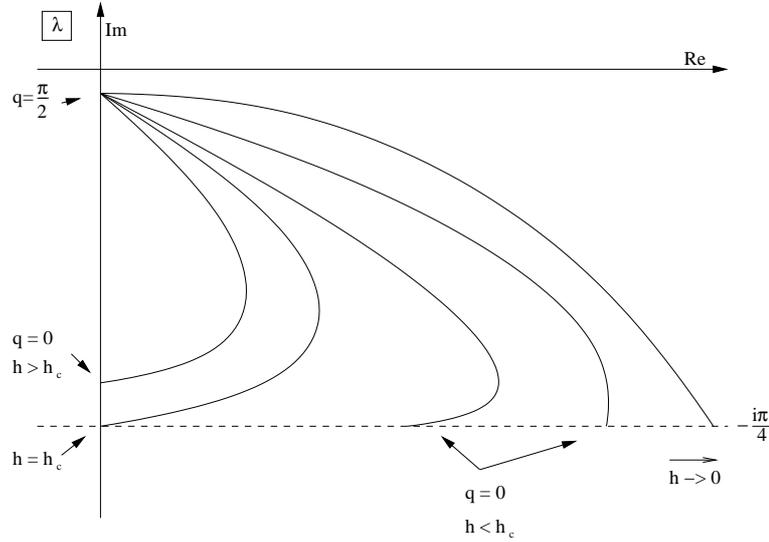


Abbildung 5.1.: Skizze der Trajektorie der Bethe-Ansatz-Zahlen. Beachte die unterschiedlichen Startpunkte für  $h < h_c$  und  $h > h_c$  sowie die Ausprägung des Maximums in  $u$  für  $1/(\cos^2(\kappa)\text{ch}(2p)) < 1$ .

Dies liefert genug Informationen über die Kurven, auf denen die Bethe-Ansatz-Zahlen liegen. Aufgrund der Symmetrie ist es ausreichend, den Bereich  $-\frac{\pi}{4} \leq v < 0$ ,  $u > 0$  zu zeichnen (vgl. Abb. 5.1).

Diese Informationen helfen uns dabei, die Teilchen-Loch-Paare, welche die führenden Anregungen charakterisieren, in den Kapiteln 6 und 7 zu identifizieren. Wir erinnern uns daran, dass  $q$  wie folgt quantisiert ist:

$$q = \begin{cases} (2n+1)\frac{\pi}{N}, & n = 0, 1, \dots, \frac{N}{2} - 1, N/2 - M \text{ gerade} \\ 2n\frac{\pi}{N}, & n = 0, 1, \dots, \frac{N}{2} - 1, N/2 - M \text{ ungerade.} \end{cases} \quad (5.31)$$

Im zweiten Fall ist  $q = 0$  eine Bethe-Ansatz-Zahl. Wir zeigen nun, dass *nur* diese Bethe-Ansatz-Zahl für  $h \leq h_c$  auf der Linie  $\text{Im } \lambda = -i\pi/4$  liegen kann und somit alle anderen Bethe-Ansatz-Zahlen getrennt von dieser Linie auftreten. Dies ist wichtig, da später Integrationskonturen über diese Linie laufen sollen. Da  $v(q)$  monoton ist, genügt es  $q = \frac{\pi}{N}$  für  $N/2 - M$  gerade bzw.  $q = \frac{2\pi}{N}$  für  $N/2 - M$  ungerade zu betrachten. Mit  $q = \frac{a\pi}{N}$ ,  $a = 1, 2$  und  $v_a = v(q)$  folgt unter Benutzung von

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{\beta_{\pm}}{x} = \frac{8J(2J \pm h)}{h^2 + (a\pi T)^2} \quad (5.32)$$

und  $r := \frac{h}{2J}$ ,  $s := \frac{a\pi T}{2J}$  der Ausdruck

$$\sin(2v_a^{\infty}) = \lim_{N \rightarrow \infty} \sin(2v_a) = \frac{1}{2} \left\{ \left[ 1 + \frac{4(1-r)}{r^2 + s^2} \right]^{1/2} - \left[ 1 + \frac{4(1+r)}{r^2 + s^2} \right]^{1/2} \right\} \quad (5.33)$$

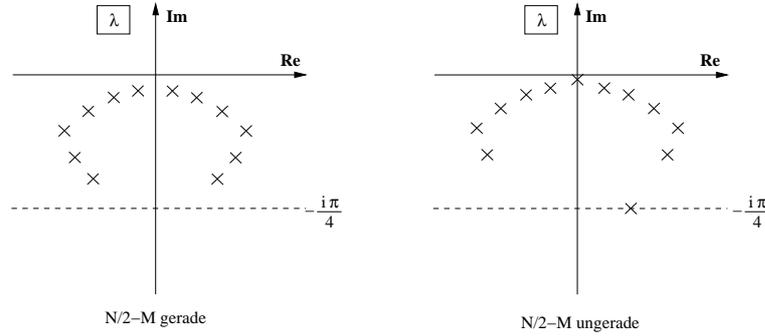


Abbildung 5.2.: Skizze zweier exemplarischer Bethe-Ansatz-Zahl-Verteilungen für  $N/2 - M$  gerade bzw. ungerade bei  $h < h_c$ . Beachte, dass nur für  $N/2 - M$  ungerade genau eine Bethe-Ansatz-Zahl auf der Linie  $\text{Im } \lambda = -i\pi/4$  liegt.

mit  $r, s \in \mathbb{R}$ . Wir betrachten nun obigen Ausdruck in Polarkoordinaten

$$r = r_0 \cos \varphi, \quad s = r_0 \sin \varphi, \quad r_0 \in [0, \infty), \quad \varphi \in [0, \frac{\pi}{2}], \quad (5.34)$$

$$2 \sin(2v_a^\infty) = \left(1 + \frac{4(1 - r_0 \cos \varphi)}{r_0^2}\right)^{1/2} - \left(1 + \frac{4(1 + r_0 \cos \varphi)}{r_0^2}\right)^{1/2} =: f(r_0, \varphi). \quad (5.35)$$

Daraus folgt direkt, dass  $\partial_\varphi f(r_0, \varphi) > 0$ ,  $\forall \varphi \in (0, \frac{\pi}{2})$  gilt.  $f(r_0, \varphi)$  wächst also monoton als Funktion von  $\varphi$ , und es genügt, die Funktion an den Rändern zu betrachten:

$$f(r_0, \frac{\pi}{2}) = 0$$

$$f(r_0, 0) = \begin{cases} -2 & \text{für } h < h_c \\ -\frac{4}{r} & \text{für } h > h_c \end{cases} \Rightarrow v_a^\infty = \begin{cases} -\frac{\pi}{4} & \text{für } h < h_c \\ -\arcsin(\frac{4J}{h}) & \text{für } h > h_c \end{cases}. \quad (5.36)$$

Wegen  $\varphi = 0$ ,  $r_0 \neq 0$  folgt, dass für alle  $h > h_c$  die Bethe-Ansatz-Zahlen mit  $q \neq 0$  von der Linie  $\text{Im } \lambda = -\frac{\pi}{4}$  getrennt liegen. Es ist dabei anzumerken, dass dies nicht für  $h < h_c$  und  $T = 0$  gilt. Vielmehr sammeln sich für  $T = 0$  unendlich viele Bethe-Ansatz-Zahlen an dieser Linie. Für  $h < h_c$  und  $T > 0$  liegen die Bethe-Ansatz-Zahlen jedoch wieder getrennt von der Linie  $\text{Im } \lambda = -\frac{\pi}{4}$ .

Wir konnten also zeigen, dass nur im Fall  $N/2 - M$  ungerade Bethe-Ansatz-Zahlen auf  $\text{Im } \lambda = -\pi/4$  liegen. Wir konnten weiterhin zeigen, dass dies nur auf eine Bethe-Ansatz-Zahl und nur im Fall  $h \leq h_c$  zutrifft und dass alle weiteren Bethe-Ansatz-Zahlen abseits dieser Linie auftreten (vgl. Skizze in Abb. 5.2).

### 5.3. Eigenwerte und Korrelationslängen

Wir möchten nun die Eigenwerte der QTM und die zugehörigen Korrelationslängen betrachten, um die Grundlage für die später erfolgende Identifizierung der führenden Korrelationslängen zu schaffen. Dazu betrachten wir zuerst eine geeignete Produktdarstellung

von  $\Lambda(\lambda)$ , aus der wir Integraldarstellungen für  $\ln \Lambda(\lambda)$  herleiten können, die dann die Korrelationslängen und auch die Freie Energie direkt zugänglich machen.

### 5.3.1. Produktdarstellung

Ausgangspunkt für die Herleitung der Produktdarstellung der Eigenwerte ist Gl. (2.47). Wenn wir dort  $\eta = \frac{i\pi}{2}$  setzen, erhalten wir unter Benutzung der Hilfsfunktion  $\mathbf{a}_0$  den Ausdruck

$$\Lambda(\lambda) = a(\lambda) \left[ \prod_{j=1}^M -i \coth(\lambda - \lambda_j) \right] (1 \pm \mathbf{a}_0(\lambda)), \quad (5.37)$$

wobei das positive Vorzeichen für  $N/2 - M$  gerade zu wählen ist, während das negative Vorzeichen für  $N/2 - M$  ungerade gilt. Wir definieren nun die Polynome

$$P_{\pm}(w, h) := \frac{e^{\frac{h}{2T}} [(wq - 1)(w + q)]^{N/2} \pm e^{-\frac{h}{2T}} [(wq + 1)(w - q)]^{N/2}}{[(wq + 1)(w + q)]^{N/2}}, \quad (5.38)$$

und erhalten mit  $w = e^{2\lambda}$  und  $q = e^{2\frac{\beta}{N}}$

$$\Lambda(\lambda) = i^{\frac{N}{2} - M} \left[ \prod_{j=1}^M \coth(\lambda - \lambda_j) \right] \frac{P_{\pm}(w, h)}{[(wq + 1)(w + q)]^{N/2}}. \quad (5.39)$$

Die  $P_{\pm}$  haben als Polynome vom Grad  $N$  für  $h > 0$  die folgenden nützlichen Symmetrieeigenschaften:

$$\begin{aligned} P_{\pm}\left(-\frac{1}{w}, h\right) &= \frac{(-1)^{N/2}}{w^N} P_{\pm}(w, h) \\ \Rightarrow: P_{\pm}(w_j, h) = 0 &\Leftrightarrow P_{\pm}\left(-\frac{1}{w_j}, h\right) = 0 \quad \forall h > 0. \end{aligned} \quad (5.40)$$

Außerdem verhält sich  $P_{\pm}$  asymptotisch wie  $P_{\pm}(w, h) \sim (e^{\frac{h}{2T}} \pm e^{-\frac{h}{2T}}) w^N q^{\frac{N}{2}}$ . Aus den Symmetrieeigenschaften und dem asymptotischen Verhalten folgt für  $N > \frac{4J}{\pi T}$

$$P_{\pm}(w, h) = (e^{\frac{h}{2T}} \pm e^{-\frac{h}{2T}}) q^{\frac{N}{2}} \prod_{j=1}^{N/2} (w - w_j^{\pm})(w + \frac{1}{w_j^{\pm}}), \quad (5.41)$$

wobei  $w_j^{\pm} = e^{2\lambda_j^{\pm}}$ . Wir betrachten nun die Bethe-Ansatz-Zahlen im Streifen  $-\frac{\pi}{4} < \text{Im } \lambda < 0$  bzw. auf dem Rand  $\text{Im } \lambda = -\frac{\pi}{4}$ ,  $\text{Re } \lambda > 0$  und bezeichnen diese mit  $\lambda_j^{\pm}$ ,  $j = 1, \dots, \frac{N}{2}$ . Damit lässt sich die Hilfsfunktion schreiben als

$$\begin{aligned} 1 \pm \mathbf{a}(\lambda) &= (1 \pm e^{-\frac{h}{T}}) \prod_{j=1}^{N/2} \frac{q(w - w_j^{\pm})(w + 1/w_j^{\pm})}{(wq - 1)(w + q)} \\ &= (1 \pm e^{-\frac{h}{T}}) \prod_{j=1}^{N/2} \frac{\text{sh}(\lambda - \lambda_j^{\pm}) \text{ch}(\lambda + \lambda_j^{\pm})}{\text{sh}(\lambda + \frac{\beta}{N}) \text{ch}(\lambda - \frac{\beta}{N})}. \end{aligned} \quad (5.42)$$

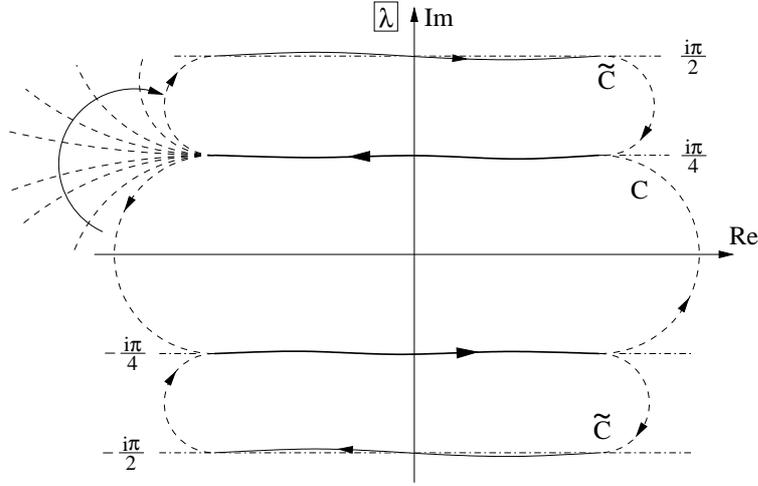


Abbildung 5.3.: Die Integrationskonturen  $\mathcal{C}$  und  $\tilde{\mathcal{C}}$ . Die Teilkonturen schließen sich im Unendlichen. Die verschiedenen Möglichkeiten die Konturen zu schließen sind oben links angedeutet.

Wenn wir nun einen gegebenen Eigenwert betrachten, so ist dieser durch eine Menge von Bethe-Ansatz-Zahlen  $\{\lambda_j\}_{j=1}^M := BR$  bestimmt. Sei außerdem  $PR$  definiert durch  $PR := \{\lambda_j \in BR | \lambda_j \notin \{\lambda_j^\pm\}\}$  und analog  $HR := \{\lambda_j \in \{\lambda_j^\pm\} | \lambda_j \notin BR\}$ . Die Elemente von  $PR$  nennen wir Teilchen, ihre Anzahl sei  $M_p$ , während wir die Elemente von  $HR$  Löcher nennen und ihre Anzahl  $M_h := N/2 - M + M_p$  betrage. Es seien nun  $\lambda_j^h \in HR$  verschiedene Löcher und  $\lambda_j^p \in PR$  verschiedene Teilchen. Dann folgt das

**Lemma 4.** Für den Eigenwert der QTM gilt die folgende Produktdarstellung:

$$\Lambda(\lambda) = (e^{\frac{h}{2T}} \pm e^{-\frac{h}{2T}}) \left\{ \frac{\prod_{j=1}^{M_h} i \tanh(\lambda - \lambda_j^h)}{\prod_{j=1}^{M_p} i \tanh(\lambda - \lambda_j^p)} \right\} \left[ \prod_{j=1}^{N/2} \frac{\text{ch}(\lambda - \lambda_j^\pm) \text{ch}(\lambda + \lambda_j^\pm)}{\text{ch}(\lambda - \frac{\beta}{N}) \text{ch}(\lambda + \frac{\beta}{N})} \right]. \quad (5.43)$$

### 5.3.2. Integraldarstellung für den Logarithmus des Eigenwertes

Wir benutzen nun die Produktdarstellung (5.43) um Integraldarstellungen von  $\ln \Lambda(\lambda)$  herzuleiten. Dabei ist es wieder nötig, die Fälle  $N/2 - M$  gerade bzw. ungerade zu unterscheiden.

#### $N/2 - M$ gerade

In diesem Fall ist das positive Vorzeichen in (5.42) und (5.43) zu wählen. Weiterhin ist  $M_h - M_p = N/2 - M$  gerade und die Nullstellen  $\lambda_j^+$  von  $1 + \mathfrak{a}(\lambda)$  liegen im Streifen  $-\frac{\pi}{4} < \text{Im } \lambda < 0$  (da (5.22) gelten soll). Mit  $\beta = \frac{2iJ}{\pi}$  und  $i \text{ch}(\lambda) = \text{sh}(\lambda + \frac{i\pi}{2})$  folgt dann aus

(5.42):

$$1 + \mathbf{a}(\lambda) = (1 + e^{-\frac{h}{T}}) \prod_{j=1}^{N/2} \frac{\operatorname{sh}(\lambda - \lambda_j^+) \operatorname{sh}(\lambda + \frac{i\pi}{2} + \lambda_j^+)}{\operatorname{sh}(\lambda + \frac{2iJ}{NT}) \operatorname{sh}(\lambda + \frac{i\pi}{2} - \frac{2iJ}{NT})}. \quad (5.44)$$

Wir benutzen nun die analytischen Eigenschaften der Hilfsfunktion, um eine Integraldarstellung für den Eigenwert herzuleiten. Es seien  $J, T, h > 0$  und  $N > \frac{4J}{\pi T}$ . Dann liegen keine Null- oder Polstellen auf der Linie  $\operatorname{Im} \lambda = -\frac{\pi}{4}$ . Vielmehr liegen die Nullstellen  $\lambda = \lambda_j^+$  und die Polstelle  $\lambda = -\frac{2iJ}{NT}$  im Streifen  $0 > \operatorname{Im} \lambda > -\frac{\pi}{4}$ , während sich die Nullstellen bei  $\lambda = -\frac{i\pi}{2} - \lambda_j^+$  und die Polstelle bei  $\lambda = -\frac{i\pi}{2} + \frac{2iJ}{NT}$  im Streifen  $-\frac{\pi}{4} > \operatorname{Im} \lambda > -\frac{\pi}{2}$  befinden. Für die logarithmische Ableitung von  $1 + \mathbf{a}_0$  folgt dann

$$\frac{\mathbf{a}'_0(\lambda)}{1 + \mathbf{a}_0(\lambda)} = \sum_{j=1}^{N/2} \left\{ \frac{1}{\lambda - \lambda_j^+} + \frac{1}{\lambda + \frac{i\pi}{2} + \lambda_j^+} \right\} - \frac{N}{2} \frac{1}{\lambda + \frac{\beta}{N}} - \frac{N}{2} \frac{1}{\lambda + \frac{i\pi}{2} - \frac{\beta}{N}} + f(\lambda), \quad (5.45)$$

wobei  $f(\lambda)$  holomorph im Streifen  $S := \{\lambda \in \mathbb{C} | 0 \geq \operatorname{Im} \lambda \geq -\frac{\pi}{2}\}$  ist.

Den Logarithmus des Eigenwertes kann man nun schreiben als

$$\begin{aligned} \ln \Lambda(\lambda) &= \ln(e^{\frac{h}{2T}} + e^{-\frac{h}{2T}}) + \sum_{j=1}^{M_h} \ln(i \tanh(\lambda - \lambda_j^h)) - \sum_{j=1}^{M_p} \ln(i \tanh(\lambda - \lambda_j^p)) \\ &\quad + \sum_{j=1}^{N/2} \left\{ \ln(\operatorname{sh}(\lambda + \frac{i\pi}{2} + \lambda_j^+)) + \ln(\operatorname{sh}(\lambda - \frac{i\pi}{2} - \lambda_j^+)) \right\} \\ &\quad - \frac{N}{2} \ln(\operatorname{sh}(\lambda + \frac{i\pi}{2} - \frac{\beta}{N})) - \frac{N}{2} \ln(\operatorname{sh}(\lambda - \frac{i\pi}{2} + \frac{\beta}{N})). \end{aligned} \quad (5.46)$$

Wir definieren zwei Konturen  $\mathcal{C}$  und  $\tilde{\mathcal{C}}$ . Die Kontur  $\mathcal{C}$  umschließt in der komplexen Ebene den Streifen  $-\frac{\pi}{4} < \operatorname{Im} \lambda < \frac{\pi}{4}$ , während die Kontur  $\tilde{\mathcal{C}}$  aus zwei Teilkonturen besteht, die die Streifen  $-\frac{\pi}{2} < \operatorname{Im} \lambda < -\frac{\pi}{4}$  bzw.  $+\frac{\pi}{4} < \operatorname{Im} \lambda < \frac{\pi}{2}$  umschließen (Abb. 5.3). Damit liegen alle  $N/2$ -vielen Nullstellen  $\lambda_j^+$  von  $1 + \mathbf{a}_0(\lambda)$  innerhalb von  $\mathcal{C}$  bzw. außerhalb von  $\tilde{\mathcal{C}}$ . Andererseits liegen alle weiteren Nullstellen innerhalb von  $\tilde{\mathcal{C}}$  bzw. außerhalb von  $\mathcal{C}$ .

Für  $\lambda \in \mathcal{C}$ ,  $\lambda - \frac{i\pi}{2} \notin \mathcal{C}$  definieren wir zwei Funktionen  $g(\lambda)$  und  $\tilde{g}(\lambda)$  über

$$\begin{aligned} \int_{\mathcal{C}} \frac{d\omega}{2\pi i} \ln(\operatorname{sh}(\lambda - \frac{i\pi}{2} - \omega)) \frac{\mathbf{a}'(\omega)}{1 + \mathbf{a}(\omega)} &= \sum_{j=1}^{N/2} \ln(\operatorname{sh}(\lambda - \frac{i\pi}{2} - \lambda_j^+)) - \frac{N}{2} \ln(\operatorname{sh}(\lambda - \frac{i\pi}{2} + \frac{\beta}{N})) \\ &=: g(\lambda) \end{aligned} \quad (5.47)$$

$$\begin{aligned} \int_{\tilde{\mathcal{C}}} \frac{d\omega}{2\pi i} \ln(\operatorname{sh}(\lambda - \omega)) \frac{\mathbf{a}'(\omega)}{1 + \mathbf{a}(\omega)} &= \sum_{j=1}^{N/2} \ln(\operatorname{sh}(\lambda + \frac{i\pi}{2} + \lambda_j^+)) - \frac{N}{2} \ln(\operatorname{sh}(\lambda + \frac{i\pi}{2} - \frac{\beta}{N})) \\ &=: \tilde{g}(\lambda). \end{aligned} \quad (5.48)$$

Damit folgt aus (5.43)

$$\ln \Lambda(\lambda) = \ln(e^{\frac{h}{2T}} - e^{-\frac{h}{2T}}) + \sum_{j=1}^{M_h} \ln(i \tanh(\lambda - \lambda_j^h)) - \sum_{j=1}^{M_p} \ln(i \tanh(\lambda - \lambda_j^p)) + g(\lambda) + \tilde{g}(\lambda). \quad (5.49)$$

Unter Beachtung der Tatsache, dass die Anzahl der Nullstellen in den Konturen gleich der Anzahl der Polstellen ist, können wir nun mit Hilfe partieller Integration die Funktionen  $g(\lambda)$  und  $\tilde{g}(\lambda)$  vereinfachen. Außerdem kann man die Funktion  $\tilde{g}(\lambda)$  durch Deformation der Integrationswege (angedeutet in Abb. 5.3) durch eine Integration über  $\mathcal{C}$  ausdrücken, bei der zusätzliche konstante Terme entstehen:

$$g(\lambda) = \int_{\mathcal{C}} \frac{d\omega}{2\pi i} \coth(\lambda - \frac{i\pi}{2} - \omega) \ln(1 + \mathbf{a}(\omega)) \quad (5.50)$$

$$\tilde{g}(\lambda) = - \int_{\mathcal{C}} \frac{d\omega}{2\pi i} \coth(\lambda - \omega) \ln(1 + \mathbf{a}(\omega)) - \ln(1 + e^{-\frac{h}{T}}). \quad (5.51)$$

Setzen wir nun (5.50) und (5.51) in (5.49) ein, so erhalten wir das Ergebnis

$$\begin{aligned} \ln \Lambda(\lambda) &= \frac{h}{2T} + \sum_{j=1}^{M_h} \ln(i \tanh(\lambda - \lambda_j^h)) \\ &\quad - \sum_{j=1}^{M_p} \ln(i \tanh(\lambda - \lambda_j^p)) - \int_{\mathcal{C}} \frac{d\omega}{\pi i} \frac{\ln(1 + \mathbf{a}(\omega))}{\text{sh}(2(\lambda - \omega))}. \end{aligned} \quad (5.52)$$

### $N/2 - M$ ungerade

Im Fall  $N/2 - M$  ungerade gilt das negative Vorzeichen in (5.42) und (5.43) und es ist  $M_h - M_p = N/2 - M$  ungerade. Wir betrachten den Fall  $h < h_c$  und bedenken, dass eine der Bethe-Ansatz-Zahlen (wir nennen sie  $\lambda_1^-$ ) in diesem Fall, genauso wie ihr in  $-\frac{i\pi}{4}$  gespiegeltes Gegenstück, auf der Linie  $\text{Im } \lambda = -\frac{\pi}{4}$  liegt. Daher müssen die Konturen so modifiziert werden, dass die Bethe-Ansatz-Zahl  $\lambda_1^-$  in der Kontur  $\mathcal{C}$  liegt, während ihr punktgespiegeltes Gegenstück in der Kontur  $\tilde{\mathcal{C}}$  unterkommen muss. Wir nennen die so gebogenen Konturen  $\mathcal{C}_x$  und  $\tilde{\mathcal{C}}_x$  (Abb. 5.4). Dann lässt sich die Rechnung wie im Fall  $N/2 - M$  gerade durchführen, und man erhält

$$\ln \Lambda(\lambda) = \frac{h}{2T} + \sum_{j=1}^{M_h} \ln(i \tanh(\lambda - \lambda_j^h)) - \sum_{j=1}^{M_p} \ln(i \tanh(\lambda - \lambda_j^p)) - \int_{\mathcal{C}_x} \frac{d\omega}{\pi i} \frac{\ln(1 - \mathbf{a}(\omega))}{\text{sh}(2(\lambda - \omega))}. \quad (5.53)$$

Das Integral über die Kontur  $\mathcal{C}_x$  lässt sich unter Beachtung der bei der Integration aufgesammelten Phase wie folgt umschreiben:

$$\int_{\mathcal{C}_x} \frac{d\omega}{\pi i} \frac{\ln(1 - \mathbf{a}(\omega))}{\text{sh}(2(\lambda - \omega))} = p.v. \int_{\mathcal{C}} \frac{d\omega}{\pi i} \frac{\ln(1 - \mathbf{a}(\omega))}{\text{sh}(2(\lambda - \omega))} - \int_{\mathcal{C}_F} \frac{d\omega}{\text{sh}(2(\lambda - \omega))}. \quad (5.54)$$

Dabei beschreibt  $p.v.$  den Hauptwert, während die Kontur  $\mathcal{C}_F$  die auf  $\text{Im } \lambda = -\pi/4$  liegenden Punkte  $-\bar{\lambda}_1^-$  und  $\lambda_1^-$  in gerader Linie miteinander verbindet.

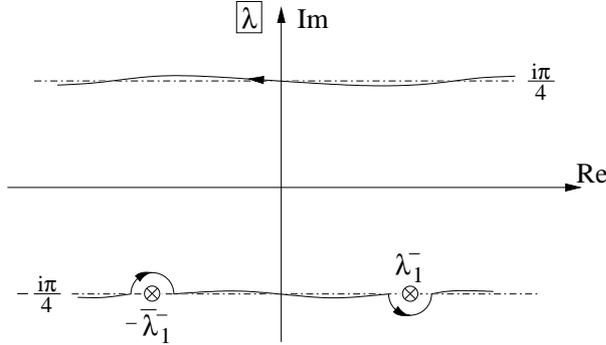


Abbildung 5.4.: Die gebogene Teilkontur  $C_x$ . Die Bethe-Ansatz-Zahl  $\lambda_1^-$  liegt innerhalb der Kontur,  $-\bar{\lambda}_1^-$  liegt außerhalb.

### 5.3.3. Freie Energie und Korrelationslängen

Wir wollen nun die Gleichungen (5.52) und (5.54) benutzen, um physikalische Eigenschaften aus den Ergebnissen für die Eigenwerte zu berechnen. Dazu setzen wir  $\lambda = 0$ . Der Eigenwert für  $M_h = M_p = 0$  hat den größten Betrag (vgl. Anhang C.1). Wir nennen ihn  $\Lambda_0$ . Für den größten Eigenwert gilt

$$\ln \Lambda_0 = \frac{h}{2T} + \int_C \frac{d\omega}{\pi i} \frac{\ln(1 + \mathbf{a}(\omega))}{\text{sh}(2\omega)}. \quad (5.55)$$

Alle weiteren Eigenwerte mit  $\lambda = 0$  nennen wir schlicht  $\Lambda$ .

#### Quotienten von Eigenwerten

Im Sektor  $N/2 - M$  gerade gilt:

$$\ln \left( \frac{\Lambda_0}{\Lambda} \right) = \sum_{j=1}^{M_h} \ln(i \coth(\lambda_j^h)) - \sum_{j=1}^{M_p} \ln(i \coth(\lambda_j^p)). \quad (5.56)$$

Für den Sektor  $N/2 - M$  ungerade folgt analog:

$$\begin{aligned} \ln \left( \frac{\Lambda_0}{\Lambda} \right) &= \sum_{j=1}^{M_h} \ln(i \coth(\lambda_j^h)) - \sum_{j=1}^{M_p} \ln(i \coth(\lambda_j^p)) + \int_{C_F} \frac{d\omega}{\text{sh}(2\omega)} \\ &+ p.v. \int_C \frac{d\omega}{\pi i} \frac{\ln \left| \frac{1+\mathbf{a}(\omega)}{1-\mathbf{a}(\omega)} \right|}{\text{sh}(2\omega)}. \end{aligned} \quad (5.57)$$

Um die Integrale in (5.57) weiter zu vereinfachen, folgen wir [25] und transformieren gemäß (4.12) und (4.13) die Konturintegrale in Integrale über die erste Brillouin-Zone. Für den

Eigenwert  $\Lambda_0$  folgt mit  $\lambda = 0$

$$\begin{aligned} \ln \Lambda_0 &= \frac{h}{2T} + \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dp}{2\pi} \ln \left( 1 + \left[ \frac{1 + \sin(\frac{4J}{NT}) \cos(p)}{1 - \sin(\frac{4J}{NT}) \cos(p)} \right]^{N/2} e^{-\frac{h}{T}} \right) \\ \Rightarrow \lim_{N \rightarrow \infty} \ln \Lambda_0 &= \frac{h}{2T} + \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dp}{2\pi} \ln \left( 1 + \exp \left[ -\frac{1}{2T} (h - 4J \cos(p)) \right] \right). \end{aligned} \quad (5.58)$$

Um auch den Quotienten der Eigenwerte (5.57) in eine handhabbare Form bringen zu können, muss zunächst das Hauptwertintegral betrachtet werden. Wird dies gemäß (4.12) transformiert, so ist der Trotter-Limes problemlos durchführbar. Für  $N \rightarrow \infty$  folgt

$$\begin{aligned} p.v. \int_{\mathcal{C}} \frac{d\omega}{\pi i} \frac{\ln \left| \frac{1+\alpha(\omega)}{1-\alpha(\omega)} \right|}{\text{sh}(2\omega)} &\rightarrow p.v. \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dp}{2\pi} \ln \left| \coth \left( \frac{1}{2T} (h - 4J \cos(p)) \right) \right| \\ &= \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dp}{2\pi} \ln \left| \coth \left( \frac{1}{2T} (h - 4J \cos(p)) \right) \right|. \end{aligned} \quad (5.59)$$

Im nächsten Schritt muss das Integral über  $\mathcal{C}_F$  bestimmt werden. Die Kontur liegt auf  $\text{Im } \lambda = -i\pi/4$ , beginnt bei  $-\bar{\lambda}_1^- = -\lambda_1^- - \frac{i\pi}{2}$  und endet bei  $\lambda_1^-$ . Zunächst folgt mit (4.13) und (5.12) bei  $q = 0$

$$i \text{sh}(2\lambda_1^-) = \frac{1}{\cos(p_F)} = \sin \left( \frac{4J}{NT} \right) \coth \left( \frac{h}{NT} \right), \quad (5.60)$$

$$\Rightarrow p_F = \arccos \left( \frac{\tanh(\frac{h}{NT})}{\tanh(\frac{4J}{NT})} \right) = \arccos \left( \frac{\tanh(\frac{h}{NT})}{\sin(\frac{h_c}{NT})} \right) \quad (5.61)$$

$$\Rightarrow \lim_{N \rightarrow \infty} p_F = \arccos \left( \frac{h}{4J} \right) = \arccos \left( \frac{h}{h_c} \right). \quad (5.62)$$

Es ist nun zu bedenken, dass es für  $h > h_c$  kein Integral über  $\mathcal{C}_F$  gibt, da auf  $\mathcal{C}$  in diesem Fall  $1 - \alpha(\omega) > 0$  gilt. Als Ergebnis folgt für  $h < h_c$  im Limes  $N \rightarrow \infty$  aus der Integration über  $\mathcal{C}_F$  mit  $\lambda = 0$

$$\begin{aligned} \ln \left( \frac{\Lambda_0}{\Lambda} \right) &= i p_F + \sum_{j=1}^{M_h} \ln(\text{icoth}(\lambda_j^h)) - \sum_{j=1}^{M_p} \ln(\text{icoth}(\lambda_j^p)) \\ &\quad + \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dp}{2\pi} \ln \left| \coth \left( \frac{1}{2T} (h - 4J \cos(p)) \right) \right|. \end{aligned} \quad (5.63)$$

Für  $h > h_c$  ist  $p_F = 0$  und die Betragsstriche sind zu vernachlässigen.

### Freie Energie

Aus der Integraldarstellung (5.55) für  $\ln \Lambda_0$  folgt mit der Transformation auf die erste Brillouin-Zone (4.12) direkt die Freie Energie:

$$f = -T \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dp}{2\pi} \ln \left( 2 \text{ch} \left( \frac{h - 4J \cos(p)}{2T} \right) \right). \quad (5.64)$$

Dieser Ausdruck entspricht dem bekannten Ergebnis nach [62].

### Korrelationslängen

Wir betrachten nun die Korrelationslängen  $\xi$ , für die  $\ln(\Lambda_0/\Lambda) = 1/\xi$  gilt. Dazu muss die RHS von (5.63) komplett in Real- und Imaginärteil aufgespalten werden, um Informationen über den Betrag und die Phase der Korrelationslängen zu erhalten. Wir definieren

$$\varphi := \arg(\sin(2v) + i \operatorname{sh}(2u)). \quad (5.65)$$

Für die Festlegung des Zweiges des Logarithmus schreiben wir

$$i \operatorname{coth}(u + iv) = \frac{\operatorname{sh}(u + i(v + \frac{\pi}{2}))}{\operatorname{sh}(u + iv)}, \quad (5.66)$$

und unterscheiden die zwei Fälle  $u > 0$  bzw.  $u < 0$ :

$$\begin{aligned} u > 0 : \quad & -\frac{\operatorname{sh}(2u)}{\sin(2v)} = \tan(\pi - \varphi) \Leftrightarrow \quad \varphi = \pi + \arctan\left(\frac{\operatorname{sh}(2u)}{\sin(2v)}\right), \\ u < 0 : \quad & \frac{\operatorname{sh}(2u)}{\sin(2v)} = \tan(\pi + \varphi) \Leftrightarrow \quad \varphi = -\pi + \arctan\left(\frac{\operatorname{sh}(2u)}{\sin(2v)}\right). \end{aligned} \quad (5.67)$$

Wir erhalten damit für die Phase

$$\varphi = \pi \operatorname{sgn}(u) + \arctan\left(\frac{\operatorname{sh}(2u)}{\sin(2v)}\right). \quad (5.68)$$

So folgt

$$\begin{aligned} & \operatorname{Im} \left\{ \sum_{j=1}^{M_h} \ln(i \operatorname{coth}(\lambda_j^h)) - \sum_{j=1}^{M_p} \ln(i \operatorname{coth}(\lambda_j^p)) \right\} \\ &= \sum_{j=1}^{M_h} \left\{ \pi \operatorname{sgn}(u_j^h) + \arctan\left(\frac{\operatorname{sh}(2u_j^h)}{\sin(2v_j^h)}\right) \right\} - \sum_{j=1}^{M_p} \left\{ \pi \operatorname{sgn}(u_j^p) + \arctan\left(\frac{\operatorname{sh}(2u_j^p)}{\sin(2v_j^p)}\right) \right\}. \end{aligned} \quad (5.69)$$

Im Fall  $N/2 - M$  gerade erhalten wir für die Quotienten der Eigenwerte:

$$\begin{aligned} \ln\left(\frac{\Lambda_0}{\Lambda}\right) &= \sum_{j=1}^{M_h} \left\{ \frac{1}{2} \ln\left(\frac{\operatorname{ch}(2u_j^h) + \cos(2v_j^h)}{\operatorname{ch}(2u_j^h) - \cos(2v_j^h)}\right) + i \arctan\left(\frac{\operatorname{sh}(2u_j^h)}{\sin(2v_j^h)}\right) + i \pi \operatorname{sgn}(u_j^h) \right\} \\ &\quad - \sum_{j=1}^{M_p} \left\{ \frac{1}{2} \ln\left(\frac{\operatorname{ch}(2u_j^p) + \cos(2v_j^p)}{\operatorname{ch}(2u_j^p) - \cos(2v_j^p)}\right) + i \arctan\left(\frac{\operatorname{sh}(2u_j^p)}{\sin(2v_j^p)}\right) + i \pi \operatorname{sgn}(u_j^p) \right\}. \end{aligned} \quad (5.70)$$

Diese Gleichung gilt für endliche Trotterzahl genauso wie im Trotterlimes.

Für  $N/2 - M$  ungerade folgt im Trotterlimes

$$\begin{aligned}
 \ln \left( \frac{\Lambda_0}{\Lambda} \right) &= ip_F + \sum_{j=1}^{M_h} \left\{ \frac{1}{2} \ln \left( \frac{\text{ch}(2u_j^h) + \cos(2v_j^h)}{\text{ch}(2u_j^h) - \cos(2v_j^h)} \right) + i \arctan \left( \frac{\text{sh}(2u_j^h)}{\sin(2v_j^h)} \right) + i \pi \text{sgn}(u_j^h) \right\} \\
 &\quad - \sum_{j=1}^{M_p} \left\{ \frac{1}{2} \ln \left( \frac{\text{ch}(2u_j^p) + \cos(2v_j^p)}{\text{ch}(2u_j^p) - \cos(2v_j^p)} \right) + i \arctan \left( \frac{\text{sh}(2u_j^p)}{\sin(2v_j^p)} \right) + i \pi \text{sgn}(u_j^p) \right\} \\
 &\quad + \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dp}{2\pi} \ln \left| \coth \left( \frac{1}{2T} (h - 4J \cos(p)) \right) \right|. \tag{5.71}
 \end{aligned}$$

Die Größen  $\ln \left( \frac{\Lambda_0}{\Lambda} \right) =: \frac{1}{\xi}$  beschreiben die inversen Korrelationslängen, welche die Langabstands-Asymptotik verschiedener Korrelationsfunktionen bestimmen.



## 6. Die Korrelationsfunktion $\langle \sigma_1^z \sigma_{m+1}^z \rangle$

In diesem Kapitel wird das asymptotische Verhalten der  $\langle \sigma_1^z \sigma_{m+1}^z \rangle$ -Korrelationsfunktion im  $XX$ -Limes bei endlicher Temperatur  $T$  und endlichem Magnetfeld  $h < 2J$  betrachtet. Diese Einschränkung im Magnetfeld vereinfacht die weitere Rechnung, da der Realteil der Bethe-Ansatz-Zahlen in diesem Bereich sein Maximum immer auf dem Rand bei  $\text{Im } \lambda = -i\pi/4$  erreicht (vgl. Abb. 5.1). Es seien  $|\Psi_n\rangle$  die unnormierten aber orthogonalen Eigenvektoren der Quanten-Transfermatrix zum Eigenwert  $\Lambda_n(\lambda)$ . Dann lässt sich die Korrelationsfunktion durch Einschleiben eines vollständigen Satzes von normierten Zuständen

$$\sum_n \frac{|\Psi_n\rangle\langle\Psi_n|}{\langle\Psi_n|\Psi_n\rangle} = 1 \quad (6.1)$$

wie folgt entwickeln:

$$\langle \sigma_1^z \sigma_{m+1}^z \rangle_{T,h} = \frac{\langle \Psi_0 | (A(0) - D(0)) t^{m-1}(0) (A(0) - D(0)) | \Psi_0 \rangle}{\langle \Psi_0 | \Psi_0 \rangle \Lambda_0^{m+1}} \quad (6.2)$$

$$\begin{aligned} &= \sum_{n=0}^{2^N-1} \frac{\langle \Psi_0 | (A(0) - D(0)) t^{m-1}(0) | \Psi_n \rangle \langle \Psi_n | (A(0) - D(0)) | \Psi_0 \rangle}{\langle \Psi_0 | \Psi_0 \rangle \Lambda_0^{m+1} \langle \Psi_n | \Psi_n \rangle} \\ &= \sum_{n=0}^{2^N-1} \left( \frac{\Lambda_n}{\Lambda_0} \right)^m \frac{\langle \Psi_0 | (A(0) - D(0)) | \Psi_n \rangle}{\langle \Psi_n | \Psi_n \rangle \Lambda_n} \frac{\langle \Psi_n | (A(0) - D(0)) | \Psi_0 \rangle}{\langle \Psi_0 | \Psi_0 \rangle \Lambda_0} \\ &= \langle \sigma_1^z \rangle_{T,h} \langle \sigma_{m+1}^z \rangle_{T,h} \end{aligned} \quad (6.3)$$

$$\begin{aligned} &+ \sum_{n=1}^{2^N-1} \left( \frac{\Lambda_n}{\Lambda_0} \right)^m \underbrace{\frac{\langle \Psi_0 | (2A(0) - t(0)) | \Psi_n \rangle}{\langle \Psi_n | \Psi_n \rangle \Lambda_n} \frac{\langle \Psi_n | (2A(0) - t(0)) | \Psi_0 \rangle}{\langle \Psi_0 | \Psi_0 \rangle \Lambda_0}}_{=4 \frac{\langle \Psi_0 | A(0) | \Psi_n \rangle}{\langle \Psi_n | \Psi_n \rangle \Lambda_n} \frac{\langle \Psi_n | A(0) | \Psi_0 \rangle}{\langle \Psi_0 | \Psi_0 \rangle \Lambda_0}}. \end{aligned} \quad (6.4)$$

In dieser Formfaktorentwicklung interessieren wir uns im Weiteren für den um die Magnetisierung bereinigten Anteil und betrachten daher den Ausdruck

$$\begin{aligned} \langle \sigma_1^z \sigma_{m+1}^z \rangle_{T,h} - \langle \sigma_1^z \rangle_{T,h} \langle \sigma_{m+1}^z \rangle_{T,h} &= 4 \sum_{n=1}^{2^N-1} \left( \frac{\Lambda_n}{\Lambda_0} \right)^m \underbrace{\frac{\langle \Psi_0 | A(0) | \Psi_n \rangle}{\langle \Psi_n | \Psi_n \rangle \Lambda_n} \frac{\langle \Psi_n | A(0) | \Psi_0 \rangle}{\langle \Psi_0 | \Psi_0 \rangle \Lambda_0}}_{=: A_n(T,h)} \\ &=: 4 \sum_{n=1}^{2^N-1} e^{-m/\xi_n} \cdot A_n(T, h). \end{aligned} \quad (6.5)$$

Hier gilt  $\langle \sigma_1^z \rangle = \langle \sigma_{m+1}^z \rangle$  wegen Translationsinvarianz.

In obiger Summe beschränken wir uns jetzt auf die Betrachtung der führenden Terme. Um diese zu identifizieren, müssen wir mit den Ergebnissen aus den Kapiteln 5.2 und 5.3 die Anregungen mit den führenden Korrelationslängen  $\xi_n$  identifizieren.

## 6.1. Zustände und Entartung

Wir werden nun die angeregten Zustände betrachten, deren Korrelationslängen das asymptotische Verhalten der Korrelationsfunktion dominieren.

Die Matrixelemente in der Formfaktorentwicklung, die nicht Null sind, stammen wegen der Gesamtspin-Erhaltung aus Übergängen, bei denen die Anzahl der Bethe-Ansatz-Zahlen gleich bleibt. Es müssen in der Menge der Bethe-Ansatz-Zahlen also Teilchen-Loch-Paare, für die  $M_h = M_p$  gilt, betrachtet werden. Da dann  $\frac{N}{2} - M$  gerade ist, müssen wir zur Betrachtung der Korrelationslänge die Gleichung (5.70) heranziehen. Dabei wird klar, dass die größte Korrelationslänge erreicht wird, wenn der Realteil von  $\ln(\Lambda_0/\Lambda)$  minimal wird. Dann ist  $\exp\{-m/\xi_n\}$  maximal. Da jedes Teilchen-Loch-Paar diesen Realteil vergrößert (5.56), dominieren die Zustände mit der kleinstmöglichen Anregung  $M_h = M_p = 1$  die Korrelation. Es ist nun zu untersuchen, welches dieser Paare den Realteil von  $\ln(\Lambda_0/\Lambda)$  minimiert. Dazu muss gemäß (5.56) das Minimum von

$$\operatorname{Re} \{ \ln(i \coth(\lambda)) \} =: A(u, v) = \ln \left( \frac{\operatorname{ch}(2u) + \cos(2v)}{\operatorname{ch}(2v) - \cos(2v)} \right) \quad (6.6)$$

bestimmt werden, wobei das Loch durch  $\lambda = u + iv$ ,  $u, v \in \mathbb{R}$  beschrieben wird. Aus der symmetrischen Anordnung der Bethe-Ansatz-Zahlen um die Linie  $\operatorname{Im} \lambda = -\pi/4$  folgt, dass auch  $\lambda = -u + i(-\pi/2 - v)$  ein Minimum von (6.6) liefert. Da  $A(u, v)$  zudem gerade in  $u$  ist, gibt es genau vier Teilchen-Loch-Paare, die den Realteil von  $\ln(\Lambda_0/\Lambda)$  minimieren:

$$\begin{aligned} & \left\{ u + iv, u + i\left(-\frac{\pi}{2} - v\right) \right\}, \quad \left\{ -u + iv, -u + i\left(-\frac{\pi}{2} - v\right) \right\} \\ & \left\{ u + iv, -u + i\left(-\frac{\pi}{2} - v\right) \right\}, \quad \left\{ -u + iv, u + i\left(-\frac{\pi}{2} - v\right) \right\}. \end{aligned} \quad (6.7)$$

Der nächstführende Eigenwert ist also vierfach entartet. Für feste  $T$  und  $h$  hängt  $\lambda$  nur von  $q$  ab (vgl. (5.17)), und wir können uns auf  $q \in [0, \pi/2]$  beschränken. Man kann zeigen, dass

$$\frac{dA(u, v)}{dq} > 0, \quad \text{für } \beta_- > 0. \quad (6.8)$$

Die Bedingung  $\beta_- > 0$  (vgl. (5.21)) ist für große Trotterzahlen und  $h < 2J$  immer erfüllt. Es folgt, dass  $A(u, v)$  im Fall gerader  $N/2 - M$  für  $q = \pi/N$  minimal wird. Für das ausschlaggebende Loch  $\lambda = u + iv$  gilt:

$$\left. \begin{array}{l} \operatorname{ch}(2u) \\ \sin(2v) \end{array} \right\} = \frac{1}{2} \left\{ \left[ 1 + \frac{4(1-x)}{x^2 + y^2} \right]^{1/2} \pm \left[ 1 + \frac{4(1+x)}{x^2 + y^2} \right]^{1/2} \right\} \quad (6.9)$$

mit  $x := h/2J$  und  $y := \pi T/2J$ .

## 6.2. Korrelationslängen

Wir betrachten nun den Logarithmus des Quotienten der Eigenwerte zerlegt in Real- und Imaginärteil. Der Realteil gibt uns dabei die Information über den Betrag der Korrelationslänge, während aus dem Imaginärteil die Phase bestimmt wird.

Für den Realteil erhalten wir für alle Teilchen-Loch-Paare

$$\operatorname{Re} \left[ \ln \left( \frac{\Lambda_0}{\Lambda} \right) \right] = \ln \left( \frac{\operatorname{ch}(2u) + \cos(2v)}{\operatorname{ch}(2u) - \cos(2v)} \right), \quad (6.10)$$

und es folgt so

$$\left| \frac{\Lambda_0}{\Lambda} \right| = \frac{\operatorname{ch}(2u) + \cos(2v)}{\operatorname{ch}(2u) - \cos(2v)} = e^{-\frac{1}{\xi}}. \quad (6.11)$$

Für den Imaginärteil von  $\ln(\Lambda_0/\Lambda)$  erhalten wir unterschiedliche Ergebnisse für verschiedene Teilchen-Loch-Paare.

Für  $\{u + iv, u + i(-\pi/2 - v)\}$  und  $\{-u + iv, -u + i(-\pi/2 - v)\}$  folgt wegen

$$\sin(2(v - \frac{\pi}{2})) = -\sin(2v + \pi) = \sin(2v), \quad (6.12)$$

dass

$$\operatorname{Im} \left[ \ln \left( \frac{\Lambda_0}{\Lambda} \right) \right] = 0. \quad (6.13)$$

Andererseits erhalten wir für  $\{u + iv, -u + i(-\pi/2 - v)\}$  und  $\{-u + iv, u + i(-\pi/2 - v)\}$  für den Imaginärteil (modulo  $2\pi$ ):

$$\operatorname{Im} \left[ \ln \left( \frac{\Lambda_0}{\Lambda} \right) \right] = \pm 2 \arctan \left( \frac{\operatorname{sh}(2u)}{\sin(2v)} \right). \quad (6.14)$$

Um diesen Imaginärteil etwas besser zu verstehen, betrachten wir zwei Grenzfälle in (6.9):

$$1. \quad h \rightarrow 0: \Rightarrow x = \frac{h}{2J} \rightarrow 0$$

$$\begin{aligned} \Rightarrow \operatorname{ch}(2u) &\rightarrow \left[ 1 + \frac{4}{y^2} \right]^{1/2} > 1 \Rightarrow \operatorname{sh}(2u) > 0 \\ \Rightarrow \sin(2v) &\rightarrow 0- \Rightarrow \frac{\operatorname{sh}(2u)}{\sin(2v)} \rightarrow -\infty \\ \Rightarrow \operatorname{Im} \ln \left( \frac{\Lambda_0}{\Lambda} \right) &\Rightarrow \pm\pi \end{aligned} \quad (6.15)$$

Dies entspricht einer gitterkommensurablen Oszillation  $\propto (-1)^m$ .

$$\begin{aligned}
 2. \quad T \rightarrow 0: & \Rightarrow y = \frac{\pi T}{2J} \rightarrow 0 \\
 & \Rightarrow \left. \begin{array}{l} \text{ch}(2u) \\ \sin(2v) \end{array} \right\} = \frac{1}{2} \left\{ \left| 1 - \frac{2}{x} \right| \pm \left| 1 + \frac{2}{x} \right| \right\} \\
 & \quad = \frac{1}{2} \left( \frac{2}{x} - 1 \pm \left( 1 + \frac{2}{x} \right) \right) = \begin{cases} \frac{2}{x} \\ -1 \end{cases} = \frac{4J}{h} \quad \text{für } x < 2 \\
 & \Rightarrow \text{Im} \ln \left( \frac{\Lambda_0}{\Lambda} \right) = \mp 2p_F. \tag{6.16}
 \end{aligned}$$

Hier sieht man deutlich  $2p_F$ -Oszillationen.

Für endliche Temperatur und endliches Magnetfeld überlagern sich beide Effekte.

### 6.3. Amplituden

Nach der Diskussion der Korrelationslängen für die  $\langle \sigma_1^z \sigma_{m+1}^z \rangle_{T,h}$ -Korrelationsfunktion wollen wir uns nun den Amplituden der Formfaktor-Entwicklung zuwenden. Aus (6.5) wird deutlich, dass zwei Bestandteile der Amplituden bestimmt werden müssen

$$\begin{aligned}
 F_{ph} &= \frac{\langle \Psi_{ph} | A(\zeta) | \Psi_0 \rangle}{\langle \Psi_0 | \Psi_0 \rangle \Lambda_0(\zeta)}, \\
 \bar{F}_{ph} &= \frac{\langle \Psi_0 | A(\zeta) | \Psi_{ph} \rangle}{\langle \Psi_{ph} | \Psi_{ph} \rangle \Lambda_{ph}(\zeta)}. \tag{6.17}
 \end{aligned}$$

Hierbei bezeichnen  $|\Psi_{ph}\rangle$  die Zustände, die durch ein Teilchen-Loch-Paar bestimmt sind, und  $\Lambda_{ph}$  ist der entsprechende Eigenwert. Aus  $N/2 - M$  gerade folgt, dass die Bethe-Ansatz-Zahlen in  $|\Psi_{ph}\rangle$ , die gleichen sind wie diejenigen, die den Grundzustand bestimmen. Lediglich eine Bethe-Ansatz-Zahl fehlt (das Loch) und ist durch das Teilchen, welches außerhalb der kanonischen Kontur liegt, ersetzt. O.B.d.A. können wir dieses Teilchen-Loch-Paar an den letzten Platz in der Menge der Bethe-Ansatz-Zahlen setzen, so dass  $\lambda_{N/2} = \lambda_h$  durch  $\lambda_p$  ausgetauscht wird. Somit folgt

$$\frac{\langle \Psi_{ph} | A(\zeta) | \Psi_0 \rangle}{\langle \Psi_0 | \Psi_0 \rangle} = \frac{\langle 0 | C(\lambda_1) \dots C(\lambda_{N/2-1}) C(\lambda_p) A(\zeta) | \Psi_0 \rangle}{\langle \Psi_0 | \Psi_0 \rangle}. \tag{6.18}$$

Mit Hilfe der Slavnov-Formel lässt sich dieses Skalarprodukt einfach bestimmen. Im  $XX$ -Limes ergibt sich mit  $\langle \Psi_{ph} | \Psi_0 \rangle = 0$  in Analogie zu [23]

$$\begin{aligned}
 \frac{\langle \Psi_{ph} | A(\zeta) | \Psi_0 \rangle}{\langle \Psi_0 | \Psi_0 \rangle} &= a(\lambda_p) \frac{c(\zeta, \lambda_p)}{b(\zeta, \lambda_p)} \left[ \prod_{k=1}^{N/2-1} \frac{1}{b(\lambda_k, \lambda_p)} \right] \frac{a(\zeta)(1 + \mathbf{a}(\zeta))}{a(\lambda_h) \mathbf{a}'(\lambda_h)} \\
 &\quad \times \left[ \prod_{j=1}^{N/2-1} \frac{b(\lambda_j, \lambda_h)}{b(\lambda_j, \zeta)} \right] \frac{1}{b(\lambda_h, \zeta)} \frac{b(\lambda_h, \zeta)}{c(\lambda_h, \zeta)} G(\lambda_h, \zeta). \tag{6.19}
 \end{aligned}$$

Dabei ist  $a(\lambda) = [i \tanh(\lambda + \beta/N)]^{N/2} \exp(h/2T)$  und  $b(\lambda, \zeta)$ ,  $c(\lambda, \zeta)$  beschreiben die Einträge der  $R$ -Matrix im  $XX$ -Limes

$$b(\lambda, \zeta) = -i \tanh(\lambda - \zeta), \quad c(\lambda, \zeta) = \frac{1}{\text{ch}(\lambda - \zeta)}. \quad (6.20)$$

Weiterhin beschreibt  $G(\lambda, \zeta)$  den  $XX$ -Limes der bekannten Dichtefunktion mit

$$G(\lambda, \zeta) = -\frac{2}{\text{sh}(2(\lambda - \zeta))}. \quad (6.21)$$

Für den Eigenwert gilt

$$\Lambda_0(\lambda) = a(\lambda) \left[ \prod_{j=1}^{N/2} \frac{1}{b(\lambda_j, \lambda)} \right] (1 + \mathbf{a}(\lambda)). \quad (6.22)$$

Damit folgt als Ergebnis für die Amplitude  $F_{ph}$

$$F_{ph} = \frac{a(\lambda_p)}{a(\lambda_h)} \frac{G(\lambda_h, \zeta)}{\mathbf{a}'(\lambda_h)} \frac{c(\zeta, \lambda_p)}{b(\zeta, \lambda_p)} \frac{b(\lambda_h, \zeta)}{c(\lambda_h, \zeta)} \prod_{j=1}^{N/2-1} \frac{b(\lambda_j, \lambda_h)}{b(\lambda_j, \lambda_p)}. \quad (6.23)$$

Für den Eigenwert des Teilchen-Loch-Zustands gilt

$$\Lambda_{ph} = a(\lambda) \left[ \prod_{j=1}^{N/2} \frac{1}{b(\lambda_j, \lambda)} \right] \frac{b(\lambda_h, \lambda)}{b(\lambda_p, \lambda)} (1 + \mathbf{a}(\lambda)). \quad (6.24)$$

Damit ergibt sich ganz analog für  $\bar{F}_{ph}$  nach (6.17)

$$\bar{F}_{ph} = \frac{a(\lambda_h)}{a(\lambda_p)} \frac{G(\lambda_p, \zeta)}{\mathbf{a}'(\lambda_p)} \frac{c(\zeta, \lambda_h)}{b(\zeta, \lambda_h)} \frac{b(\lambda_p, \zeta)}{c(\lambda_p, \zeta)} \prod_{j=1}^{N/2-1} \frac{b(\lambda_j, \lambda_p)}{b(\lambda_j, \lambda_h)} = F_{ph}(\lambda_p \leftrightarrow \lambda_h) \quad (6.25)$$

und für das Produkt der beiden Skalarprodukte folgt der einfache Ausdruck

$$F_{ph} \bar{F}_{ph} = \frac{G(\lambda_h, \zeta)}{\mathbf{a}'(\lambda_h)} \frac{G(\lambda_p, \zeta)}{\mathbf{a}'(\lambda_p)}. \quad (6.26)$$

## 6.4. Asymptotisches Ergebnis

Wir kehren nun zur Betrachtung des asymptotischen Verhaltens der Korrelationsfunktion  $\langle \sigma_1^z \sigma_{m+1}^z \rangle_{T,h} - \langle \sigma_1^z \rangle_{T,h} \langle \sigma_{m+1}^z \rangle_{T,h}$  zurück. Aus Gleichung (6.5) folgt für  $m \rightarrow \infty$ :

$$\langle \sigma_1^z \sigma_{m+1}^z \rangle_{T,h} - \langle \sigma_1^z \rangle_{T,h} \langle \sigma_{m+1}^z \rangle_{T,h} \sim 4 \sum_{\ell=1}^4 \underbrace{\frac{\langle \Psi_0 | A(0) | \Psi_\ell \rangle \langle \Psi_\ell | A(0) | \Psi_0 \rangle}{\langle \Psi_\ell | \Psi_\ell \rangle \Lambda_\ell} \frac{\langle \Psi_0 | \Psi_0 \rangle \Lambda_0}{\left( \frac{\Lambda_\ell}{\Lambda_0} \right)^m}}_{=: A_\ell(T,h)}. \quad (6.27)$$

Dabei wird über die vier oben diskutierten Teilchen-Loch-Paare summiert, die das asymptotische Verhalten der Korrelationsfunktion bestimmen. In Abschnitt 6.3 haben wir gezeigt, dass bei  $\zeta = 0$

$$A_\ell(T, h) = \frac{G(\lambda_\ell^h, 0) G(\lambda_\ell^p, 0)}{\mathbf{a}'(\lambda_\ell^h) \mathbf{a}'(\lambda_\ell^p)} \text{ mit } \ell = 1, \dots, 4 \quad (6.28)$$

gilt.

Wir werden diese vier Amplituden nun auswerten, um das asymptotische Verhalten der Korrelationsfunktionen explizit zu beschreiben. Zuerst erinnern wir uns daran, dass im  $XX$ -Limes  $G(\lambda, 0) = -\frac{2}{\text{sh}(2\lambda)}$  gilt. Die Ableitung der Hilfsfunktion schreiben wir als

$$\begin{aligned} -\frac{\mathbf{a}'(\lambda)}{\mathbf{a}(\lambda)} &= -\partial_\lambda \ln(\mathbf{a}(\lambda)) = iN\partial_\lambda k(\lambda) \text{ mit } k(\lambda) = \arctan\left(\frac{\sin(\frac{4J}{NT})}{\text{sh}(2\lambda)}\right) \\ \Rightarrow -\frac{\mathbf{a}'(\lambda)}{\mathbf{a}(\lambda)} &\sim i\frac{4J}{T}\partial_\lambda \frac{1}{\text{sh}(2\lambda)}. \end{aligned} \quad (6.29)$$

Damit folgt

$$-\frac{G(\lambda, 0)\mathbf{a}(\lambda)}{\mathbf{a}'(\lambda)} = -\frac{iT}{4J} \tanh(2\lambda). \quad (6.30)$$

Mit  $\mathbf{a}(\lambda_h) = \mathbf{a}(\lambda_p) = -1$  gilt dann

$$A_\ell(T, h) = -\left(\frac{T}{4J}\right)^2 \tanh(2\lambda_\ell^h) \tanh(2\lambda_\ell^p). \quad (6.31)$$

Wir fixieren die Nummerierung der Amplituden wie folgt:

$A_\ell$	$\lambda_h$	$\lambda_p$
$A_1$	$u + iv$	$u + i(-\pi/2 - v)$
$A_2$	$-u + iv$	$-u + i(-\pi/2 - v)$
$A_3$	$u + iv$	$-u + i(-\pi/2 - v)$
$A_4$	$-u + iv$	$u + i(-\pi/2 - v)$

Mit  $\tanh(x \pm i\pi) = \tanh(x)$  folgt dann

$$A_1(T, h) = -\left(\frac{T}{4J}\right)^2 |\tanh(2u + 2iv)|^2 = A_2(T, h), \quad (6.32)$$

$$A_3(T, h) = \left(\frac{T}{4J}\right)^2 \tanh^2(2u + 2iv) = \overline{A_4(T, h)}. \quad (6.33)$$

Wir diskutieren nun den Ausdruck  $\tanh(2u + 2iv)$  in Abhängigkeit von  $T, h$ :

$$\begin{aligned} \tanh^2(2u + 2iv) &= \frac{\text{sh}^2(2\lambda_h)}{1 + \text{sh}^2(2\lambda_h)} \\ &= \left[1 + \frac{\tan^2(k_h)}{\sin^2(\frac{4J}{NT})}\right]^{-1} \text{ mit } k_h = \frac{\pi}{N} + \frac{ih}{NT} \end{aligned} \quad (6.34)$$

Für große  $N$  folgt

$$\begin{aligned} \tanh^2(2\lambda_h) &\sim \left[1 + \left(\frac{\pi T}{4J} + \frac{ih}{4J}\right)^2\right]^{-1} \\ &= \left[1 + t^2 - b^2 + 2itb\right]^{-1} \quad \text{mit } t := \frac{\pi T}{4J} \text{ und } b := \frac{h}{4J}. \end{aligned} \quad (6.35)$$

Damit ergibt sich für die Amplituden

$$A_1(T, h) = A_2(T, h) = -\left(\frac{t}{\pi}\right)^2 \frac{1}{[(1 + t^2 - b^2)^2 + 4t^2b^2]^{1/2}}, \quad (6.36)$$

und für  $A_3$  und  $A_4$  ist noch die Phase festzulegen:

$$e^{-2i\varphi_0} = \frac{A_3}{A_4} = \exp\left\{-2i \arctan\left(\frac{2bt}{1 + t^2 - b^2}\right)\right\} \quad (6.37)$$

$$\Rightarrow \varphi_0 = \arctan\left(\frac{2bt}{1 + t^2 - b^2}\right). \quad (6.38)$$

Damit ist

$$A_3(T, h) = \overline{A_4(T, h)} = \frac{t^2 \exp\{-i \arctan(\frac{2bt}{1+t^2-b^2})\}}{\pi^2 [(1 + t^2 - b^2)^2 + 4t^2b^2]^{1/2}}. \quad (6.39)$$

Setzen wir diese Ergebnisse nun in (6.27) ein, so erhalten wir als Ergebnis das

**Theorem 4.** Für die  $\langle \sigma_1^z \sigma_{m+1}^z \rangle$ -Korrelationen der XX-Kette gilt im Trotter-Limes asymptotisch für große Abstände  $m$  der Ausdruck

$$\begin{aligned} &\langle \sigma_1^z \sigma_{m+1}^z \rangle_{T,h} - \langle \sigma_1^z \rangle_{T,h} \langle \sigma_{m+1}^z \rangle_{T,h} \sim \\ &- \frac{16t^2}{\pi^2} \frac{\sin^2((m\varphi + \varphi_0)/2)}{[(1 + t^2 - b^2)^2 + 4t^2b^2]^{1/2}} \left( \frac{\text{ch}(2u) - \sqrt{1 - \sin^2(2v)}}{\text{ch}(2u) + \sqrt{1 - \sin^2(2v)}} \right)^m \end{aligned} \quad (6.40)$$

mit

$$\left. \begin{array}{l} \text{ch}(2u) \\ \sin(2v) \end{array} \right\} = \frac{1}{2} \left\{ \left[1 + \frac{1 - 2b}{b^2 + t^2}\right]^{1/2} \pm \left[1 + \frac{1 + 2b}{b^2 + t^2}\right]^{1/2} \right\} \quad (6.41)$$

$$\varphi = 2 \arctan\left(\frac{\sqrt{\text{ch}^2(2u) - 1}}{\sin(2v)}\right), \quad \varphi_0 = \arctan\left(\frac{2bt}{1 + t^2 - b^2}\right). \quad (6.42)$$

## 6.5. Numerische Ergebnisse und Vergleich mit exakten Resultaten

Wir wollen nun das asymptotische Ergebnis (6.40) mit exakten Resultaten vergleichen. In [25] wird

$$\langle \sigma_1^z \sigma_{m+1}^z \rangle_{T,h} - \langle \sigma_1^z \rangle_{T,h} \langle \sigma_{m+1}^z \rangle_{T,h} = - \left[ \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dp}{2\pi} \frac{\cos(mp)}{1 + \exp\left\{\frac{h-4J \cos(p)}{T}\right\}} \right]^2 \quad (6.43)$$

## 6. Die Korrelationsfunktion $\langle \sigma_1^z \sigma_{m+1}^z \rangle$

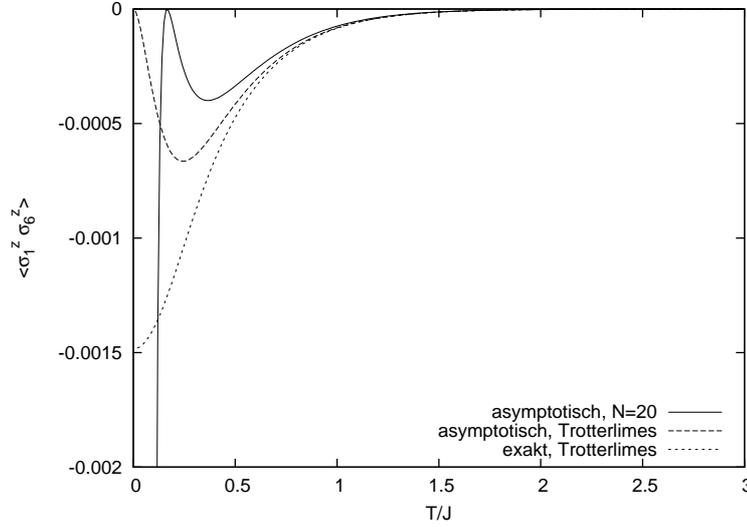


Abbildung 6.1.:  $\langle \sigma_1^z \sigma_{m+1}^z \rangle$ -Korrelation für  $m = 5$  und  $J = h = 1$ . Exakte und asymptotische Werte stimmen oberhalb von ca.  $T = 1.5J$  gut überein.

gezeigt. Bei der Erzeugung der numerischen Ergebnisse wurden neben den obigen, nur im Trotter-Limes gültigen Ausdrücken auch Kurven für endliche Trotter-Zahl generiert. Dazu wurden die Bethe-Ansatz-Zahlen für bestimmte Parametersätze ausgerechnet, so dass auf dieser Grundlage die Amplituden und Korrelationslängen bestimmt werden konnten.

Die Abbildungen 6.1 bis 6.2 zeigen die  $\langle \sigma_1^z \sigma_{m+1}^z \rangle$ -Korrelationsfunktion für  $m = 5, 10$  in Abhängigkeit von der Temperatur. Es sind sowohl die exakten Korrelationen dargestellt, als auch die asymptotischen Kurven im Trotter-Limes bzw. für endliche Trotter-Zahl. Es wird deutlich, dass die Konvergenz der asymptotischen Kurven gegen die exakte Kurve für längere Abstände ( $m = 10$ ) schon bei wesentlich tieferen Temperaturen einsetzt als auf kürzeren Distanzen ( $m = 5$ ). Außerdem ist an dem divergenten Verhalten der asymptotischen Kurven endlicher Trotter-Zahl für tiefe Temperaturen deutlich zu sehen, dass nur bis zu einem Temperaturbereich von ca.  $T = 0.2J$  für endliche Trotterzahl  $N = 20$  noch sinnvolle Resultate erzielt werden. Abbildung 6.3 zeigt den prozentualen Fehler der asymptotischen Kurve bezogen auf die exakte Kurve für  $m = 2, 5, 10$ . Es wird deutlich, dass die asymptotische Kurve für kurze Abstände ( $m = 2$ ) schlecht konvergiert, während der Fehler für  $m = 10$  schon für tiefe Temperaturen ( $T = 0.5J$ ) auf nahezu Null absinkt.

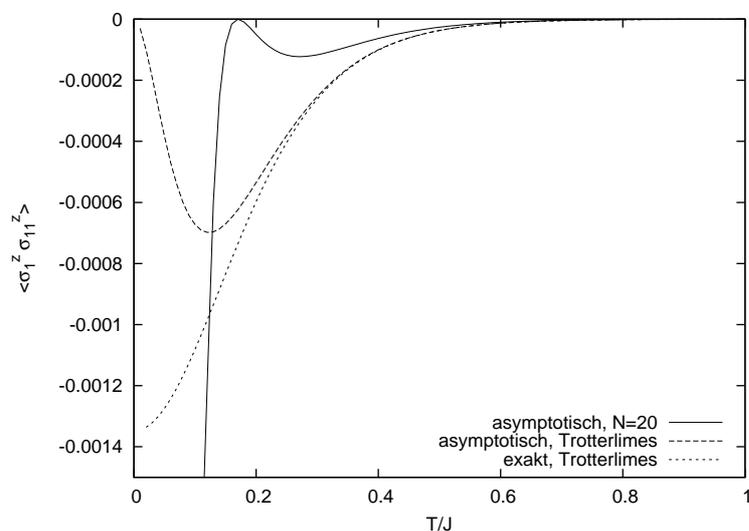


Abbildung 6.2.:  $\langle \sigma_1^z \sigma_{m+1}^z \rangle$ -Korrelation für  $m = 10$  und  $J = h = 1$ . Exakte und asymptotische Werte stimmen oberhalb von ca.  $T = 0.5J$  sehr gut überein.

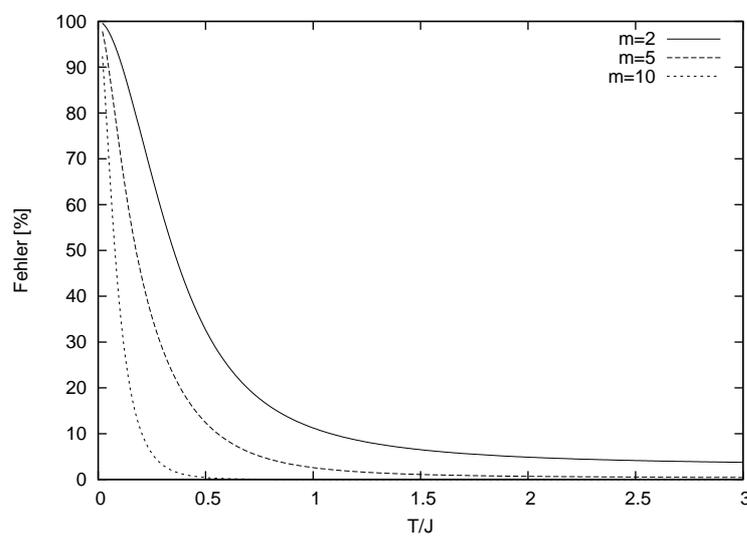


Abbildung 6.3.: Prozentualer Fehler der asymptotischen Kurve für  $m = 2, 5, 10$ . Für wachsende Abstände und höhere Temperaturen werden sehr gute Ergebnisse erreicht.



## 7. Die Korrelationsfunktion $\langle \sigma_1^- \sigma_{m+1}^+ \rangle$

In diesem Kapitel betrachten wir die asymptotische Entwicklung der Korrelationsfunktion  $\langle \sigma_1^- \sigma_{m+1}^+ \rangle$ . Wenn wir hier wie in Kapitel 6 einen vollständigen Satz von normierten Eigenzuständen einschieben, ergibt sich

$$\langle \sigma_1^- \sigma_{m+1}^+ \rangle = \lim_{N \rightarrow \infty} \sum_{n=0}^{2^N - 1} \left( \frac{\Lambda_n}{\Lambda_0} \right)^m \frac{\langle \Psi_0 | B(0) | \Psi_n \rangle \langle \Psi_n | C(0) | \Psi_0 \rangle}{\Lambda_n \langle \Psi_n | \Psi_n \rangle \Lambda_0 \langle \Psi_0 | \Psi_0 \rangle}. \quad (7.1)$$

Der Vektor  $|\Psi_0\rangle$  beschreibt den Grundzustand mit  $N/2$  vielen Bethe-Ansatz-Zahlen; die Vektoren  $|\Psi_n\rangle$  beschreiben die Eigenvektoren der angeregten Zustände. Die Matrixelemente in obiger Entwicklung sind nur dann ungleich Null, wenn die  $|\Psi_n\rangle$  durch  $N/2 - 1$  viele Bethe-Ansatz-Zahlen bestimmt sind, also  $M_h - M_p = 1$  gilt. Damit folgt

$$\langle \Psi_0 | = \langle 0 | C(\lambda_1) \dots C(\lambda_{N/2}), \quad (7.2)$$

$$\langle \Psi_n | = \langle 0 | C(\mu_1) \dots C(\mu_{N/2-1}), \quad (7.3)$$

$$|\Psi_n\rangle = B(\mu_1) \dots B(\mu_{N/2-1}) |0\rangle, \quad (7.4)$$

wobei die  $\lambda_j$  Lösungen der Bethe-Ansatz-Gleichungen für  $M = N/2$  gerade sind, während die  $\mu_j$  Lösungen der Bethe-Ansatz-Gleichungen für  $M = N/2 - 1$  ungerade beschreiben.

Wir definieren nun die Amplituden der Formfaktorentwicklung als

$$A_n(\{\lambda_j\}_{j=1}^{N/2} | \{\mu_j\}_{j=1}^{N/2-1}) := \frac{\langle \Psi_0 | B(0) | \Psi_n \rangle \langle \Psi_n | C(0) | \Psi_0 \rangle}{\Lambda_n \langle \Psi_n | \Psi_n \rangle \Lambda_0 \langle \Psi_0 | \Psi_0 \rangle} =: A_n. \quad (7.5)$$

### 7.1. Berechnung der Amplituden

In diesem Kapitel werden wir die Amplituden  $A_n$  der Formfaktorentwicklung zuerst für die  $XXZ$ -Kette bei endlicher Temperatur untersuchen und danach in einem kompakten Ausdruck für den  $XX$ -Limes angeben.

Wir nutzen die Ergebnisse aus [23], um die Skalarprodukte, aus denen die  $A_n$  bestehen,

zu bestimmen. Sei  $\{\mu_j^+\}_{j=1}^{N/2} = \{\mu_1, \dots, \mu_{N/2-1}, 0\}$ , so folgt

$$\begin{aligned} \frac{\langle \Psi_n | C(0) | \Psi_0 \rangle}{\Lambda_0 \langle \Psi_0 | \Psi_0 \rangle} = & \frac{1}{a(0)(1 + \mathbf{a}(0))} \left[ \prod_{j=1}^{N/2} \frac{\text{sh}(\lambda_j)}{\text{sh}(\lambda_j + \eta)} \right] \left[ \prod_{j=1}^{N/2} \frac{a(\mu_j^+)(1 + \mathbf{a}(\mu_j^+))}{a(\lambda_j)\mathbf{a}'(\lambda_j)} \left( \prod_{k=1}^{N/2} \frac{\text{sh}(\lambda_j - \mu_k^+ - \eta)}{\text{sh}(\lambda_j - \lambda_k + \eta)} \right) \right] \\ & \times \left[ \prod_{1 \leq j < k \leq N/2} \frac{\text{sh}(\lambda_j - \lambda_k)}{\text{sh}(\mu_j^+ - \mu_k^+)} \right] \det[G(\lambda_j, \mu_k^+)]_{j,k=1, \dots, N/2}. \end{aligned} \quad (7.6)$$

Hier ist  $G(\lambda, \mu)$  die in [23] definierte Dichtefunktion für die  $XXZ$ -Kette bei endlicher Temperatur.

Für den zweiten Teil der Amplitude gilt

$$\begin{aligned} \langle \Psi_0 | B(0) | \Psi_n \rangle = & \frac{\left[ \prod_{j=1}^{N/2} d(\lambda_j) a(\mu_j^+) \right] \left[ \prod_{j,k=1}^{N/2} \text{sh}(\lambda_j - \mu_k^+ + \eta) \right]}{\left[ \prod_{1 \leq j < k \leq N/2} \text{sh}(\mu_k^+ - \mu_j^+) \text{sh}(\lambda_j - \lambda_k) \right]} \\ & \times \det[\hat{N}_0(\lambda_j, \mu_k^+)]_{j,k=1, \dots, N/2}, \end{aligned} \quad (7.7)$$

$$\begin{aligned} \langle \Psi_n | \Psi_n \rangle = & \frac{\left[ \prod_{j=1}^{N/2-1} d(\mu_j) a(\mu_j) \right] \left[ \prod_{j,k=1}^{N/2-1} \text{sh}(\mu_j - \mu_k + \eta) \right]}{\left[ \prod_{1 \leq j < k \leq N/2-1} \text{sh}(\mu_k - \mu_j) \text{sh}(\mu_j - \mu_k) \right]} \\ & \times \det[\hat{N}_1(\mu_j, \mu_k)]_{j,k=1, \dots, N/2-1} \end{aligned} \quad (7.8)$$

mit

$$N_0(\lambda_j, \mu_k) = t(\lambda_j, \mu_k) - t(\mu_k, \lambda_j) \mathbf{a}(\mu_k), \quad (7.9)$$

$$N_1(\mu_j, \mu_k) = \delta_j^k \frac{\mathbf{a}'_1(\mu_j)}{\mathbf{a}_1(\mu_j)} + \frac{\text{sh}(2\eta)}{\text{sh}(\mu_j - \mu_k + \eta) \text{sh}(\mu_j - \mu_k - \eta)}. \quad (7.10)$$

Dabei ist  $t(\lambda, \mu) = \frac{\text{sh}(\eta)}{\text{sh}(\lambda - \mu) \text{sh}(\lambda - \mu + \eta)}$  und die Hilfsfunktion  $\mathbf{a}_1$  wird im  $XXZ$ -Fall durch

$$\mathbf{a}_1(\lambda) = \frac{d(\lambda)}{a(\lambda)} \left[ \prod_{j=1}^{N/2-1} \frac{\text{sh}(\lambda - \mu_j + \eta)}{\text{sh}(\lambda - \mu_j - \eta)} \right] \quad (7.11)$$

gebildet. Für den Eigenwert der angeregten Zustände gilt

$$\Lambda_n = a(\lambda) \left[ \prod_{j=1}^{N/2-1} \frac{\text{sh}(\lambda - \mu_j - \eta)}{\text{sh}(\lambda - \lambda_j)} \right] (1 + \mathbf{a}_1(\lambda)). \quad (7.12)$$

Fügen wir diese Ergebnisse zusammen, so erhalten wir für die Amplitude das

**Lemma 5.** Für die Amplituden der Formfaktorentwicklung der  $\langle \sigma_1^- \sigma_{m+1}^+ \rangle$ -Korrelationen gilt im allgemeinen  $XXZ$ -Fall der Ausdruck

$$\begin{aligned}
 A_n = & \frac{\left[ \prod_{j=1}^{N/2} \prod_{k=1}^{N/2-1} \text{sh}^2(\lambda_j - \mu_k + \eta) \right]}{\left[ \prod_{j,k=1}^{N/2-1} \text{sh}(\mu_j - \mu_k + \eta) \right] \left[ \prod_{j,k=1}^{N/2} \text{sh}(\lambda_j - \lambda_k + \eta) \right]} \\
 & \times \left[ \prod_{j=1}^{N/2-1} \frac{-1}{\text{sh}(\mu_j) \text{sh}(\mu_j + \eta)} \right] \left[ \prod_{j=1}^{N/2} \text{sh}(\lambda_j) \text{sh}(\lambda_j + \eta) \right] \frac{\left[ \prod_{j=1}^{N/2-1} (1 + \mathbf{a}(\mu_j)) \right]}{1 + \mathbf{a}_1(0)} \\
 & \times \left[ \prod_{j=1}^{N/2} \frac{1}{\mathbf{a}'(\lambda_j)} \right] \frac{\det[G(\lambda_j, \mu_k^+)]_{j,k=1,\dots,N/2} \det[N_0(\lambda_j, \mu_k^+)]_{j,k=1,\dots,N/2}}{\det[N_1(\mu_j, \mu_k)]_{j,k=1,\dots,N/2-1}}. \quad (7.13)
 \end{aligned}$$

### 7.1.1. Der $XX$ -Limes

Wir führen nun in (7.13) den  $XX$ -Limes durch, indem wir  $\Delta$  gegen Null gehen lassen. Unter Benutzung von (4.10) folgt nach einfacher Rechnung der kompakte Ausdruck gemäß

**Korrolar 2.** Für die Amplituden der Formfaktorentwicklung der  $\langle \sigma_1^- \sigma_{m+1}^+ \rangle$ -Korrelationen gilt im  $XX$ -Fall der Ausdruck

$$A_n = \frac{1}{4} \left[ \prod_{j=1}^{N/2} \frac{\tanh(\lambda_j)}{\mathbf{a}'(\lambda_j)} \right] \left[ \prod_{j=1}^{N/2-1} \frac{-\coth(\mu_j)}{\mathbf{a}'_1(\mu_j)} \right] \frac{1 + \mathbf{a}_0(0)}{1 + \mathbf{a}_1(0)} \left\{ \det \left[ \frac{2}{\text{sh}(\lambda_j - \mu_k^+)} \right]_{j,k=1,\dots,N/2} \right\}^2, \quad (7.14)$$

mit  $\mathbf{a}_1$  nach (7.11) und  $\mathbf{a} = \mathbf{a}_0 = -\mathbf{a}_1$ .

Es ist zu beachten, dass in diesem Ausdruck noch die expliziten Bethe-Ansatz-Zahlen stehen. Die Eliminierung dieser Bethe-Ansatz-Zahlen, beispielsweise durch geeignete Integralausdrücke wie es in anderen Fällen möglich ist, ist selbst im  $XX$ -Limes immer noch ein offenes Problem.

## 7.2. Korrelationslängen

Wir wollen nun die Korrelationslänge bestimmen, welche die Asymptotik von  $\langle \sigma_1^- \sigma_{m+1}^+ \rangle$  für lange Abstände dominiert. Es muss also wieder das Minimum von  $\text{Re} [\ln(\Lambda_0/\Lambda)]$  berechnet werden. Dabei ist zu beachten, dass  $M_h - M_p = 1$  gilt. Wir haben schon bei der Diskussion der Korrelationslängen in Kapitel 6 gesehen, dass jedes Teilchen-Loch-Paar positiv zu  $\text{Re} [\ln(\Lambda_0/\Lambda)]$  beiträgt. Damit ist klar, dass eine Anregung mit  $M_h = 1$ ,  $M_p = 0$  im hier betrachteten Fall den Betrag von  $\text{Re} \ln(\Lambda_0/\Lambda)$  minimiert.

Für  $M_h = 1$ ,  $M_p = 0$  gilt

$$\text{Re} \left[ \ln \left( \frac{\Lambda_0}{\Lambda} \right) \right] = \ln \left( \frac{\text{ch}(2u_h) + \cos(2v_h)}{\text{ch}(2u_h) - \cos(2v_h)} \right) + \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dp}{2\pi} \ln \left| \coth \left( \frac{1}{2T} (h - 4J \cos(p)) \right) \right|. \quad (7.15)$$

Man sieht leicht, dass dieser Term für  $v_h = -\pi/4$  Null ist ( $u_h > 0$ ). Damit ist das eindeutige Minimum des Realteils bei  $q = 0$  gefunden und es gilt

$$\text{ch}(2u_h) = \sin(\kappa) \coth(p). \quad (7.16)$$

Aus den allgemeinen Betrachtungen der Korrelationslänge in Kapitel 5.3.3 folgt dann

$$\ln \left( \frac{\Lambda_0}{\Lambda} \right) = i\pi + \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dp}{2\pi} \ln \left| \coth \left( \frac{h - 4J \cos(p)}{2T} \right) \right| =: \frac{1}{\xi_{\pm}}, \quad (7.17)$$

analog zu [61], wobei zu beachten ist, dass sich die  $p_F$ -Anteile hier nicht-trivial gegenseitig aufheben.

### 7.3. Formfaktorentwicklung

Wir betrachten nun die Formfaktorentwicklung und erhalten aus (7.17) als asymptotisches Ergebnis für große Abstände  $m \rightarrow \infty$

$$\langle \sigma_1^- \sigma_{m+1}^+ \rangle = e^{-\frac{m}{\xi_{\pm}}} A_1 \quad (7.18)$$

Dabei wird  $\xi_{\pm}$  durch (7.17) definiert. Die Amplitude  $A_1$  entspricht (7.14), wobei die  $\lambda_j$  weiterhin die Bethe-Ansatz-Zahlen des Grundzustands für  $N/2 - M$  gerade beschreiben, während die  $\mu_j$  die Bethe-Ansatz-Zahlen für  $N/2 - M$  ungerade mit herausgenommener Lochlösung ( $q = 0$ ) sind.

### 7.4. Numerische Ergebnisse und Vergleich mit exakten Resultaten

Die Abbildungen 7.1-7.3 zeigen die asymptotischen Kurven aus der Formfaktorentwicklung gemeinsam mit den exakten Ergebnissen aus der Integraldarstellung gemäß Kapitel 4 für  $m = 1, 2, 3$  bei  $J = h = 1$ .

Es wird deutlich, dass die Übereinstimmung schlechter ist, als bei den  $zz$ -Korrelationen in Kapitel 6. Dies scheint darin begründet zu sein, dass nur für kurze Abstände (bis  $m = 3$ ) exakte Resultate zum Testen der Langabstands-Asymptotik erzeugt werden konnten, da die Vielzahl von Integralen sowie die großen Determinanten für große Abstände nur mit einigem numerischen Aufwand zu bestimmen wären.

Wir geben im Folgenden die Argumente an, welche die Korrektheit der Implementierung stützen.

1. Die numerisch aus den Bethe-Ansatz-Zahlen erzeugten Korrelationslängen stimmen mit den exakten Korrelationslängen gemäß (7.17) überein (vgl. Abb. 7.4). Dies verifiziert die Berechnung und Auswahl der Bethe-Ansatz-Zahlen und damit die numerische Bestimmung des Vorfaktors  $\exp(-m/\xi) = [\ln(\Lambda_n/\Lambda_0)]^m$ .

2. Das analytische Ergebnis für  $m = 1$  wurde mit den entsprechenden Ergebnissen aus [27] verglichen und zeigt hier Übereinstimmung. Dies bestärkt das Vertrauen in die Determinantendarstellung gemäß Kapitel 4.
3. Für  $N = 2$  kann man analytisch zeigen, dass die Amplituden  $A_n$  für große  $T$  gegen  $1/2$  laufen. Dieses Verhalten zeigen auch die numerischen Ergebnisse für  $A_n$ , und zwar erwartungsgemäß universell auch für große  $N$ . Dies deutet auf die Korrektheit der numerischen Berechnung der Amplituden hin.

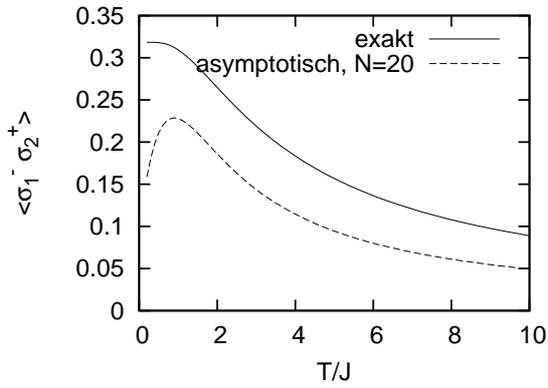


Abbildung 7.1.:  $\langle \sigma_1^- \sigma_{m+1}^+ \rangle$  für  $m = 1$ .

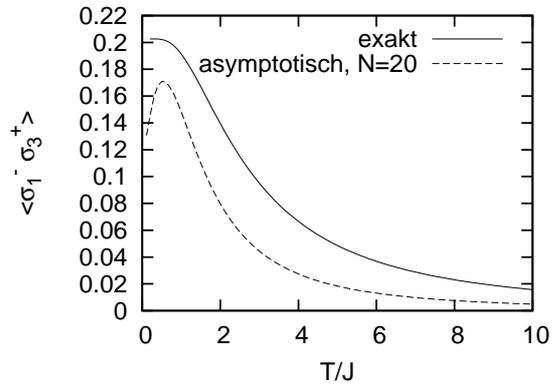


Abbildung 7.2.:  $\langle \sigma_1^- \sigma_{m+1}^+ \rangle$  für  $m = 2$ .

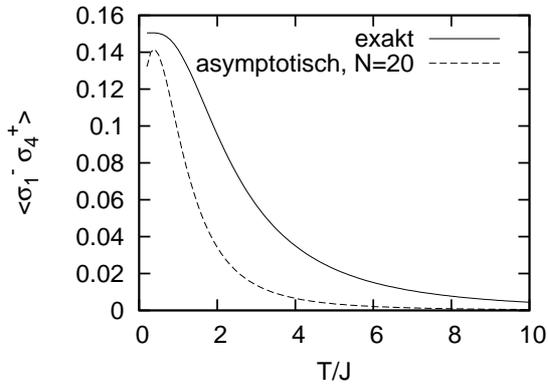


Abbildung 7.3.:  $\langle \sigma_1^- \sigma_{m+1}^+ \rangle$  für  $m = 3$ .

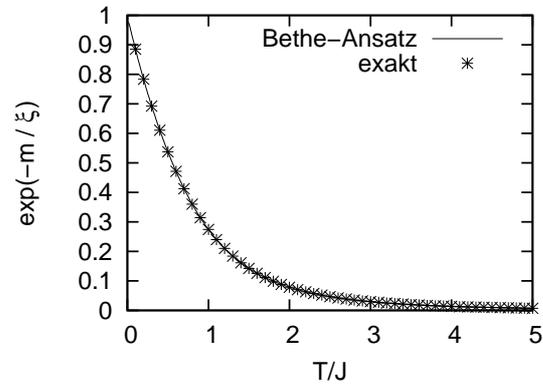


Abbildung 7.4.:  $\exp\{-m/\xi\}$  für  $m = 3$ .



## 8. Zusammenfassung und Ausblick

In dieser Arbeit wurden statische Korrelationen eindimensionaler Heisenberg-Ketten untersucht. Dabei wurden zwei Hauptziele verfolgt. Zum einen wurde die Integraldarstellung der Dichtematrixelemente, die für endliche Temperatur im thermodynamischen Limes gemäß [22] bereits bekannt war, auf Heisenberg-Ketten endlicher Länge bei  $T = 0$  übertragen. Außerdem stand noch die Transformation der Integraldarstellung der Dichtematrixelemente für endliche Temperatur in den  $XX$ -Limes aus. Zum anderen wurde das asymptotische Verhalten von Korrelationsfunktionen bei endlicher Temperatur für große Abstände untersucht. Dazu wurde die Formfaktorentwicklung der  $\langle \sigma^z \sigma^z \rangle$ - und  $\langle \sigma^- \sigma^+ \rangle$ -Korrelationen betrachtet.

Die technische Basis zum Erreichen der obigen Ziele bildet der algebraische Bethe-Ansatz. Er ermöglicht es, den Hamilton-Operator der  $XXZ$ -Kette und ihrer Grenzfälle zu diagonalisieren. Dabei sind zwei Zugänge zu unterscheiden. So ist es einerseits möglich, den Hamilton-Operator durch eine Transfermatrix auszudrücken und diese zu diagonalisieren. Die Eigenzustände der Transfermatrix entsprechen dann direkt den Eigenzuständen der Kette und die Eigenwerte sind unmittelbar mit deren Energiespektrum verbunden. Andererseits ist es möglich, den Hamilton-Operator mit Hilfe der Quanten-Transfermatrix zu formulieren und diese im Bethe-Ansatz zu diagonalisieren. Hier sind die Eigenwerte mit der Zustandsumme des Systems bzw. mit den Korrelationslängen verknüpft, während der führende Eigenvektor alle Informationen über die Korrelationen enthält [53] und die weiteren Eigenvektoren die konstanten Terme in der Asymptotik der Korrelationsfunktionen bestimmen. In der vorliegenden Arbeit wurden beide Zugänge benutzt und in Kapitel 2 eingeführt.

Der erste Hauptteil dieser Arbeit beschäftigt sich mit dem erstgenannten Ziel, der Bestimmung von Korrelationsfunktionen auf Grundlage von Integraldarstellungen für Dichtematrixelemente. So wurde in Kapitel 3 dieser Arbeit eine Integraldarstellung für Dichtematrixelemente der endlich langen  $XXZ$ -Kette bei  $T = 0$  mit Hilfe des Transfermatrixformalismus bestimmt. Hintergrund dabei war die Beobachtung, dass sich integrable Systeme endlicher Kettenlänge auf ähnliche Weise beschreiben lassen, wie entsprechende Systeme bei endlicher Temperatur im thermodynamischen Limes. Diese Integraldarstellung konnte im isotropen Limes faktorisiert werden und ermöglichte die numerische Untersuchung von Nächste-Nachbar- und Übernächste-Nachbar-Korrelationsfunktionen mit sehr hoher Präzision. Der Einfluss der endlichen Kettenlänge konnte als Korrektur der asymptotischen Werte dargestellt werden. Die Bestimmung dieser *finite-size*-Korrekturen wurde in der Notation von [39] durchgeführt, während der Faktorisierungsalgorithmus aus [13] auf das hier vorliegende Problem umformuliert werden konnte. Die Faktorisierung für den allgemei-

nen Fall (d.h. die allg.  $XXZ$ -Kette) ist mittlerweile geleistet [12, 14] und sollte auch für  $T = 0$ ,  $L < \infty$  möglich sein. Um  $\langle \sigma^- \sigma^+ \rangle$ -Korrelationen im  $XX$ -Limes exakt berechnen zu können, war die Transformation der Integraldarstellung für die Dichtematrixelemente aus [22] in den  $XX$ -Limes notwendig. Die hier erzielten Ergebnisse ermöglichten eine Kontrolle des im zweiten Hauptteil untersuchten asymptotischen Verhaltens.

Die Untersuchung der Asymptotik von Korrelationsfunktionen für endliche Temperatur, das zweite Hauptziel dieser Arbeit, wurde in Teil II angegangen. Grundlegend für die Untersuchung der Asymptotik war die detaillierte Analyse des Bethe-Ansatzes im  $XX$ -Limes in Kapitel 5. Sie beinhaltete eine genaue Untersuchung der Lage der Bethe-Ansatz-Zahlen. Es konnte gezeigt werden, dass diese sich im  $XX$ -Limes auf klar definierten Trajektorien bewegen. Diese Trajektorien konnten explizit bestimmt werden. Zudem war die genaue Untersuchung der Eigenwerte der QTM nach Betrag und Phase notwendig, um die in der jeweiligen Formfaktorentwicklung dominierenden Korrelationslängen zu identifizieren. Es konnten explizite Ergebnisse für die Korrelationslängen beliebiger Anregungen der  $XX$ -Kette hergeleitet werden. Aufbauend auf diesen Vorarbeiten wurden zwei Beispiele für Korrelationen näher untersucht. Einerseits wurde in Kapitel 6 die Asymptotik der  $\langle \sigma^z \sigma^z \rangle$ -Korrelationsfunktion im  $XX$ -Limes bestimmt. Hier war es möglich, einen einfachen Ausdruck für die Amplituden der Formfaktorentwicklung anzugeben. Zusätzlich ist es gelungen, eine exakte asymptotische Formel für den Trotterlimes zu bestimmen. Die gewonnenen Ergebnisse wurden numerisch untersucht. Es zeigte sich, dass die asymptotische Formel schon für Abstände  $m = 10$  bei recht tiefen Temperaturen ( $T = 0.5J$ ) eine sehr gute Approximation der vollen Korrelation darstellt. Andererseits wurde die  $\langle \sigma^- \sigma^+ \rangle$ -Korrelationsfunktion in Kapitel 7 untersucht. Hier war es möglich, für die Amplituden im  $XXZ$ - und  $XX$ -Fall Ausdrücke anzugeben, die noch die expliziten Bethe-Ansatz-Zahlen enthalten. Der Ausdruck für den  $XX$ -Limes wurde numerisch ausgewertet. Dies wurde dadurch vereinfacht, dass die Bethe-Ansatz-Gleichungen im  $XX$ -Limes entkoppeln. Es war jedoch nicht möglich, ein überzeugendes asymptotisches Verhalten – verglichen mit den exakten Kurven aus Kapitel 4 – zu erhalten. Dies wurde auch dadurch erschwert, dass die Vielzahl von Integralen im exakten Ausdruck aus Kapitel 4 nur für kleine  $m$  mit angemessenem Aufwand zu bestimmen sind.

Als zentrales offenes Problem bleibt die weitere Vereinfachung der Amplituden der Formfaktorentwicklung für die  $\langle \sigma^- \sigma^+ \rangle$ -Korrelationsfunktion bestehen. So wäre die Herleitung einer Integraldarstellung für die Amplituden erstrebenswert, welche die Bethe-Ansatz-Zahlen nur noch implizit in der Hilfsfunktion  $\mathfrak{a}(\lambda)$  enthält. Es ist wahrscheinlich, dass eine Lösung dieser Aufgabe für das  $XX$ -Modell wertvolle Hinweise für die Bearbeitung der allgemeinen  $XXZ$ -Kette liefert. Auch die Betrachtung der Formfaktorentwicklung der  $\langle \sigma^z \sigma^z \rangle$ -Korrelationen für die  $XXZ$ -Kette steht noch aus. Dort ist zu erwarten, dass die Herleitung eines kompakten Ausdrucks für die Amplituden einfacher ist als für die  $\langle \sigma^- \sigma^+ \rangle$ -Korrelationen.

## A. Nebenbemerkungen zu Kapitel 3

### A.1. Der Limes $L \rightarrow \infty$

Wir betrachten hier den Limes  $L \rightarrow \infty$  der Integralgleichung

$$\ln \mathbf{a}(\lambda) = i\gamma L + L \ln \left( \frac{\text{sh}(\lambda - \frac{i\gamma}{2})}{\text{sh}(\lambda + \frac{i\gamma}{2})} \right) - \int_{\mathcal{C}} \frac{d\omega}{2\pi i} K_{i\gamma}(\lambda - \omega) \ln(1 + \mathbf{a}(\omega)) \quad (\text{A.1})$$

mit Twist-Winkel  $\phi = 0$ . Für  $L \rightarrow \infty$  dominiert die Inhomogenität  $L \ln \left( \frac{\text{sh}(\lambda - \frac{i\gamma}{2})}{\text{sh}(\lambda + \frac{i\gamma}{2})} \right)$ . Dabei muß beachtet werden, ob der Imaginärteil von  $\lambda$  kleiner oder größer Null ist:

1. Im  $\lambda > 0$ :  $\mathbf{a}(\lambda)$  geht exponentiell gegen Null.
2. Im  $\lambda < 0$ :  $\mathbf{a}(\lambda)$  geht exponentiell gegen Unendlich.

Somit trägt nur noch der untere Teil der Kontur  $\mathcal{C}$  bei, und mit  $1/L \ln \mathbf{a}(\lambda) =: \varepsilon(\lambda)$  folgt

$$\varepsilon(\lambda) = i\gamma + \ln \left( \frac{\text{sh}(\lambda - \frac{i\gamma}{2})}{\text{sh}(\lambda + \frac{i\gamma}{2})} \right) - \frac{1}{L} \int_{-\infty - \frac{i\gamma}{2} + \frac{i\epsilon}{2}}^{\infty - \frac{i\gamma}{2} + \frac{i\epsilon}{2}} \frac{d\omega}{2\pi i} K_{i\gamma}(\lambda - \omega) \ln(1 + \mathbf{a}(\omega)). \quad (\text{A.2})$$

Da

$$\partial_{\lambda} \varepsilon(\lambda) = \frac{\text{sh}(i\gamma)}{\text{sh}(\lambda + \frac{i\gamma}{2}) \text{sh}(\lambda - \frac{i\gamma}{2})} \quad (\text{A.3})$$

gilt, folgt aus (A.2) nach Differentiation bezüglich  $\lambda$  und mit  $-2\pi i \rho(\lambda) = \partial_{\lambda} \varepsilon(\lambda)$  die bekannte Gleichung [33]

$$-2\pi i \rho(\lambda) = \frac{\text{sh}(i\gamma)}{\text{sh}(\lambda + \frac{i\gamma}{2}) \text{sh}(\lambda - \frac{i\gamma}{2})} + \int_{-\infty}^{\infty} dx i K_{i\gamma}(\lambda - x) \rho(x). \quad (\text{A.4})$$

### A.2. Verbindung zwischen der Dichtefunktion $G$ und dem Eigenwert

Wir wollen hier zeigen, wie die Funktion  $G(\lambda, \xi)$  mit dem Eigenwert der Transfermatrix zusammenhängt.

Dazu betrachten wir  $\Lambda(\lambda)$  in Abhängigkeit von  $\bar{\mathbf{a}}$  an der Stelle  $\lambda = \frac{i\gamma}{2} - i\delta$ :

$$\ln \Lambda(\frac{i\gamma}{2} - i\delta) = -i\phi + i\frac{L}{2}(\gamma - \pi) + \ln \Phi(i\delta) - \int_{\mathcal{C}} \frac{d\omega}{2\pi} K_{\frac{i\gamma}{2}}(i\gamma - \omega - i\delta) \ln(1 - \bar{\mathbf{a}}(\omega)). \quad (\text{A.5})$$

Wir bilden nun die Ableitung nach  $\phi$  und lassen dann  $\delta \rightarrow 0$  gehen. Mit  $\tilde{m}_0(\phi) := \partial_\phi \ln \Lambda(\frac{i\gamma}{2})$  und  $-\sigma(\omega) := -\partial_\phi \ln \mathbf{a}(\omega)$  folgt dann

$$\tilde{m}_0(\phi) = -i + \int_{\mathcal{C}} \frac{d\omega}{2\pi i} iK_{\frac{i\gamma}{2}}(i\gamma - \omega) \frac{\sigma(\omega)}{1 + \mathbf{a}(\omega)}. \quad (\text{A.6})$$

Wir betrachten nun die Integralgleichungen für  $\bar{\mathbf{a}}$  und  $G(\lambda, \xi)$ :

$$\begin{aligned} \partial_\phi \ln \bar{\mathbf{a}}(\lambda) &= 2i + \int_{\mathcal{C}} \frac{d\omega}{2\pi} K_{i\gamma}(\lambda - \omega) \partial_\phi \ln(1 + \bar{\mathbf{a}}(\omega)), \\ \Leftrightarrow \sigma(\lambda) &= -2i + \int_{\mathcal{C}} \frac{d\omega}{2\pi i} iK_{i\gamma}(\lambda - \omega) \frac{\sigma(\omega)}{1 + \mathbf{a}(\omega)}, \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

$$G(\lambda, 0) = iK_{\frac{i\gamma}{2}}(i\gamma - \lambda) + \int_{\mathcal{C}} \frac{d\omega}{2\pi i} iK_{i\gamma}(\lambda - \omega) \frac{G(\omega, 0)}{1 + \mathbf{a}(\omega)}. \quad (\text{A.8})$$

Zudem definieren wir  $e(\lambda) := -2i$  sowie  $g(\lambda) := iK_{\frac{i\gamma}{2}}(\lambda)$  und den Integraloperator für eine Testfunktion  $\varphi$

$$(\hat{K}\varphi)(\lambda) = \int_{\mathcal{C}} \frac{d\omega}{2\pi i} iK_{i\gamma}(\lambda - \omega) \frac{\varphi(\omega)}{1 + \mathbf{a}(\omega)}. \quad (\text{A.9})$$

Von diesem Integraloperator existiere die Resolvente  $(1 - \hat{K})^{-1}$  und ihre Neumann-Reihe. Dann folgt (vgl Gl. (73) aus [23]) mit  $\sigma(\lambda) = [(1 - \hat{K})^{-1}e(\lambda)]$  und  $G(\lambda, 0) = [(1 - \hat{K})^{-1}g(\lambda)]$  für beliebige  $g(\lambda)$  und  $e(\lambda)$  unter Benutzung der Neumann-Reihe

$$\int_{\mathcal{C}} \frac{d\omega}{2\pi i} \frac{g(\omega)\sigma(\omega)}{1 + \mathbf{a}(\omega)} = - \int_{\mathcal{C}} \frac{d\omega}{\pi} \frac{G(\omega, 0)}{1 + \mathbf{a}(\omega)}. \quad (\text{A.10})$$

Dies setzen wir in (A.6) ein, und erhalten mit  $m_0 = \frac{1}{2i}\tilde{m}_0 = \frac{1}{2i}\partial_\phi \ln \Lambda(\frac{i\gamma}{2})$

$$m_0(\phi) = -\frac{1}{2} - \int_{\mathcal{C}} \frac{d\omega}{2\pi i} \frac{G(\omega, 0)}{1 + \mathbf{a}(\omega)} = \frac{1}{2} + \int_{\mathcal{C}} \frac{d\omega}{2\pi i} \frac{G(\omega, 0)}{1 + \bar{\mathbf{a}}(\omega)}. \quad (\text{A.11})$$

## B. Formelsammlung zur Numerik in Kapitel 3.7

### B.1. Die Funktionen $\gamma$ , $\gamma_{xx}$ und $\gamma_{xy}$ im homogenen Limes

- Die Funktion  $\gamma(\frac{i}{2}, \frac{i}{2})$ :

$$\gamma(\frac{i}{2}, \frac{i}{2}) = \Psi(\frac{i}{2}, \frac{i}{2}) - 1, \quad (\text{B.1})$$

$$\Psi(\frac{i}{2}, \frac{i}{2}) = 2\mathcal{K}(0) - \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\nu}{\text{sh}(\pi\nu)} \left[ \frac{\frac{1}{i}g_0^+(\nu)}{1 + \bar{\mathfrak{b}}^{-1}(\nu)} + \frac{\frac{1}{i}g_0^-(\nu)}{1 + \mathfrak{b}^{-1}(\nu)} \right], \quad (\text{B.2})$$

$$\mathcal{K}(0) = \psi(1) - \psi(\frac{1}{2}) = 2 \ln 2 \quad \text{mit} \quad \psi(x): \text{Digamma-Funktion.} \quad (\text{B.3})$$

- Die Funktion  $\gamma_{xx}(\frac{i}{2}, \frac{i}{2})$ :

$$\begin{aligned} \gamma_{xx}(\frac{i}{2}, \frac{i}{2}) &= \zeta(3, \frac{1}{2}) - \zeta(3, 1) \\ &\quad - \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\nu}{\text{sh}(\pi\nu)} \left[ \frac{\frac{1}{i}j_0^+(\nu)}{1 + \bar{\mathfrak{b}}^{-1}(\nu)} + \frac{\frac{1}{i}j_0^-(\nu)}{1 + \mathfrak{b}^{-1}(\nu)} \right] + 2\Psi(\frac{i}{2}, \frac{i}{2}). \end{aligned} \quad (\text{B.4})$$

- Die Funktion  $\gamma_{xy}(\frac{i}{2}, \frac{i}{2})$ :

$$\begin{aligned} \gamma_{xy}(\frac{i}{2}, \frac{i}{2}) &= \zeta(3, 1) - \zeta(3, \frac{1}{2}) \\ &\quad - \pi \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\nu \text{ch}(\pi\nu)}{\text{sh}^2(\pi\nu)} \left[ \frac{\frac{1}{i}h_0^+(\nu)}{1 + \bar{\mathfrak{b}}^{-1}(\nu)} + \frac{\frac{1}{i}h_0^-(\nu)}{1 + \mathfrak{b}^{-1}(\nu)} \right] - 2\Psi(\frac{i}{2}, \frac{i}{2}). \end{aligned} \quad (\text{B.5})$$

- $\zeta(s, a)$  ist die Hurwitz-Zeta-Funktion [64]:

$$\zeta(s, a) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{(k+a)^s} \quad \text{für} \quad \text{Re } s > 1. \quad (\text{B.6})$$

## B.2. Die Funktionen $g_0^{(+)}$ und $g_0^{(-)}$ auf der reellen Achse

- Integralgleichung für  $g_0^{(+)}(x)$  in Abhängigkeit von  $\mathfrak{b}$  und  $\bar{\mathfrak{b}}$ :

$$\begin{aligned} \frac{1}{i}g_0^{(+)}(x) &= -\frac{\pi}{\operatorname{sh}(\pi x)} + \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\nu}{2\pi} \mathcal{K}(x - \nu) \frac{\frac{1}{i}g_0^{(+)}(\nu)}{1 + \bar{\mathfrak{b}}^{-1}(\nu)} \\ &\quad - \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\nu}{2\pi} \mathcal{K}(x - \nu + i - i0) \frac{\frac{1}{i}g_0^{(-)}(\nu)}{1 + \bar{\mathfrak{b}}^{-1}(\nu)}. \end{aligned} \quad (\text{B.7})$$

- Integralgleichung für  $g_0^{(-)}(x)$  in Abhängigkeit von  $\mathfrak{b}$  und  $\bar{\mathfrak{b}}$ :

$$\begin{aligned} \frac{1}{i}g_0^{(-)}(x) &= -\frac{\pi}{\operatorname{sh}(\pi x)} + \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\nu}{2\pi} \mathcal{K}(x - \nu) \frac{\frac{1}{i}g_0^{(-)}(\nu)}{1 + \bar{\mathfrak{b}}^{-1}(\nu)} \\ &\quad - \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\nu}{2\pi} \mathcal{K}(x - \nu - i + i0) \frac{\frac{1}{i}g_0^{(+)}(\nu)}{1 + \bar{\mathfrak{b}}^{-1}(\nu)}. \end{aligned} \quad (\text{B.8})$$

- Die erste Ableitung der Funktionen  $g_0^{(\pm)}$  mit  $h_0^{(\pm)}(x) := \partial_\xi g_\xi^{(\pm)}(x)|_{\xi=0}$ :

$$\begin{aligned} \frac{1}{i}h_0^+(x) &= -\pi^2 \frac{\operatorname{ch}(\pi x)}{\operatorname{sh}^2(\pi x)} + \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\nu}{2\pi} \mathcal{K}(x - \nu) \frac{\frac{1}{i}h_0^+(\nu)}{1 + \bar{\mathfrak{b}}^{-1}(\nu)} \\ &\quad - \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\nu}{2\pi} \mathcal{K}(x - \nu + i - i0) \frac{\frac{1}{i}h_0^-(\nu)}{1 + \bar{\mathfrak{b}}^{-1}(\nu)}, \end{aligned} \quad (\text{B.9})$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{i}h_0^-(x) &= -\pi^2 \frac{\operatorname{ch}(\pi x)}{\operatorname{sh}^2(\pi x)} + \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\nu}{2\pi} \mathcal{K}(x - \nu) \frac{\frac{1}{i}h_0^-(\nu)}{1 + \bar{\mathfrak{b}}^{-1}(\nu)} \\ &\quad - \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\nu}{2\pi} \mathcal{K}(x - \nu - i + i0) \frac{\frac{1}{i}h_0^+(\nu)}{1 + \bar{\mathfrak{b}}^{-1}(\nu)}. \end{aligned} \quad (\text{B.10})$$

- Die zweite Ableitung der Funktionen  $g_0^\pm$  mit  $j_0^{(\pm)}(x) := \partial_\xi^2 g_\xi^{(\pm)}(x)|_{\xi=0}$ :

$$\begin{aligned} \frac{1}{i}j_0^+(x) &= -\frac{\operatorname{ch}^2(\pi x) + 1}{\operatorname{ch}^2(\pi x) - 1} \frac{\pi^3}{\operatorname{sh}(\pi x)} + \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\nu}{2\pi} \mathcal{K}(x - \nu) \frac{\frac{1}{i}j_0^+(\nu)}{1 + \bar{\mathfrak{b}}^{-1}(\nu)} \\ &\quad - \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\nu}{2\pi} \mathcal{K}(x - \nu + i - i0) \frac{\frac{1}{i}j_0^-(\nu)}{1 + \bar{\mathfrak{b}}^{-1}(\nu)}, \end{aligned} \quad (\text{B.11})$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{i}j_0^-(x) &= -\frac{\operatorname{ch}^2(\pi x) + 1}{\operatorname{ch}^2(\pi x) - 1} \frac{\pi^3}{\operatorname{sh}(\pi x)} + \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\nu}{2\pi} \mathcal{K}(x - \nu) \frac{\frac{1}{i}j_0^-(\nu)}{1 + \bar{\mathfrak{b}}^{-1}(\nu)} \\ &\quad - \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\nu}{2\pi} \mathcal{K}(x - \nu - i + i0) \frac{\frac{1}{i}j_0^+(\nu)}{1 + \bar{\mathfrak{b}}^{-1}(\nu)}. \end{aligned} \quad (\text{B.12})$$

- Die Funktion  $\mathcal{K}(x)$ :

$$\mathcal{K}(x) = i\partial_x \ln \left[ \frac{\Gamma(1 - i\frac{x}{2})\Gamma(\frac{1}{2} + i\frac{x}{2})}{\Gamma(1 + i\frac{x}{2})\Gamma(\frac{1}{2} - i\frac{x}{2})} \right]. \quad (\text{B.13})$$

- Für die Implementierung des Kerns nutzen wir die Entwicklung

$$\mathcal{K}(x) = 2 \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k \zeta_a(2k+1) x^{2k}. \quad (\text{B.14})$$

Dabei ist  $\zeta_a(x) = \sum_{k=1}^{\infty} (-1)^{k+1}/k^x$  die alternierende Zeta-Reihe. Für  $\text{Re } x > 1$  ist die Zeta-Funktion  $\zeta(x)$  mit  $\zeta_a(x)$  durch  $\zeta_a(x) = (1 - 2^{1-x})\zeta(x)$  verbunden [1].



## C. Nebenbemerkungen zu Kapitel 5

### C.1. Eigenschaften des größten Eigenwertes der QTM

In diesem Anhang wollen wir in Kürze zeigen, dass der Eigenwert  $\Lambda_0$  der Quanten-Transfermatrix mit  $M_h = M_p = 0$  im  $XX$ -Limes betragsmäßig größer ist als alle anderen Eigenwerte.

Zuerst muss  $\ln(i \coth(z))$  diskutiert werden. Sei  $z = u + iv$ ,  $u, v \in \mathbb{R}$ , so folgt

$$i \coth(z) = |i \coth(z)| e^{i\varphi}, \quad (\text{C.1})$$

$$|i \coth(z)|^2 = \frac{\text{ch}(2u) + \cos(2v)}{\text{ch}(2u) - \cos(2v)}, \quad e^{2i\varphi} = \frac{\sin(2v) + i \text{sh}(2u)}{\sin(2v) - i \text{sh}(2u)}. \quad (\text{C.2})$$

Daraus folgt

$$\begin{aligned} & \text{Re} \left\{ \sum_{j=1}^{M_h} \ln(\coth(\lambda_j^h)) - \sum_{j=1}^{M_p} \ln(\coth(\lambda_j^p)) \right\} \\ &= \frac{1}{2} \left\{ \sum_{j=1}^{M_h} \ln \left( \frac{\text{ch}(2u_j^h) + \cos(2v_j^h)}{\text{ch}(2u_j^h) - \cos(2v_j^h)} \right) - \sum_{j=1}^{M_p} \ln \left( \frac{\text{ch}(2u_j^p) + \cos(2v_j^p)}{\text{ch}(2u_j^p) - \cos(2v_j^p)} \right) \right\} \end{aligned} \quad (\text{C.3})$$

mit  $\lambda_j^h = u_j^h + iv_j^h$ ,  $\lambda_j^p = u_j^p + iv_j^p$ . Man erhält

- für  $N/2 - M$  gerade:

$$\text{Re} \left\{ \sum_{j=1}^{M_h} \ln(\coth(\lambda_j^h)) - \sum_{j=1}^{M_p} \ln(\coth(\lambda_j^p)) \right\} > 0. \quad (\text{C.4})$$

- für  $N/2 - M$  ungerade:

$$\text{Re} \left\{ \sum_{j=1}^{M_h} \ln(\coth(\lambda_j^h)) - \sum_{j=1}^{M_p} \ln(\coth(\lambda_j^p)) \right\} \leq 0. \quad (\text{C.5})$$

Für  $N/2 - M$  ungerade gilt außerdem, dass

$$\int_{-\pi}^{\pi} \frac{dp}{2\pi} \ln \left| \coth \left( \frac{h - 4J \cos(p)}{2T} \right) \right| > 0. \quad (\text{C.6})$$

Damit folgt für alle Eigenwerte  $\Lambda \neq \Lambda_0$

$$\ln \left| \frac{\Lambda_0}{\Lambda} \right| = \text{Re} \left( \ln \frac{\Lambda_0}{\Lambda} \right) > 0 \Leftrightarrow |\Lambda_0| > |\Lambda|. \quad (\text{C.7})$$



# Literaturverzeichnis

- [1] M. Abramowitz and I. A. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions*, Dover Publications, Inc., New York, 1972.
- [2] I. Affleck, *Universal term in the free energy at a critical point and the conformal anomaly*, Phys. Rev. Lett. **56** (1986), 409.
- [3] F. C. Alcaraz and A. L. Malvezzi, *Critical and off-critical properties of the XXZ chain in external homogeneous and staggered magnetic fields*, J. Phys. A: Math. Gen. **19** (1995), 1521.
- [4] N. W. Ashcroft and N. D. Mermin, *Solid State Physics*, Thomson Learning Inc., 1976.
- [5] E. Barouch and B. M. McCoy, *Statistical mechanics of the XY model. II. Spin correlation functions*, Phys. Rev. A **3** (1971), 786.
- [6] R. J. Baxter, *One-dimensional anisotropic Heisenberg chain*, Ann. Phys. (N.Y.) **70** (1971), 323.
- [7] ———, *Partition function of the eight vertex lattice model*, Ann. Phys. **70** (1972), 193.
- [8] ———, *Exactly Solved Models in Statistical Mechanics*, Academic Press, 1982.
- [9] A. A. Belavin, A. M. Polyakov, and A. B. Zamolodchikov, *Infinite conformal symmetry in two-dimensional quantum field theory*, Nucl. Phys. B (1984), 333.
- [10] H. Bethe, *Zur Theorie der Metalle. I. Eigenwerte und Eigenfunktionen der linearen Atomkette*, Z. Phys. **71** (1931), 205.
- [11] H. W. Blöte, J. L. Cardy, and M. P. Nightingale, *Conformal invariance, the central charge, and universal finite-size amplitudes at criticality*, Phys. Rev. Lett. (1986), 742.
- [12] H. E. Boos, J. Damerou, F. Göhmann, A. Klümper, J. Suzuki, and A. Weiße, *Short-distance thermal correlations in the XXZ chain*, J. Stat. Mech. (2008), P08010.
- [13] H. E. 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), 001.

- [14] ———, *Factorization of the finite temperature correlation functions of the XXZ chain in a magnetic field*, J. Phys. A: Math. Gen. **40** (2007), 10699.
- [15] 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.
- [16] J. Damerau, F. Göhmann, N. P. Hasenclever, and A. Klümper, *Density matrices for finite segments of Heisenberg chains of arbitrary length*, J. Phys. A: Math. Theor. **40** (2007), 4439.
- [17] F. H. L. Essler, H. Frahm, F. Göhmann, A. Klümper, and V. E. Korepin, *The One-Dimensional Hubbard Model*, Cambridge University Press, 2005.
- [18] V. E. Korepin F. Göhmann, *Solution of the quantum inverse problem*, J. Phys. A: Math. Gen. **33** (2000), 1199.
- [19] L. D. Faddeev and L. A. Takhtajan, *The quantum method of the inverse problem and the Heisenberg XYZ model*, Russ. Math. Surv. **34** (1979), 11.
- [20] ———, *Spectrum and scattering of excitations in the one-dimensional isotropic Heisenberg model*, Zap. Nauchn. Sem. LOMI **109** (1981), 134.
- [21] I. B. Frenkel and N. Yu. Reshetikhin, *Quantum affine algebras and holonomic difference equations*, Comm. Math. Phys. **146** (1992), 1.
- [22] F. Göhmann, N. P. Hasenclever, and A. Seel, *Finite temperature density matrix and two-point correlations in the antiferromagnetic XXZ chain*, J. Stat. Mech. (2005), P10015.
- [23] F. Göhmann, A. Klümper, and A. Seel, *Integral representations for correlation functions of the XXZ chain at finite temperature*, J. Phys. A: Math. Gen. **37** (2004), 7625.
- [24] ———, *Integral representation of the density matrix of the XXZ chain at finite temperatures*, J. Phys. A: Math. Gen. **38** (2005), 1833.
- [25] F. Göhmann and A. Seel, *The XX and Ising limits in integral formulas for finite-temperature correlation functions of the XXZ chain*, Theor. Math. Phys. **146** (2006), 119.
- [26] V. Grenander and G. Szegö, *Toeplitz Forms and Their Applications*, University of California Press, Berkeley, 1958.
- [27] N. P. Hasenclever, *Integraldarstellung der Dichtematrix-Elemente und Zwei-Punkt-Korrelationen der Spin- $\frac{1}{2}$ -XXZ-Heisenbergkette bei endlicher Temperatur*, Diplomarbeit, BU Wuppertal, 2005.

- 
- [28] W. Heisenberg, *Zur Theorie des Ferromagnetismus*, Z. Phys. **49** (1928), 619.
- [29] L. Hulthén, *Über das Austauschproblem eines Kristalles*, Arkiv för Matematik, Astro-  
nomi och Fysik A **26** (1938), A1.
- [30] E. Ising, *Beitrag zur Theorie des Ferromagnetismus*, Zeitschrift für Physik **31** (1925),  
253.
- [31] M. Jimbo, K. Miki, T. Miwa, and A. Nakayashiki, *Correlation functions of the XXZ  
model for  $\Delta < -1$* , Phys. Lett. A **168** (1992), 256.
- [32] M. Jimbo and T. Miwa, *Algebraic Analysis of Solvable Lattice Systems*, American  
Mathematical Society, 1995.
- [33] N. Kitanine, J. M. Maillet, N. A. Slavnov, and V. Terras, *Spin-spin correlation func-  
tions of the XXZ- $\frac{1}{2}$  Heisenberg chain in a magnetic field*, Nucl. Phys. B **641** (2002),  
487.
- [34] ———, *On the spin-spin correlation functions of the XXZ spin- $\frac{1}{2}$  infinite chain*, J.  
Phys. A: Math. Gen. **38** (2005), 7441.
- [35] N. Kitanine, J. M. Maillet, and V. Terras, *Form factors of the XXZ Heisenberg spin- $\frac{1}{2}$   
finite chain*, Nucl. Phys. B **554** (1999), 647.
- [36] ———, *Correlation functions of the XXZ Heisenberg spin- $\frac{1}{2}$  chain in a magnetic field*,  
Nucl. Phys. B **567** (2000), 554.
- [37] A. Klümper, *Free energy and correlation lengths of quantum chains related to restricted  
solid-on-solid lattice models*, Ann. Physik Lpz. **1** (1992), 540.
- [38] ———, *Thermodynamics of the anisotropic spin-1/2 Heisenberg chain and related  
quantum chains*, Z. Phys. B **91** (1993), 507.
- [39] 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: Math. Gen. **24** (1991),  
3111.
- [40] A. Klümper, J. R. Reyes Martínez, C. Scheeren, and M. Shiroishi, *The spin-1/2 XXZ  
chain at finite magnetic field: Crossover phenomena driven by temperature*, J. Stat.  
Phys. **102** (2000), 937.
- [41] V. G. Knizhnik and A. B. Zamolodchikov, *Current Algebra and Wess-Zumino Model  
in Two-Dimensions*, Nucl. Phys. B **247** (1984), 83.
- [42] V. E. Korepin and O. I. Patu, *XXX Spin Chain: from Bethe Solution to Open Problems*,  
preprint, arXiv:cond-mat/0701491, 2007.

- [43] P. P. Kulish and N. Yu. Reshetikhin, *Generalized Heisenberg ferromagnet and the Gross-Neveu model*, Zh. Eksp. Teor. Fiz. **80** (1981), 214.
- [44] A. Kuniba, K. Sakai, and J. Suzuki, *Continued fraction TBA and functional relations in XXZ model at root of unity*, Nucl. Phys. B **525** (1998), 597.
- [45] W. Lenz, *Beiträge zum Verständnis der magnetischen Eigenschaften in festen Körpern*, Phys. Zeitschrift **21** (1920), 613.
- [46] E. H. Lieb and D. C. Mattis, *Mathematical Physics in One Dimension*, Academic Press, 1966.
- [47] E. H. Lieb, T. D. Schultz, and D. C. Mattis, *Two soluble models of an antiferromagnetic chain*, Ann. Phys. (N.Y.) **16** (1961), 407.
- [48] U. Löw, *Néel order in the two-dimensional  $s = 1/2$ -Heisenberg Model*, preprint, arXiv:cond-mat/0704.0731, 2007.
- [49] J. M. Maillet, *Heisenberg Spin Chains: From Quantum Groups to Neutron Scattering Experiments*, Seminaire Poincare X (2007), 139.
- [50] B. M. McCoy, *Spin Correlation Functions of the X-Y Model*, Phys. Rev. **173** (1968), 531.
- [51] T. Muir, *A Treatise of the Theory of Determinants*, Macmillan and Co., 1882.
- [52] R. Orbach, *Linear antiferromagnetic chain with anisotropic coupling*, Phys. Rev. **112** (1958), 309.
- [53] A. Seel, *Die XXZ-Kette: Statische Korrelationen bei endlichen Temperaturen*, Bergische Universität Wuppertal. Dissertation., 2005.
- [54] M. Shiroishi, M. Takahashi, and Y. Nishiyama, *Emptiness formation probability for the one-dimensional isotropic XY model*, J. Phys. Soc. Jpn. **70** (2001), 3535.
- [55] N. A. Slavnov, *Calculation of scalar products of the wave functions and form factors in the framework of the algebraic Bethe ansatz*, Teor. Mat. Fiz. **79** (1989), 232.
- [56] F. A. Smirnov, *Dynamical symmetries of massive integrable models*, Int. J. Math. Phys. A **7** (1992), 813.
- [57] ———, *Form Factors in Completely Integrable Models of Quantum Field Theory*, Singapore: World Scientific, 1992.
- [58] M. Suzuki, *Transfer-matrix method and Monte Carlo simulation in quantum spin systems*, Phys. Rev. B **31** (1985), 2957.

- [59] 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.
- [60] M. Takahashi, *Half-filled Hubbard model at low temperature*, J. Phys. C **10** (1977), 1289.
- [61] ———, *Correlation length and free energy of the  $S = \frac{1}{2}$  XXZ chain in a magnetic field*, Phys. Rev. B **44** (1991), 12382.
- [62] ———, *Thermodynamics of One-Dimensional Solvable Models*, Cambridge University Press, 1999.
- [63] L. R. Walker, *Antiferromagnetic Linear Chain*, Phys. Rev. **116** (1959), 1089.
- [64] E. T. Whittaker and G. N. Watson, *A Course of Modern Analysis*, fourth ed., Cambridge University Press, 1963.
- [65] T. T. Wu, *Theory of Toeplitz Determinants and the Spin correlations of the two-dimensional Ising Model. I*, Phys. Rev. **149** (1966), 380.
- [66] C. N. Yang and C. P. Yang, *One-Dimensional Chain of Anisotropic Spin-Spin-Interactions. I. Proof of Bethe's Hypothesis for Ground State in a Finite System*, Phys. Rev. **150** (1966), 321.
- [67] ———, *One-Dimensional Chain of Anisotropic Spin-Spin-Interactions. II. Properties of the Ground-State Energy per Lattice Site for an Infinite System*, Phys. Rev. **150** (1966), 327.
- [68] ———, *One-Dimensional Chain of Anisotropic Spin-Spin-Interactions. III. Applications*, Phys. Rev. **151** (1966), 258.



# Danksagung

An dieser Stelle möchte ich allen danken, die durch ihre Anleitung, ihren Rat, ihre Hilfe und ihren Beistand zum Gelingen dieser Arbeit beigetragen haben.

So bin ich in besonderer Weise Herrn Priv.-Doz. Dr. Frank Göhmann zu tiefstem Dank verpflichtet. Er hat diese Arbeit initiiert, von Anfang an betreuend begleitet und stets mit Rat und Hilfe zur Verfügung gestanden.

Genauso danke ich Herrn Prof. Dr. Andreas Klümper, der die Arbeit mit großem Interesse verfolgte, immer diskussionsbereit war und zudem die Begutachtung der Arbeit mit übernommen hat.

Auch Herrn Prof. Dr. Ralf Koppmann möchte ich dafür danken, dass er sich als Mitglied der Prüfungskommission zur Verfügung gestellt hat.

Ebenso möchte ich mich bei allen Mitgliedern des Lehrstuhls „Vielteilchenphysik“ unter Herrn Prof. Dr. Andreas Klümper in aktueller und früherer Besetzung bedanken. Sie alle trugen zu einem freundschaftlichen Arbeitsklima bei und haben bewußt oder unbewußt ihren Anteil zum Gelingen dieser Arbeit beigesteuert.

Unter ihnen möchte ich besonders Herrn Dr. Alexander Seel und Herrn Dr. Jens Damerau hervorheben. Sie haben mich durch stete Hilfs- und Diskussionsbereitschaft sehr unterstützt und in schwierigen Situationen immer wieder ermutigt. Herr Dr. Alexander Seel hat zudem einen Großteil der die Integrationskonturen betreffenden Abbildungen zur Verfügung gestellt. Beiden möchte ich auch dafür danken, dass sie diese Arbeit kritisch Korrektur gelesen haben.

Auch Herrn Dipl.-Phys. Christian Trippe und Herrn Dipl.-Phys. Michael Brockmann danke ich für die Bereitschaft, Teile des Manuskriptes Korrektur zu lesen. Herrn Dipl.-Phys. Christian Trippe danke ich zudem für die Endabnahme.

Zur sprachlichen Glättung des Textes hat Herr Kristof Attendorn entscheidend beigetragen, wofür ich ihm sehr dankbar bin.

Während dieser Arbeit durfte ich die finanzielle Unterstützung des DFG-Graduiertenkollegs „Darstellungstheorie und ihre Anwendung in Mathematik und Physik“ genießen, wofür ich sehr dankbar bin. Allen früheren und aktuellen Kollegiaten danke ich für das freundschaftliche Miteinander.

Meiner Familie, allen voran meiner Frau Benigna Chiara, gebührt steter Dank für alle Unterstützung, Liebe und Geduld.

*Soli Deo Gloria.*