

# Drude-Gewicht bei endlicher Temperatur

von Andreas Klümper und Christina Ballnus

Juli 2018

## Inhaltsverzeichnis

<b>1. Grundlagen</b>	<b>2</b>
1.1. Modell	2
1.2. Eigenschaften der R-Matrix	2
1.3. Thermodynamik	3
1.4. Drudegewicht	3
1.5. Pseudolokale Erhaltungsgrößen	4
<b>2. Mazur-Schranke bei <math>T = \infty</math> nach Pereira et al.</b>	<b>5</b>
<b>3. Mazur-Schranke bei <math>T &lt; \infty</math> mit QTM-Methode</b>	<b>9</b>
3.1. Berechnung der Norm $\ Q(\varphi)\ ^2$	9
3.1.1. Berechnung von $\frac{\partial^2}{\partial \bar{s} \partial s} \langle t_{\mathcal{A}}(\varphi, s), \hat{P} t_{\mathcal{A}}(\varphi, s) \hat{P} \rangle \Big _{s=\bar{s}=0}$	9
3.1.2. Berechnung von $\frac{\partial^2}{\partial \bar{s} \partial s} \ t_{\mathcal{A}}(\varphi, s)\ ^2 \Big _{s=\bar{s}=0}$	12
3.2. Berechnung von $\langle J, Q(\varphi) \rangle$	18
3.3. Grenzfall $T \rightarrow \infty$	21
<b>A. Anhang</b>	<b>21</b>
A.1. Ergänzungen zu Abschnitt 1	21
A.1.1. Getwistete Randbedingungen	21
A.2. Ergänzungen zu Abschnitt 2	24
A.2.1. Dominanter Eigenwert von $\mathcal{T}_1$ bzw. $\mathcal{T}_2$	24
A.2.2. Linker Eigenvektor von $\mathcal{T}_1(\varphi)$ zum Eigenwert $\beta^2$	25
A.2.3. Ableitungen der eingeschränkten Matrizen	26
A.3. Ergänzungen zu Abschnitt 3	26
A.3.1. Anwendung der Integralformel aus [4] für Zweipunkt-Korrelatoren	26
<b>Literaturverzeichnis</b>	<b>27</b>

# 1. Grundlagen

## 1.1. Modell

Der Hamiltonoperator der Spin-1/2-XXZ-Heisenbergkette mit Gitterlänge  $N$  ist gegeben durch  $H = J \sinh(\eta) H_N$  mit

$$H_N = \frac{1}{\sinh(\eta)} \sum_{j=1}^N [\sigma_j^- \sigma_{j+1}^+ + \sigma_j^+ \sigma_{j+1}^- + \frac{\Delta}{2} (\sigma_j^z \sigma_{j+1}^z - 1)], \quad (1)$$

wobei  $\Delta = \cosh(\eta)$  die Anisotropie der Spinkette bestimmt. Es wurden periodische Randbedingungen gewählt:  $\sigma_{N+1}^\alpha = \sigma_1^\alpha$  für  $\alpha = z, \pm$ . Alternativ können getwistete Randbedingungen benutzt werden. Eine Formulierung von Abschnitt 1 mit getwisteten Randbedingungen findet sich in Anhang A.1.1. Der Hamiltonoperator wirkt auf das Tensorprodukt von Vektorräumen  $V = V_1 \otimes V_2 \otimes \cdots \otimes V_N$ , wobei  $V_j = \mathbb{C}^2$  der Quantenraum des Spins auf Gitterplatz  $j$  ist.

Der Hamiltonoperator lässt sich gemäß  $H_N = \sum_{j=1}^N \partial_\varphi \check{R}_{j,j-1}(\varphi) \Big|_{\varphi=0}$  durch die Matrix  $\check{R}(\varphi) = PR(\varphi)$  ausdrücken, wobei  $P$  der Permutationsoperator in  $\mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^2$  ist und

$$R(\varphi) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & b(\varphi) & c(\varphi) & 0 \\ 0 & c(\varphi) & b(\varphi) & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e_1^1 + b(\varphi)e_2^2 & e_2^1 c(\varphi) \\ e_1^2 c(\varphi) & e_2^2 + b(\varphi)e_1^1 \end{pmatrix}_j \quad (2)$$

gilt. Hierbei wurde  $b(\varphi) = \frac{\sinh(\varphi)}{\sinh(\varphi+\eta)}$  und  $c(\varphi) = \frac{\sinh(\eta)}{\sinh(\varphi+\eta)}$  definiert. Die  $e_\beta^\alpha$ ,  $\alpha, \beta \in \{1, 2\}$ , bilden eine Basis von  $\text{End}(\mathbb{C}^2)$  und sind gegeben durch

$$e_1^1 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad e_1^2 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad e_2^1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad e_2^2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (3)$$

## 1.2. Eigenschaften der R-Matrix

Die R-Matrix ist symmetrisch und besitzt folgende Eigenschaften:

$$\begin{aligned} R^\dagger(\varphi) &= R(-\bar{\varphi}) \\ R^{-1}(\varphi) &= R(-\varphi) \\ \sigma_1^y R_{12}^{t_1}(\varphi) \sigma_1^y &= \sigma_2^y R_{12}^{t_2}(\varphi) \sigma_2^y = \frac{b(\varphi)}{a(\varphi)} R_{12}(-\varphi - \eta) \end{aligned} \quad (4)$$

Sie erfüllt außerdem die Yang-Baxter-Gleichung in  $\mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^2$ :

$$R_{12}(\varphi - \mu) R_{13}(\varphi) R_{23}(\mu) = R_{23}(\mu) R_{13}(\varphi) R_{12}(\varphi - \mu) \quad (5)$$

### 1.3. Thermodynamik

Der thermodynamische Erwartungswert eines Operators  $A$  ist definiert durch

$$\langle A \rangle = \frac{\text{tr}_V \{ e^{-\beta H_N} A \}}{Z}, \quad (6)$$

wobei  $Z = \text{tr}_V \{ e^{-\beta H_N} \}$  die kanonische Zustandssumme des Systems ist. Wir definieren ein Skalarprodukt zweier Operatoren  $A, B \in \text{End}(V)$  gemäß  $\langle A, B \rangle = \langle A^\dagger B \rangle$ , sowie die von diesem Skalarprodukt induzierte Norm als  $\|A\| := \sqrt{\langle A, A \rangle}$ .

### 1.4. Drudegewicht

Die Heisenbergsche Bewegungsgleichung des  $s_k^z$ -Operators lautet

$$\frac{\partial s_k^z(t)}{\partial t} = i[H, s_k^z(t)], \quad k = 1, \dots, N, \quad (7)$$

wobei  $s^z = \sigma^z/2$  und  $A(t) = \exp\{iHt\}A\exp\{-iHt\}$ . Mit der lokalen Spinstromdichte

$$j_k^s = i[\sigma_k^+ \sigma_{k+1}^- - \sigma_k^- \sigma_{k+1}^+]. \quad (8)$$

führt diese auf die Kontinuitätsgleichung

$$\frac{\partial s_k^z(t)}{\partial t} = -[j_k^s(t) - j_{k-1}^s(t)], \quad k = 1, \dots, N, \quad (9)$$

Der Gesamtpinstromoperator  $J$  ergibt sich als Summe über die lokalen Beträge,  $J = \sum_{k=1}^N j_k^s$ . Wir interessieren uns für die lineare Antwort von  $J$  auf den Gradienten eines magnetischen Feldes. Erhaltungsgrößen  $Q_n$  können einen Strom davon abhalten, vollständig zu zerfallen, was zu ballistischem Transport und einem endlichen Drudegewicht

$$\begin{aligned} D(T) &= \lim_{t \rightarrow \infty} \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{2LT} \langle J(t), J(0) \rangle \\ &\geq \frac{1}{4T} \sum_n D_{Q_n}. \end{aligned} \quad (10)$$

mit  $D_{Q_n} := \frac{2}{L} \frac{|\langle J, Q_n \rangle|^2}{\|Q_n\|^2}$  führt.[1] Die Operatoren  $Q_n$  sind orthogonalisiert in der Form  $\langle Q_k, Q_l \rangle = \delta_{kl} \|Q_k\|^2$ . Man erwartet, dass nur lokale/pseudolokale Erhaltungsgrößen  $Q_n$  mit  $\langle J, Q_n \rangle \neq 0$  zu einer endlichen Schranke, der sog. Mazur-Schranke  $D_{Q_n}$ , führen können. Eine Operatorfolge  $(A_N)_{N \in \mathbb{N}}$  heißt pseudolokal, wenn es eine positive Konstante  $K > 0$  gibt, so dass  $\|A_N\|^2 \leq K \cdot N$ .

## 1.5. Pseudolokale Erhaltungsgrößen

Wir definieren den zweiparametrischen Laxoperator

$$\begin{aligned}
\mathcal{L}_j(\varphi, s) &= R_{j, \mathcal{A}}(\varphi) \\
&= \sinh(\varphi) \cosh(\eta S_{\mathcal{A}}^z(s)) + \cosh(\varphi) \sigma_j^z \sinh(\eta S_{\mathcal{A}}^z(s)) + \sinh(\eta) (\sigma_j^+ S_{\mathcal{A}}^- + \sigma_j^- S_{\mathcal{A}}^+(s)) \\
&= \begin{pmatrix} \sinh(\varphi + \eta S_{\mathcal{A}}^z(s)) & \sinh(\eta) S_{\mathcal{A}}^- \\ \sinh(\eta) S_{\mathcal{A}}^+ & \sinh(\varphi - \eta S_{\mathcal{A}}^z(s)) \end{pmatrix}_j
\end{aligned} \tag{11}$$

mit Spinoperatoren  $S_{\mathcal{A}}^\alpha$ ,  $\alpha = \pm, z$ , die der Quantengruppenalgebra  $U_q[SU(2)]$  genügen:

$$\begin{aligned}
[S^z, S^\pm] &= \pm S^\pm, \\
[S^+, S^-] &= \frac{\sinh(2\eta S^z)}{\sinh(\eta)}.
\end{aligned} \tag{12}$$

Eine Darstellung dieser Operatoren ist gegeben durch

$$\begin{aligned}
S_{\mathcal{A}}^z(s) &= \frac{1}{\eta} \sum_{k=0}^{\infty} (s + \eta k) |k\rangle \langle k| \\
S_{\mathcal{A}}^+(s) &= - \sum_{k=0}^{\infty} \frac{\sinh(2s + \eta k)}{\sinh(\eta)} |k+1\rangle \langle k| \\
S_{\mathcal{A}}^- &= \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\sinh(\eta k)}{\sinh(\eta)} |k-1\rangle \langle k|.
\end{aligned} \tag{13}$$

Die Vertauschungsrelationen (12) stellen sicher, dass die Yang-Baxter-Gleichung

$$R_{12}(\varphi - \mu) \mathcal{L}_1(\varphi) \mathcal{L}_2(\mu) = \mathcal{L}_2(\mu) \mathcal{L}_1(\varphi) R_{12}(\varphi - \mu) \tag{14}$$

in  $\mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^2 \otimes \mathcal{A}$  erfüllt ist.

Für Anisotropien  $\eta = \frac{l\pi}{m}i$ , mit  $l, m \in \mathbb{Z}^+$  teilerfremd,  $l \leq m$ , wird  $\mathcal{A}$  endlich-dimensional,  $\mathcal{A} = \text{lsp}\{|k\rangle : k = 0, \dots, m-1\}$ . Für solche Anisotropie-Werte definieren wir die Quantentransfermatrix  $t_{\mathcal{A}}(\varphi, s) = \text{tr}_{\mathcal{A}}\{T_{\mathcal{A}}(\varphi, s)\}$  mit der Monodromiematrix

$$T_{\mathcal{A}}(\varphi, s) = \mathcal{L}_N(\varphi, s) \dots \mathcal{L}_1(\varphi, s). \tag{15}$$

Wegen Gl. (14) gilt

$$[t_a(\varphi), t_{\mathcal{A}}(\mu, s)] = 0 \quad \forall \quad \varphi, \mu \in \mathbb{C}. \tag{16}$$

Wegen  $H_N(\phi) = \frac{d}{d\varphi} \ln t_a(\varphi, \phi)|_{\varphi=0}$  ist  $t_{\mathcal{A}}(\varphi, s)$  also im System erhalten. Eine Erhaltungsgröße, die zusätzlich ungerade unter Paritätstransformation ist, ist gegeben durch die zweiparametrische Größe

$$I(\varphi, s) = (-i)^N \left[ \hat{P} t_{\mathcal{A}}(\varphi, s) \hat{P} - t_{\mathcal{A}}(\varphi, s) \right]. \tag{17}$$

Hierbei ist  $\hat{P}$  der Paritätsoperator, der als Spiegelung an der Verbindungslinie zwischen den Plätzen  $j = 1$  und  $j = N$  der Spinkette definiert werden kann:  $\hat{P}\sigma_j^\alpha\hat{P} = \sigma_{N-j+1}^\alpha$ . Wir werden uns im Folgenden auf die speziellen Anisotropie-Werte beschränken, da sich die Erhaltungsgröße nur für solche Werte überhaupt definieren lässt.

Die Wahl  $s = 0$  des Spin-Parameters führt – unabhängig vom Parameter  $\eta$  – auf eine 1d-Darstellung, in der gilt  $S^\alpha(0) = 0$  für  $\alpha = z, \pm$  und daher  $\mathcal{L}(\varphi, 0) = \sinh(\varphi)\text{id}$ . Die Wahl  $s = -\frac{\eta}{2}$  führt auf eine 2d-Darstellung. Mit der Zuordnung  $|0\rangle \mapsto \begin{pmatrix} 0 & 1 \end{pmatrix}^t$ ,  $|1\rangle \mapsto \begin{pmatrix} 1 & 0 \end{pmatrix}^t$ , gilt  $S^\alpha(-\frac{\eta}{2}) = s^\alpha$  für  $\alpha = z, \pm$ , wobei  $s^z = \sigma^z/2$  und  $s^\pm = \sigma^\pm$  gesetzt wurde. Für die L-Matrix findet man  $\mathcal{L}(\varphi, -\frac{\eta}{2}) = \sinh(\varphi + \frac{\eta}{2})R(\varphi - \frac{\eta}{2})$ . Insbesondere gilt also  $\mathcal{L}(\frac{\eta}{2}, -\frac{\eta}{2}) = \sinh(\eta)\text{id}$ . Und es ist

$$t_a(\varphi, \phi) = \left( \frac{1}{\sinh(\varphi + \eta)} \right)^N t_{\mathcal{A}}(\varphi + \frac{\eta}{2}, -\frac{\eta}{2}, \phi). \quad (18)$$

## 2. Mazur-Schranke bei $T = \infty$ nach Pereira et al.

Bei unendlicher Temperatur vereinfachen sich die Erwartungswerte erheblich, sodass eine Mazur-Schranke analytisch leicht bestimmt werden kann. Folgende Rechnung orientiert sich an dem Paper [2] nach Pereira et al., wobei dort der Spektralparameter speziell  $\varphi = \frac{\pi i}{2}$  gewählt wurde. Eine solche Einschränkung liegt hier nicht vor.

Wir drücken zunächst den zweiparametrischen Laxoperator gemäß

$$\mathcal{L}_j(z, u) = i \sum_{\alpha \in J} \sigma_j^\alpha A_{\mathcal{A}}^\alpha(\varphi, s) \quad (19)$$

durch die vier Operatoren

$$\begin{aligned} A^0(\varphi, s) &= -i \sinh(\varphi) \cosh(\eta S^z(s)), \\ A^z(\varphi, s) &= -i \cosh(\varphi) \sinh(\eta S^z(s)), \\ A^\pm(\varphi, s) &= -i \sinh(\eta) S^\mp(s) \end{aligned} \quad (20)$$

aus. Dabei wurde die Indexmenge  $J = \{0, z, \pm\}$  definiert und  $\sigma^0 = \mathbb{1}$  gesetzt. Die Norm  $\|I(\varphi, s)\|^2$  lässt sich dann durch zwei Matrizen

$$T_1(\varphi, s, \mathfrak{s}) = \sum_{\alpha \in J} C_\alpha (A^\alpha(\varphi, s))^* \otimes A^\alpha(\varphi, \mathfrak{s}), \quad (21)$$

$$T_2(\varphi, s, \mathfrak{s}) = \sum_{\alpha \in J} C_\alpha (A^\alpha(\varphi, s))^* \otimes (A^\alpha(\varphi, \mathfrak{s}))^t \quad (22)$$

ausdrücken, wobei  $C_\alpha = \frac{1}{2} \text{tr}_V \{ \sigma^\alpha (\sigma^\alpha)^\dagger \}$  gesetzt wurde:

$$\|I(\varphi, s)\|^2 = 2 \text{tr}_{\mathcal{A} \otimes \mathcal{A}} \{ [T_1(\varphi, s, s)]^N - [T_2(\varphi, s, s)]^N \}. \quad (23)$$

Im Folgenden setzen wir  $s = 0$ . Dann gilt  $A^\pm |0\rangle = 0$ , d.h. der Zustand  $|0\rangle$  entkoppelt von den übrigen Zuständen. Definiere  $|r, s\rangle := |r\rangle \otimes |s\rangle$ . Die beiden Matrizen

$T_j(\varphi) := T_j(\varphi, 0, 0)$ ,  $j = 1, 2$ , sind blockdiagonal in Unterräumen der Kroneckerzustände  $\{|r, (\pm r + k) \pmod{m}\rangle : r = 0, \dots, m-1\}$  mit fixiertem  $k = 0, \dots, m$ . Wir sind am Verhalten von Gl. (23) im thermodynamischen Limes ( $N \rightarrow \infty$ ) interessiert. Wir können uns daher auf den Unterraum beschränken, in dem die Matrizen ihren führenden Eigenwert haben. Das ist bei beiden Matrizen der Fall für  $k = 0$ . Innerhalb dieses Unterraums bezeichnen wir  $|r, \pm r\rangle \rightarrow |r\rangle$ .

Die reduzierten Matrizen lauten

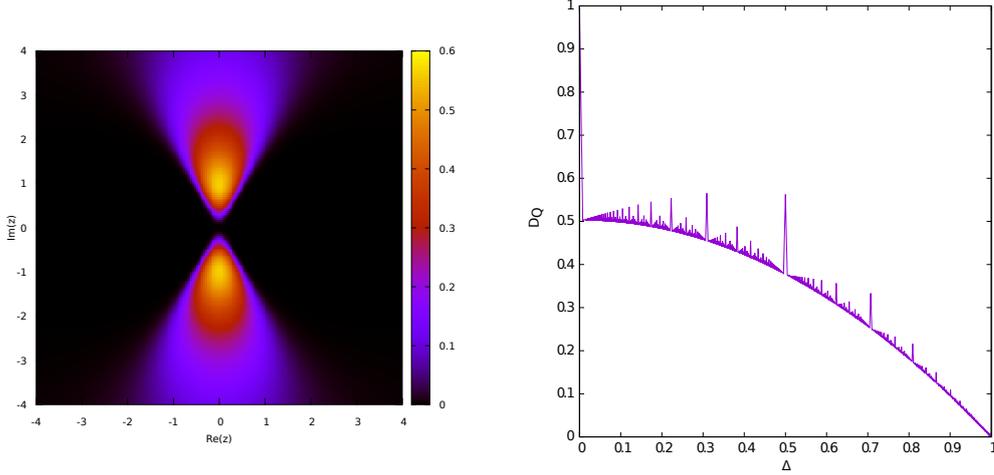
$$\begin{aligned} \mathcal{T}_1(\varphi) &= \sum_{r=0}^{m-1} [\beta^2 \cosh^2(\eta r) - \alpha^2 \sinh^2(\eta r)] |r\rangle \langle r| \\ &\quad - \frac{1}{2} \sum_{r=0}^{m-2} [\sinh^2(\eta r) |r+1\rangle \langle r| + \sinh^2(\eta(r+1)) |r\rangle \langle r+1|], \\ \mathcal{T}_2(\varphi) &= \beta^2 |0\rangle \langle 0| + (-1)^l \sum_{r=1}^{m-1} [\beta^2 \cosh^2(\eta r) + \alpha^2 \sinh^2(\eta r)] |r\rangle \langle r| \\ &\quad + \frac{(-1)^l}{2} \sum_{r=1}^{m-2} \sinh(\eta r) \sinh(\eta(r+1)) [|r+1\rangle \langle r| + |r\rangle \langle r+1|], \end{aligned} \tag{24}$$

wobei  $\alpha = |\cosh(\varphi)|$  und  $\beta = |\sinh(\varphi)|$  gesetzt wurde. Beide Matrizen sind tridiagonal und für die Nebendiagonalelemente gilt  $\langle k | \mathcal{T}_j | k+1 \rangle \langle k+1 | \mathcal{T}_j | k \rangle \geq 0 \forall k = 0, \dots, m-2$ , für  $j = 1, 2$ . Damit sind alle Eigenwerte der Matrizen reell.

Der dominante Eigenwert beider Matrizen ist für  $\left| |\operatorname{Im}(\varphi)| - \frac{\pi}{2} \right| < \frac{\pi}{2m}$  einfach und gegeben durch  $\beta^2$ . Dies ist in Anhang A.2.1 gezeigt. Der rechtsseitige Eigenvektor zum Eigenwert  $\beta^2$  ist jeweils gegeben durch  $|0\rangle$ . Die Matrix  $\mathcal{T}_1(\varphi)$  ist im Gegensatz zu  $\mathcal{T}_2(\varphi)$  nicht symmetrisch. In Anhang A.2.2 wird gezeigt, dass ihr linksseitiger Eigenvektor zum Eigenwert  $\beta^2$  gegeben ist durch

$$\langle 0_L | = \sum_{r=0}^{m-1} (-1)^r \frac{\sin(2(m-r)\operatorname{Im}\varphi)}{\sin(2m\operatorname{Im}\varphi)}. \tag{25}$$

Es gilt  $\langle 0_L, 0 \rangle = 1$ . Wegen der Projektionseigenschaften  $\lim_{N \rightarrow \infty} \mathcal{T}_1^N(\varphi) = \beta^{2N} |0\rangle \langle 0_L|$  und  $\lim_{N \rightarrow \infty} \mathcal{T}_2^N(\varphi) = \beta^{2N} |0\rangle \langle 0|$  erhalten wir schließlich  $\|I(\varphi, s)\|^2 = 0$ , d.h.  $I(\varphi, 0)$  ist keine pseudolokale Erhaltungsgröße.



(a) Mazur-Schranke  $D_Q$  in Abhängigkeit des Spektralparameters  $z = e^\varphi$  für  $m = 3$  und  $l = 1$ . (b) Mazur-Schranke  $D_Q$  in Abhängigkeit des Anisotropie-Parameters  $\Delta = \cos(\gamma)$  für  $\varphi = \frac{i\pi}{2}$ .

Wir wollen im Folgenden jedoch zeigen, dass die abgeleitete Erhaltungsgröße

$$Q(\varphi) := \left. \frac{\partial I(\varphi, s)}{\partial s} \right|_{s=0} \quad (26)$$

pseudolokal ist. Die Norm  $\|Q(\varphi)\|^2$  lässt sich gemäß

$$\begin{aligned} \|Q(\varphi)\|^2 &= 2\text{tr}_{\mathcal{A} \otimes \mathcal{A}} \left\{ \left. \frac{\partial^2}{\partial s \partial \bar{s}} \mathcal{T}_1^N(\varphi) \right|_{s=0} \right\} - 2\text{tr}_{\mathcal{A} \otimes \mathcal{A}} \left\{ \left. \frac{\partial^2}{\partial s \partial \bar{s}} \mathcal{T}_2^N(\varphi) \right|_{s=0} \right\} \\ &= 2N \text{tr}_{\mathcal{A} \otimes \mathcal{A}} \left\{ \mathcal{T}_1^{N-1}(\varphi) \mathcal{T}_1^{(1,1)}(\varphi) - \mathcal{T}_2^{N-1}(\varphi) \mathcal{T}_2^{(1,1)}(\varphi) \right\} \\ &\quad + 2N \sum_{n=0}^{N-2} \text{tr}_{\mathcal{A} \otimes \mathcal{A}} \left\{ \mathcal{T}_1^{(1,0)}(\varphi) \mathcal{T}_1^n(\varphi) \mathcal{T}_1^{(0,1)}(\varphi) \mathcal{T}_1^{N-2-n}(\varphi) \right\} \\ &\quad - 2N \sum_{n=0}^{N-2} \text{tr}_{\mathcal{A} \otimes \mathcal{A}} \left\{ \mathcal{T}_2^{(1,0)}(\varphi) \mathcal{T}_2^n(\varphi) \mathcal{T}_2^{(0,1)}(\varphi) \mathcal{T}_2^{N-2-n}(\varphi) \right\} \end{aligned} \quad (27)$$

durch Ableitungen der Matrizen  $\mathcal{T}_1(\varphi)$  und  $\mathcal{T}_2(\varphi)$  ausdrücken, wobei im zweiten Schritt

$$\mathcal{T}_j^{(n,m)}(\varphi) := \left. \frac{\partial^n}{\partial s^n} \frac{\partial^m}{\partial \bar{s}^m} \mathcal{T}_j(\varphi) \right|_{s=0} \quad (28)$$

gesetzt wurde. Indem die expliziten Ausdrücke für die auftretenden  $\mathcal{T}^{(n,m)}(\varphi)$  (s. Anhang A.2.3) betrachtet und deren Wirkung auf die Zustände  $|0\rangle$  und  $\langle 0_L|$  bestimmt wird, kann die Norm mittels der Projektionseigenschaften von  $\mathcal{T}_1(\varphi)$  und  $\mathcal{T}_2(\varphi)$  leicht bestimmt werden. Unter Verwendung von

$$\begin{aligned} \mathcal{T}_1^{(1,0)}(\varphi) |0\rangle &= \mathcal{T}_1^{(0,1)}(\varphi) |0\rangle = 0, \\ \mathcal{T}_2^{(1,0)}(\varphi) |0\rangle &= \mathcal{T}_2^{(0,1)}(\varphi) |0\rangle = 0, \\ \langle 0_L | \mathcal{T}_1^{(1,1)} |0\rangle &= \alpha^2 - 2 \frac{\sin(2(m-1)\text{Im}\varphi)}{\sin(2m\text{Im}\varphi)}, \quad \langle 0 | \mathcal{T}_2^{(1,1)} |0\rangle = \alpha^2 \end{aligned} \quad (29)$$

ergibt sich für große  $N$

$$\frac{\|Q(\varphi)\|^2}{N} \sim -4\beta^{2N-2} \frac{\sin(2(m-1)\text{Im}\varphi)}{\sin(2m\text{Im}\varphi)}. \quad (30)$$

Also ist  $Q(\varphi)$  tatsächlich eine pseudolokale Erhaltungsgröße.

Um die Mazur-Schranke  $D_Q$  für das Drude-Gewicht für  $Q(\varphi)$  zu bestimmen, muss noch der Überlapp von  $Q(\varphi)$  mit dem Spinstromoperator  $J$  berechnet werden. Eine explizite Rechnung liefert für das Betragsquadrat für große  $N$  folgendes Verhalten:

$$|\langle J, Q(\varphi) \rangle|^2 \sim N^2 \sin^2(\gamma) \beta^{2N-4}. \quad (31)$$

Hierbei wurde  $\gamma := \frac{l\pi}{m} = \text{Im}\eta$  definiert.

Für das Drude-Gewicht gilt somit die Abschätzung  $D \geq \frac{D_Q}{4T}$  mit der Mazur-Schranke

$$D_Q = -\frac{\sin^2(\gamma)}{2\beta^2} \frac{\sin(2m\text{Im}\varphi)}{\sin(2(m-1)\text{Im}\varphi)}. \quad (32)$$

Für  $\varphi \rightarrow \frac{i\pi}{2}$  geht die Schranke über in das Resultat  $D_Q = \frac{\sin^2(\gamma)}{2} \frac{m}{m-1}$  von Peireira et al. In Abb. 1a ist die Mazur-Schranke in Abhängigkeit von  $z = e^\varphi$  für  $m = 3$  und  $l = 1$  aufgetragen. Der Konus entspricht  $z$ -Werten mit  $|\text{Im}(\varphi) - \frac{\pi}{2}| < \frac{\pi}{2m}$ . In Abb. 1b ist  $D_Q$  in Abhängigkeit des Anisotropie-Parameters  $\Delta = \cos(\gamma)$  für  $\varphi = \frac{i\pi}{2}$  gezeigt.

In Abb. 2 ist außerdem ein Vergleich zwischen dem analytischen Ergebnis und numerischen Rechnungen bei endlichem  $N$  zu sehen.

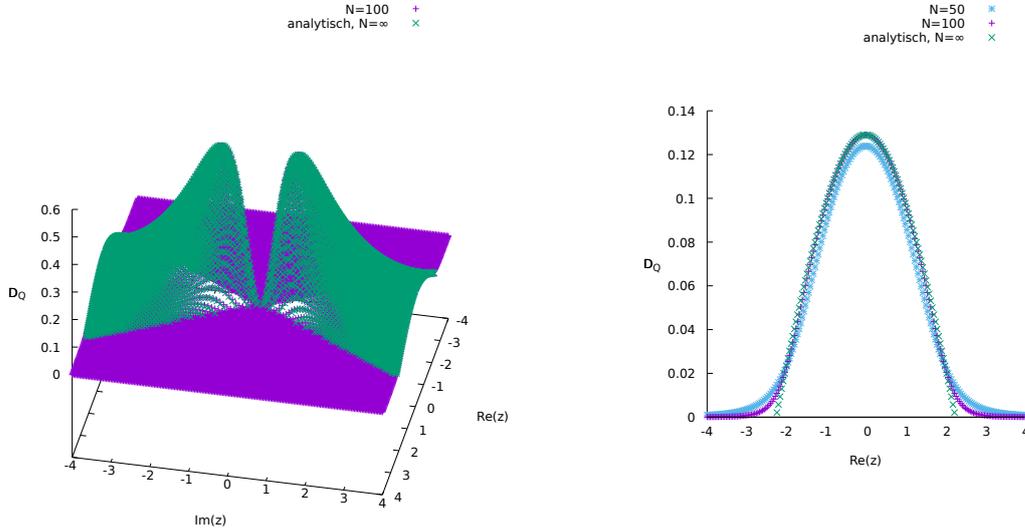


Abbildung 2: Vergleich des analytischen Ergebnisses für  $D_Q$  ( $N = \infty$ ) mit dem numerischen Ergebnis bei  $N = 50$  und  $N = 100$ .

### 3. Mazur-Schranke bei $T < \infty$ mit QTM-Methode

In diesem Abschnitt soll die Mazur-Schranke zur pseudolokalen Erhaltungsgröße  $Q(\varphi)$  aus Gl. (26) auf einer alternativen Route berechnet werden, die eine Rechnung auch für endliche Temperaturen zugänglich macht.

Es sei  $a = \mathbb{C}^2$  Hilfsraum. Definiere die Operatoren

$$\begin{aligned} L_j(\varphi) &= R_{ja}(\lambda - \varphi) \\ T_a(\varphi) &= L_N(\varphi) \dots L_1(\varphi) \\ t_a(\varphi) &= \text{tr}_a\{T_a(\varphi)\} \\ \bar{L}_j(\varphi) &= R_{aj}(\varphi - \lambda) \\ \bar{T}_a(\varphi) &= \bar{L}_1(\varphi) \dots \bar{L}_N(\varphi) \\ \bar{t}_a(\varphi) &= \text{tr}_a\{\bar{T}_a(\varphi)\}. \end{aligned} \tag{33}$$

mit einem komplexen Parameter  $\lambda \in \mathbb{C}$ . Für  $\lambda = 0$  gelten wegen  $R(0) = P$  die Beziehungen

$$\begin{aligned} t_a(\varphi) &= t_a(0) + t'_a(0)\varphi + \mathcal{O}(\varphi^2) = \hat{U}(1 - \varphi H_N + \mathcal{O}(\varphi^2)) \\ \bar{t}_a(\varphi) &= \bar{t}_a(0) + \bar{t}'_a(0)\varphi + \mathcal{O}(\varphi^2) = (1 + \varphi H_N + \mathcal{O}(\varphi^2))\hat{U}^{-1}, \end{aligned} \tag{34}$$

wobei  $\hat{U} = P_{12} \dots P_{N-1,N}$  der Shift-Operator ist. Damit folgt

$$e^{-\beta H_N} = \lim_{M \rightarrow \infty} \left( \bar{t}_a(-\tau) t_a(\tau) \right)^{M/2}, \tag{35}$$

wobei  $\tau = \frac{\beta}{M}$  gesetzt und eine Umeichung der physikalischen Temperatur  $T$  gemäß  $\beta = \frac{2J \sinh(\eta)}{T}$  vorgenommen wurde. Diese Relation wollen wir ausnutzen, um die notwendigen Erwartungswerte zur Bestimmung der Mazur-Schranke zu berechnen.

#### 3.1. Berechnung der Norm $\|Q(\varphi)\|^2$

Die Norm der Erhaltungsgröße  $Q(\varphi)$  aus Gl. (26) lässt sich gemäß

$$\|Q(\varphi)\|^2 = 2 \left( \frac{\partial^2}{\partial \bar{s} \partial s} \|t_{\mathcal{A}}(\varphi, s)\|^2 \Big|_{s=0} - \frac{\partial^2}{\partial \bar{s} \partial s} \langle t_{\mathcal{A}}(\varphi, s), \hat{P} t_{\mathcal{A}}(\varphi, s) \hat{P} \rangle \Big|_{s=\bar{s}=0} \right) \tag{36}$$

berechnen, wobei ausgenutzt wurde, dass der Hamiltonoperator paritätsinvariant ist,  $[H, \hat{P}] = 0$ .

Im Folgenden sollen die beiden Terme in Gl. (36) einzeln berechnet werden.

##### 3.1.1. Berechnung von $\frac{\partial^2}{\partial \bar{s} \partial s} \langle t_{\mathcal{A}}(\varphi, s), \hat{P} t_{\mathcal{A}}(\varphi, s) \hat{P} \rangle \Big|_{s=\bar{s}=0}$

Wir definieren die Quantenmonodromiematrix

$$\begin{aligned} T_j^{QTM}(\lambda) &= R_{a_1, j}^{t_1}(-\tau - \lambda) R_{j, a_2}(\lambda - \tau) \dots \\ &\quad R_{a_{M-1}, j}^{t_1}(-\tau - \lambda) R_{j, a_M}(\lambda - \tau) \\ &\quad R_{j, a_{M+1}}^\dagger(-\bar{\lambda} + \varphi, s) R_{j, a_{M+2}}(\lambda + \varphi, s), \end{aligned} \tag{37}$$

wobei  $a_j = \mathbb{C}^2$  für  $j = 1, \dots, M$ ,  $a_{M+1} = \mathcal{A}_1$  und  $a_{M+2} = \mathcal{A}_2$  gesetzt wurde. Mit Gl. (35) lässt sich für die zugehörige Quantentransfermatrix  $t^{QTM}(\lambda) = \text{tr}_{V_j} \{T_j^{QTM}(\lambda)\}$  zeigen, dass gilt

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2}{\partial \bar{s} \partial s} \langle t_{\mathcal{A}}(\varphi, s), \hat{P} t_{\mathcal{A}}(\varphi, s) \hat{P} \rangle \Big|_{s=\bar{s}=0} &= \frac{1}{Z} \lim_{M \rightarrow \infty} \frac{\partial^2}{\partial \bar{s} \partial s} \text{tr}_{a_1, \dots, a_M, \mathcal{A}_1, \mathcal{A}_2} \{ (t^{QTM}(0))^N \} \Big|_{s=\bar{s}=0} \\ &\sim N \cdot \frac{\Lambda^N(0)}{Z}. \\ &\quad \left[ N(\partial_s \ln \Lambda(0)) \cdot (\partial_{\bar{s}} \ln \Lambda(0)) + \partial_s \partial_{\bar{s}} \ln \Lambda(0) \right] \Big|_{s=\bar{s}=0}, \end{aligned} \quad (38)$$

wobei der letzte Schritt für große  $N$  gilt und wir angenommen haben, dass die Quantentransfermatrix  $t^{QTM}(0)$  einen einfachen dominanten Eigenwert  $\Lambda(0)$  besitzt. Die Eigenschaften der  $R$ -Matrix aus Abschnitt 1.2 und die Yang-Baxter-Gleichung (14) führen dazu, dass die Quantenmonodromiematrix die Yang-Baxter-Algebra

$$\check{R}(\lambda - \mu)(T^{QTM}(\lambda) \otimes T^{QTM}(\mu)) = (T^{QTM}(\mu) \otimes T^{QTM}(\lambda))\check{R}(\lambda - \mu) \quad (39)$$

erfüllt. Daher bildet die Quantentransfermatrix eine kommutierende Familie:

$$[t^{QTM}(\lambda), t^{QTM}(\mu)] = 0 \quad \forall \lambda, \mu \in \mathbb{C}. \quad (40)$$

Wir wollen die Wirkung von  $T^{QTM}(\lambda)$  auf den Zustand

$$|\rangle = (|+\rangle \otimes |-\rangle)^{M/2} \otimes |0\rangle \otimes |0\rangle. \quad (41)$$

mit  $|+\rangle := \begin{pmatrix} 1 & 0 \end{pmatrix}^T$  und  $|-\rangle := \begin{pmatrix} 0 & 1 \end{pmatrix}^T$  untersuchen. Dazu schreiben wir die Quantenmonodromiematrix als  $2 \times 2$ -Matrix

$$T^{QTM}(\lambda) = \begin{pmatrix} A(\lambda) & B(\lambda) \\ C(\lambda) & D(\lambda) \end{pmatrix}, \quad (42)$$

mit Einträgen in  $\text{End}(a_1 \otimes \dots \otimes a_{M+2})$ . Es gilt

$$A(\lambda)|\rangle = a(\lambda)|\rangle \quad B(\lambda)|\rangle = 0 \quad D(\lambda)|\rangle = d(\lambda)|\rangle \quad (43)$$

mit den Funktionen

$$\begin{aligned} a(\lambda) &= \left( \frac{\sinh(\lambda - \tau)}{\sinh(\lambda - \tau + \eta)} \right)^{\frac{M}{2}} \sinh(\lambda + \varphi + s) \sinh(-\lambda + \bar{\varphi} + \bar{s}), \\ d(\lambda) &= \left( \frac{\sinh(\lambda + \tau)}{\sinh(\lambda + \tau - \eta)} \right)^{\frac{M}{2}} \sinh(\lambda + \varphi - s) \sinh(-\lambda + \bar{\varphi} - \bar{s}). \end{aligned} \quad (44)$$

Aus der Yang-Baxter-Algebra (39) folgen die Vertauschungsregeln

$$\begin{aligned} A(\lambda)C(\mu) &= \frac{1}{b(\lambda - \mu)} C(\mu)A(\lambda) - \frac{c(\lambda - \mu)}{b(\lambda - \mu)} C(\lambda)A(\mu), \\ D(\lambda)C(\mu) &= \frac{1}{b(\mu - \lambda)} C(\mu)D(\lambda) - \frac{c(\mu - \lambda)}{b(\mu - \lambda)} C(\lambda)D(\mu), \end{aligned} \quad (45)$$

$$[C(\lambda), C(\mu)] = 0,$$

die sich mittels vollständiger Induktion nach  $K \in \mathbb{N}$  wie folgt verallgemeinern lassen:

$$\begin{aligned}
D(\lambda)C(\lambda_1) \dots C(\lambda_K) &= \left[ \prod_{j=1}^K C(\lambda_j) \right] D(\lambda) \prod_{j=1}^K \frac{1}{b(\lambda_j - \lambda)} \\
&\quad - \sum_{j=1}^K \left[ C(\lambda) \prod_{\substack{k=1 \\ k \neq j}}^K C(\lambda_k) \right] D(\lambda_j) \frac{c(\lambda_j - \lambda)}{b(\lambda_j - \lambda)} \prod_{\substack{k=1 \\ k \neq j}}^K \frac{1}{b(\lambda_k - \lambda_j)}, \\
A(\lambda)C(\lambda_1) \dots C(\lambda_K) &= \left[ \prod_{j=1}^K C(\lambda_j) \right] A(\lambda) \prod_{j=1}^K \frac{1}{b(\lambda - \lambda_j)} \\
&\quad - \sum_{j=1}^K \left[ C(\lambda) \prod_{\substack{k=1 \\ k \neq j}}^K C(\lambda_k) \right] A(\lambda_j) \frac{c(\lambda - \lambda_j)}{b(\lambda - \lambda_j)} \prod_{\substack{k=1 \\ k \neq j}}^K \frac{1}{b(\lambda_j - \lambda_k)}.
\end{aligned} \tag{46}$$

Anwendung der Quantentransformmatrix auf einen Zustand  $\prod_{j=1}^K C(\lambda_j) | \rangle$  zeigt, dass dieser ein Eigenzustand zum Eigenwert

$$\Lambda(\lambda) = a(\lambda) \prod_{j=1}^K \frac{\sinh(\lambda - \lambda_j + \eta)}{\sinh(\lambda - \lambda_j)} + d(\lambda) \prod_{j=1}^K \frac{\sinh(\lambda - \lambda_j - \eta)}{\sinh(\lambda - \lambda_j)} \tag{47}$$

ist, wenn die Bethe-Ansatz-Gleichungen

$$\frac{d(\lambda_j)}{a(\lambda_j)} = \prod_{\substack{k=1 \\ k \neq j}}^K \frac{\sinh(\lambda_j - \lambda_k + \eta)}{\sinh(\lambda_j - \lambda_k - \eta)}, \quad j = 1, \dots, K, \tag{48}$$

erfüllt sind. Die  $\lambda_j \in \mathbb{C}$ ,  $j = 1, \dots, K$  heißen Bethe-Ansatz-Zahlen.

Die Norm (38) wird ausschließlich vom dominanten Eigenwert der Quantentransformmatrix bei  $\lambda = 0$  bestimmt. Um herauszufinden, wie viele Bethe-Ansatz-Zahlen der dominante Eigenwert  $\Lambda(\lambda)$  besitzt, betrachten wir den Limes  $T \rightarrow \infty$ . Für  $K = 0$  lautet der Eigenwert gemäß der dann stark vereinfachten Gl. (47)  $\Lambda(\lambda) = \sinh(\varphi + s) \sinh(\bar{\varphi} + \bar{s}) + \sinh(\varphi - s) \sinh(\bar{\varphi} - \bar{s})$ . Für  $s = 0$  erhalten wir also das Ergebnis aus dem Zugang nach Peireira et al. für den dominanten Eigenwert. Andererseits ergeben sich für  $s = 0$  und endliche Temperatur die Gleichungen der XXZ-Spin-1/2-Heisenbergkette, deren dominanter Eigenwert  $N/2$ -viele Bethe-Ansatz-Zahlen besitzt[3]. Wir können daraus folgern, dass der dominante Eigenwert  $\Lambda(\lambda)$  bei endlicher Temperatur und beliebigem  $s$  genau  $K = \frac{M}{2}$  viele Bethe-Ansatz-Zahlen hat.

Wir definieren die Funktion  $Q(\lambda) = \prod_{k=1}^{M/2} \sinh(\lambda - \lambda_k)$  und die Hilfsfunktion

$$\mathbf{a}(\lambda) = \left( \frac{\sinh(\lambda - \tau) \sinh(\lambda + \tau - \eta)}{\sinh(\lambda + \tau) \sinh(\lambda - \tau + \eta)} \right)^{\frac{M}{2}} \frac{\sinh(\lambda + \varphi + s) \sinh(\lambda - \bar{\varphi} - \bar{s}) Q(\lambda + \eta)}{\sinh(\lambda + \varphi - s) \sinh(\lambda - \bar{\varphi} + \bar{s}) Q(\lambda - \eta)}. \tag{49}$$

Der dominante Eigenwert der Quantentransfermatrix lautet in diesen Funktionen

$$\Lambda(\lambda) = d(\lambda) \frac{Q(\lambda - \eta)}{Q(\lambda)} (1 + \mathbf{a}(\lambda)). \quad (50)$$

Für die Hilfsfunktion und den Eigenwert lassen sich folgende Integralgleichungen herleiten:

$$\ln \mathbf{a}(\lambda) = -\beta e(\lambda) + \ln \left( \frac{\sinh(\lambda + \varphi + s) \sinh(-\lambda + \bar{\varphi} + \bar{s})}{\sinh(\lambda + \varphi - s) \sinh(-\lambda + \bar{\varphi} - \bar{s})} \right) + \int_{\mathcal{C}} \frac{d\mu}{2\pi i} K(\lambda - \mu) \ln(1 + \mathbf{a}(\mu)), \quad (51)$$

$$\ln \Lambda(\lambda) = \ln (\sinh(\lambda + \varphi - s) \sinh(-\lambda + \bar{\varphi} - \bar{s})) + \int_{\mathcal{C}} \frac{d\mu}{2\pi i} e(\mu - \lambda) \ln(1 + \mathbf{a}(\mu)). \quad (52)$$

Hierbei ist

$$\begin{aligned} K(\lambda) &= \coth(\lambda + \eta) - \coth(\lambda - \eta) \\ e(\lambda) &= \coth(\lambda) - \coth(\lambda + \eta) \end{aligned} \quad (53)$$

und  $\mathcal{C}$  bezeichnet die „kanonische“ Kontur, die die reelle Achse entgegen dem Uhrzeigersinn innerhalb des Streifens  $\{\lambda \in \mathbb{C} : -\gamma/2 < \text{Im}\lambda < \gamma/2\}$  umrundet.

### Grenzfall $T \rightarrow \infty$

Für  $T \rightarrow \infty$  vereinfachen sich die Integralgleichungen (51) und (52) zur Bestimmung von  $\|t_{\mathcal{A}}(\varphi, s)\|^2$ . Gleichung (51) wird dann durch den Ansatz  $\mathbf{a}(\lambda) = \frac{\sinh(\lambda + \varphi + s) \sinh(-\lambda + \bar{\varphi} + \bar{s})}{\sinh(\lambda + \varphi - s) \sinh(-\lambda + \bar{\varphi} - \bar{s})}$  gelöst. Wird dies wiederum in Gl. (52) eingesetzt, so erhält man für den dominanten Eigenwert  $\Lambda(\lambda) = \sinh(\lambda + \varphi - s) \sinh(-\lambda + \bar{\varphi} - \bar{s}) + \sinh(\lambda + \varphi + s) \sinh(-\lambda + \bar{\varphi} + \bar{s})$ . Somit erhalten wir gemäß Gl. (38)

$$\frac{\partial^2}{\partial \bar{s} \partial s} \langle t_{\mathcal{A}}(\varphi, s), \hat{P} t_{\mathcal{A}}(\varphi, s) \hat{P} \rangle \Big|_{s=\bar{s}=0} = N \sinh^{N-1}(\varphi) \sinh^{N-1}(\bar{\varphi}) \cosh \varphi \cosh \bar{\varphi}. \quad (54)$$

### 3.1.2. Berechnung von $\frac{\partial^2}{\partial \bar{s} \partial s} \|t_{\mathcal{A}}(\varphi, s)\|^2 \Big|_{s=\bar{s}=0}$

Die gesuchte Größe lässt sich hier gemäß

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2}{\partial \bar{s} \partial s} \|t_{\mathcal{A}}(\varphi, s)\|^2 \Big|_{s=\bar{s}=0} &= \frac{1}{Z} \lim_{M \rightarrow \infty} \frac{\partial^2}{\partial \bar{s} \partial s} \text{tr}_{a_1, \dots, a_M, \mathcal{A}_1, \mathcal{A}_2} \{ (t^{QTM}(0))^N \} \Big|_{s=\bar{s}=0} \\ &\sim N \cdot \frac{\Lambda^N(0)}{Z}. \end{aligned} \quad (55)$$

$$\left[ N(\partial_s \ln \Lambda(0)) \cdot (\partial_{\bar{s}} \ln \Lambda(0)) + \partial_s \partial_{\bar{s}} \ln \Lambda(0) \right] \Big|_{s=\bar{s}=0},$$

durch die Quantentransfermatrix  $t^{QTM}(\lambda) = \text{tr}_{V_j} \{ T_j^{QTM}(\lambda) \}$  mit Quantenmonodromiematrix

$$\begin{aligned} T_j^{QTM}(\lambda) &= R_{a_1, j}^{t_1}(-\tau - \lambda) R_{j, a_2}(\lambda - \tau) \dots \\ &\quad R_{a_{M-1}, j}^{t_1}(-\tau - \lambda) R_{j, a_M}(\lambda - \tau) \\ &\quad R_{j, a_{M+1}}^{\dagger 1}(\bar{\lambda} + \varphi, s) R_{j, a_{M+2}}(\lambda + \varphi, s) \end{aligned} \quad (56)$$

ausdrücken, wobei die  $a_j$ ,  $j = 1, \dots, M + 2$ , wie in Abschnitt 3.1.1 definiert sind. Der letzte Schritt in Gl. (55) gilt für große  $N$ , falls die Quantentransformmatrix  $t^{QTM}(0)$  einen einfachen dominanten Eigenwert  $\Lambda(0)$  besitzt.

Mit der Eigenschaft  $\mathcal{L}^\dagger(\varphi, s) = \sigma^y \mathcal{L}(\bar{\varphi}, -\bar{s}) \sigma^y$  des zweiparametrischen Laxoperators und den Eigenschaften der  $R$ -Matrix aus Abschnitt 1.2 lässt sich zeigen, dass  $T_j^{QTM}(\lambda)$  wieder der Yang-Baxter-Algebra (39) genügt. Damit bildet  $t^{QTM}(\lambda)$  eine kommutierende Familie.

Der Operator  $T^{QTM}(\lambda)$  wirkt wie eine untere Dreiecksmatrix auf den Zustand

$$\langle | = (\langle -| \otimes \langle +|)^{M/2} \otimes \langle 0| \otimes \langle m-1|. \quad (57)$$

Benutzen wir die Notation wie in Gl. (42), dann gilt

$$\langle | A(\lambda) = a(\lambda) \langle | \quad \langle | B(\lambda) = 0 \quad \langle | D(\lambda) = d(\lambda) \langle | \quad (58)$$

mit den Funktionen

$$\begin{aligned} a(\lambda) &= (-1)^l \left( \frac{\sinh(\lambda + \tau)}{\sinh(\lambda + \tau - \eta)} \right)^{\frac{M}{2}} \sinh(\lambda + \varphi + s - \eta) \sinh(\lambda + \bar{\varphi} + \bar{s}), \\ d(\lambda) &= (-1)^l \left( \frac{\sinh(\lambda - \tau)}{\sinh(\lambda - \tau + \eta)} \right)^{\frac{M}{2}} \sinh(\lambda + \varphi - s + \eta) \sinh(\lambda + \bar{\varphi} - \bar{s}). \end{aligned} \quad (59)$$

Unter Ausnutzung der Yang-Baxter-Algebra (39) lassen sich die Vertauschungsrelationen

$$\begin{aligned} C(\mu)A(\lambda) &= \frac{1}{b(\mu - \lambda)} A(\lambda)C(\mu) - \frac{c(\mu - \lambda)}{b(\mu - \lambda)} A(\mu)C(\lambda), \\ C(\mu)D(\lambda) &= \frac{1}{b(\lambda - \mu)} D(\lambda)C(\mu) - \frac{c(\lambda - \mu)}{b(\lambda - \mu)} D(\mu)C(\lambda), \\ [C(\lambda), C(\mu)] &= 0, \end{aligned} \quad (60)$$

herleiten, die verallgemeinert werden können zu

$$\begin{aligned} C(\lambda_1) \dots C(\lambda_K) A(\lambda) &= A(\lambda) \left[ \prod_{j=1}^K C(\lambda_j) \right] \prod_{j=1}^K \frac{1}{b(\lambda_j - \lambda)} \\ &\quad - \sum_{j=1}^K A(\lambda_j) \left[ C(\lambda) \prod_{\substack{k=1 \\ k \neq j}}^K C(\lambda_k) \right] \frac{c(\lambda_j - \lambda)}{b(\lambda_j - \lambda)} \prod_{\substack{k=1 \\ k \neq j}}^K \frac{1}{b(\lambda_k - \lambda_j)}, \\ C(\lambda_1) \dots C(\lambda_K) D(\lambda) &= D(\lambda) \left[ \prod_{j=1}^K C(\lambda_j) \right] \prod_{j=1}^K \frac{1}{b(\lambda - \lambda_j)} \\ &\quad - D(\lambda_j) \sum_{j=1}^K \left[ C(\lambda) \prod_{\substack{k=1 \\ k \neq j}}^K C(\lambda_k) \right] \frac{c(\lambda - \lambda_j)}{b(\lambda - \lambda_j)} \prod_{\substack{k=1 \\ k \neq j}}^K \frac{1}{b(\lambda_j - \lambda_k)}. \end{aligned} \quad (61)$$

Aus diesen Relationen folgt, dass  $\langle | \prod_{j=1}^K C(\lambda_j) \rangle$  ein linksseitiger Eigenzustand von  $t^{QTM}(\lambda)$  zum Eigenwert

$$\Lambda(\lambda) = a(\lambda) \prod_{j=1}^K \frac{\sinh(\lambda - \lambda_j - \eta)}{\sinh(\lambda - \lambda_j)} + d(\lambda) \prod_{j=1}^K \frac{\sinh(\lambda - \lambda_j + \eta)}{\sinh(\lambda - \lambda_j)} \quad (62)$$

ist, wenn die Bethe-Ansatz-Gleichungen

$$\frac{d(\lambda_j)}{a(\lambda_j)} = \prod_{\substack{k=1 \\ k \neq j}}^K \frac{\sinh(\lambda_j - \lambda_k - \eta)}{\sinh(\lambda_j - \lambda_k + \eta)}, \quad j = 1, \dots, K, \quad (63)$$

erfüllt sind.

Wir betrachten den Limes  $T \rightarrow \infty$ . Wegen der dann stark vereinfachten Gl. (62) und der Analytizität der Eigenwertfunktion muss  $\Lambda(\lambda)$  von der Form  $\Lambda(\lambda) = (-1)^l c \sinh(\lambda - a) \sinh(\lambda - b)$  mit einem von  $\lambda$  unabhängigen Faktor  $c$  sein. Für  $s = 0$  und  $\lambda = 0$  ist der dominante Eigenwert aus dem Zugang von Peireira et al. bekannt:  $\Lambda(0) = 2 \sinh(\varphi) \sinh(\bar{\varphi})$ . Es gilt dann also  $a = -\varphi$ ,  $b = -\bar{\varphi}$  und  $c = 2(-1)^l$ . Setzt man dies in die Gl. (62) bei  $s = 0$  ein, so findet man für die Funktion  $q(\lambda) := \sinh(\lambda + \varphi) \prod_{j=1}^K \sinh(\lambda - \lambda_j)$  folgende Funktionalgleichung:  $2(-1)^l q(\lambda) = q(\lambda - \eta) + q(\lambda + \eta)$ . Der Ansatz  $q(\lambda) = \sinh(m(\lambda + \varphi))$  löst diese Gleichung. Der dominante Eigenwert besitzt also die  $m - 1$  vielen Bethe-Ansatz-Zahlen  $\mu_k^0 := -\varphi + k\eta$ ,  $k = 1, \dots, m - 1$ . Es lässt sich zeigen, dass sich die Positionen dieser Bethe-Ansatz-Zahlen nicht verändern, wenn die Temperatur endlich gemacht wird. Der Eigenwert faktorisiert dann in zwei Anteile,  $\Lambda(\lambda) = \sinh(\lambda + \varphi) \sinh(\lambda + \bar{\varphi}) \Lambda_{XXZ}(\lambda)$ , wobei  $\Lambda_{XXZ}(\lambda)$  die Eigenwertfunktion der XXZ-Spin-1/2-Heisenbergkette ist. Wir folgern daraus, dass bei endlicher Temperatur und beliebigem  $s$  der dominante Eigenwert  $K = \frac{M}{2} + m - 1$  viele Bethe-Ansatz-Zahlen besitzt.

Wir definieren die Funktion  $Q(\lambda) = Q_T(\lambda) \cdot Q_s(\lambda)$  mit  $Q_T(\lambda) = \prod_{k=1}^{M/2} \sinh(\lambda - \lambda_k)$  und  $Q_s(\lambda) = \prod_{k=1}^{m-1} \sinh(\lambda - \mu_k)$ , wobei  $\mu_k \xrightarrow{s \rightarrow 0} \mu_k^0$ . Ferner sei

$$\mathbf{a}_{XXZ}(\lambda) = \left( \frac{\sinh(\lambda - \tau) \sinh(\lambda + \tau - \eta)}{\sinh(\lambda + \tau) \sinh(\lambda - \tau + \eta)} \right)^{\frac{M}{2}} \frac{Q_T(\lambda + \eta)}{Q_T(\lambda - \eta)}. \quad (64)$$

Mit der Hilfsfunktion

$$\mathbf{a}(\lambda) = \mathbf{a}_{XXZ}(\lambda) \frac{\sinh(\lambda + \varphi - s + \eta) \sinh(\lambda + \bar{\varphi} - \bar{s}) Q_s(\lambda + \eta)}{\sinh(\lambda + \varphi + s - \eta) \sinh(\lambda + \bar{\varphi} + \bar{s}) Q_s(\lambda - \eta)} \quad (65)$$

lässt sich der dominante Eigenwert durch

$$\Lambda(\lambda) = a(\lambda) \frac{Q(\lambda - \eta)}{Q(\lambda)} (1 + \mathbf{a}(\lambda)). \quad (66)$$

ausdrücken.

Für die Hilfsfunktion und den dominanten Eigenwert lassen sich folgende Integralgleichungen herleiten:

$$\begin{aligned}\ln \mathbf{a}(\lambda) &= \ln \left( \frac{Q_s(\lambda + \eta)}{Q_s(\lambda - \eta)} \right) + \ln \left( \frac{\sinh(\lambda + \varphi - s + \eta) \sinh(\lambda + \bar{\varphi} - \bar{s})}{\sinh(\lambda + \varphi + s - \eta) \sinh(\lambda + \bar{\varphi} + \bar{s})} \right) \\ &\quad - \beta e(\lambda) + \int_{\mathcal{C}} \frac{d\mu}{2\pi i} K(\lambda - \mu) \ln(1 + \mathbf{a}(\mu)), \\ \ln \Lambda(\lambda) &= \ln \left( (-1)^l \sinh(\lambda + \varphi + s - \eta) \sinh(\lambda + \bar{\varphi} + \bar{s}) \right) + \ln \left( \frac{Q_s(\lambda - \eta)}{Q_s(\lambda)} \right) \\ &\quad + \int_{\mathcal{C}} \frac{d\mu}{2\pi i} e(\mu - \lambda) \ln(1 + \mathbf{a}(\mu)).\end{aligned}\tag{67}$$

Die Notation wurde hierbei aus Abschnitt 3.1.1 übernommen. Die Kontur  $\mathcal{C}$  wurde derart dicht um die reelle Achse gelegt, dass von den Null- und Polstellen der Funktion  $\mathfrak{A} = 1 + \mathbf{a}$  nur die Bethe-Ansatz-Zahlen  $\lambda_j$ ,  $j = 1, \dots, \frac{M}{2}$ , und der Punkt  $-\tau$  im Inneren von  $\mathcal{C}$  liegen.

Das Ableiten der Integralgleichungen nach  $s$  und  $\bar{s}$  liefert

$$\partial_s \ln \mathbf{a}(\lambda) \Big|_{s=\bar{s}=0} = - \frac{\sinh(2(\lambda + \varphi))}{\sinh(\lambda + \varphi + \eta) \sinh(\lambda + \varphi - \eta)} - \sum_{k=1}^{m-1} K(\lambda - \mu_k^0) \delta_k^{(1,0)}\tag{68}$$

$$+ \int_{\mathcal{C}} \frac{d\mu}{2\pi i} K(\lambda - \mu) \partial_s \ln(1 + \mathbf{a}(\mu)) \Big|_{s=\bar{s}=0},\tag{69}$$

$$\partial_{\bar{s}} \ln \mathbf{a}(\lambda) \Big|_{s=\bar{s}=0} = - 2 \coth(\lambda + \bar{\varphi}) + \int_{\mathcal{C}} \frac{d\mu}{2\pi i} K(\lambda - \mu) \partial_{\bar{s}} \ln(1 + \mathbf{a}(\mu)) \Big|_{s=\bar{s}=0},\tag{70}$$

$$\partial_s \partial_{\bar{s}} \ln \mathbf{a}(\lambda) \Big|_{s=\bar{s}=0} = - \sum_{k=1}^{m-1} K(\lambda - \mu_k^0) \delta_k^{(1,1)}\tag{71}$$

$$+ \int_{\mathcal{C}} \frac{d\mu}{2\pi i} K(\lambda - \mu) \partial_s \partial_{\bar{s}} \ln(1 + \mathbf{a}(\mu)) \Big|_{s=\bar{s}=0},\tag{72}$$

$$\partial_s \ln \Lambda(\lambda) \Big|_{s=\bar{s}=0} = \coth(\lambda + \varphi - \eta) - \sum_{k=1}^{m-1} e(\mu_k^0 - \lambda) \delta_k^{(1,0)}\tag{73}$$

$$+ \int_{\mathcal{C}} \frac{d\mu}{2\pi i} e(\mu - \lambda) \partial_s \ln(1 + \mathbf{a}(\mu)) \Big|_{s=\bar{s}=0},\tag{74}$$

$$\partial_{\bar{s}} \ln \Lambda(\lambda) \Big|_{s=\bar{s}=0} = \coth(\lambda + \bar{\varphi}) + \int_{\mathcal{C}} \frac{d\mu}{2\pi i} e(\mu - \lambda) \partial_{\bar{s}} \ln(1 + \mathbf{a}(\mu)) \Big|_{s=\bar{s}=0},\tag{75}$$

$$\partial_s \partial_{\bar{s}} \ln \Lambda(\lambda) \Big|_{s=\bar{s}=0} = - \sum_{k=1}^{m-1} e(\mu_k^0 - \lambda) \delta_k^{(1,1)}\tag{76}$$

$$+ \int_{\mathcal{C}} \frac{d\mu}{2\pi i} e(\mu - \lambda) \partial_s \partial_{\bar{s}} \ln(1 + \mathbf{a}(\mu)) \Big|_{s=\bar{s}=0},\tag{77}$$

wobei die Abkürzung  $\delta_k^{(\alpha,\beta)} := \frac{\partial^\alpha}{\partial s^\alpha} \frac{\partial^\beta}{\partial \bar{s}^\beta} \mu_k \Big|_{s=\bar{s}=0}$  eingeführt wurde und bereits  $\delta_k^{(0,1)} = 0$  gesetzt wurde (s.u.). Die Funktion  $\mathbf{a}_0$  bezeichnet die Hilfsfunktion  $\mathbf{a}$  bei  $s = 0$ .

Um diese Integralgleichungen zu lösen, müssen vorher die entsprechenden  $\delta_k^{(\alpha,\beta)}$  bestimmt werden. Dazu entwickeln wir die Bethe-Ansatz-Gleichungen  $\mathbf{a}(\mu_k) = -1$ ,  $k = 1, \dots, m - 1$ , in  $s$  und  $\bar{s}$ .

Im Folgenden sei  $\epsilon_k := \delta_k^{(1,0)} s + \delta_k^{(0,1)} \bar{s}$ . Die erste Ordnung der Bethe-Ansatz-Gleichungen in  $s$  und  $\bar{s}$  liefert die Bestimmungsgleichungen

$$\begin{aligned}\epsilon_2 &= \frac{\varphi_1^0 + 1}{\varphi_1^0} \epsilon_1 + \frac{1}{\varphi_1^0} s \\ \epsilon_k &= \frac{\varphi_{k-1}^0 + 1}{\varphi_{k-1}^0} \epsilon_{k-1} - \frac{1}{\varphi_{k-1}^0} \epsilon_{k-2}, \quad k = 3, \dots, m-1, \\ \epsilon_{m-1} &= \frac{1}{\varphi_{m-1}^0 + 1} \epsilon_{m-2} + \frac{\varphi_{m-1}^0}{\varphi_{m-1}^0 + 1} s,\end{aligned}\tag{78}$$

für die erste Ordnung  $\epsilon_k$  der Bethe-Ansatz-Zahlen  $\mu_k$ . Hierbei wurde eine Entwicklung  $\mathbf{a}_{XXZ}(\mu_k) =: \varphi_k = \varphi_k^0 + \varphi_k^{(1,0)} s + \varphi_k^{(0,1)} \bar{s} + \varphi_k^{(1,1)} s \bar{s} + \dots$  durchgeführt. Die Lösung des Gleichungssystems (78) lautet

$$\begin{aligned}\delta_k^{(1,0)} &= \frac{(\dots((\varphi_1^0 + 1)\varphi_2^0 + 1)\varphi_3^0 + 1)\dots(\varphi_{k-1}^0 + 1)\varphi_k^0 - 1)\varphi_{k+1}^0 - 1)\dots)\varphi_{m-1}^0 - 1)}{(\dots((\varphi_1^0 + 1)\varphi_2^0 + 1)\varphi_3^0 + 1)\dots)\varphi_{m-1}^0 + 1)} \\ \delta_k^{(0,1)} &= 0\end{aligned}\tag{79}$$

für  $k = 1, \dots, m-1$ . Die erste Ordnung der Bethe-Ansatz-Zahlen  $\mu_k$  ist also vollständig durch die Funktion  $\varphi_k^0 = \mathbf{a}_{XXZ}^0(\mu_k^0)$  bestimmt, wobei  $\mathbf{a}_{XXZ}^0$  die Funktion  $\mathbf{a}_{XXZ}$  bei  $s = \bar{s} = 0$  bezeichnet, also der Hilfsfunktion entspricht, die üblicherweise bei der XXZ-Spin-1/2-Heisenbergkette auftritt.

Zur Bestimmung der  $\delta_k^{(1,1)}$  liefert die Ordnung  $s \cdot \bar{s}$  der Bethe-Ansatz-Gleichungen das Gleichungssystem

$$\begin{aligned}\delta_2^{(1,1)} &= \frac{\varphi_1^0 + 1}{\varphi_1^0} \delta_1^{(1,1)} + \frac{\varphi_1^{(0,1)}}{\varphi_1^0} (\delta_1^{(1,0)} - \delta_2^{(1,0)}) \\ &\quad + \coth(\varphi - \bar{\varphi} - \eta) \left[ \frac{\varphi_1^0 - 1}{\varphi_1^0} \delta_1^{(1,0)} - \frac{1}{\varphi_1^0} - \delta_2^{(1,0)} \right] \\ \delta_{k+1}^{(1,1)} &= \frac{\varphi_k^0 + 1}{\varphi_k^0} \delta_k^{(1,1)} - \frac{1}{\varphi_k^0} \delta_{k-1}^{(1,1)} + \frac{\varphi_k^{(0,1)}}{\varphi_k^0} (\delta_k^{(1,0)} - \delta_{k+1}^{(1,0)}) \\ &\quad + \coth(\varphi - \bar{\varphi} - k\eta) \left[ \frac{\varphi_k^0 - 1}{\varphi_k^0} \delta_k^{(1,0)} + \frac{1}{\varphi_k^0} \delta_{k-1}^{(1,0)} - \delta_{k+1}^{(1,0)} \right], \quad k = 2, \dots, m-2, \\ \delta_{m-1}^{(1,1)} &= \frac{1}{\varphi_{m-1}^0 + 1} \delta_{m-2}^{(1,1)} - \frac{\varphi_{m-1}^{(0,1)}}{\varphi_{m-1}^0 + 1} (\delta_{m-1}^{(1,0)} - 1) \\ &\quad + \coth(\varphi - \bar{\varphi} + \eta) \left[ -\frac{1}{\varphi_{m-1}^0 + 1} \delta_{m-2}^{(1,0)} - \frac{\varphi_{m-1}^0 - 1}{\varphi_{m-1}^0 + 1} \delta_{m-1}^{(1,0)} + \frac{\varphi_{m-1}^0}{\varphi_{m-1}^0 + 1} \right].\end{aligned}\tag{80}$$

Es werden also zusätzlich zu den  $\varphi_k^0$  die Ableitungen  $\frac{\varphi_k^{(0,1)}}{\varphi_k^0} = \partial_{\bar{s}} \ln \mathbf{a}_{XXZ}(\mu_k) \Big|_{s=\bar{s}=0}$ ,  $k = 1, \dots, m-1$ , benötigt. Wegen  $\delta_k^{(0,1)} = 0$  gilt  $\partial_s \ln \mathbf{a}_{XXZ}(\lambda) \Big|_{s=\bar{s}=0} = \partial_{\bar{s}} \ln \mathbf{a}(\lambda) \Big|_{s=\bar{s}=0} + 2 \coth(\lambda + \bar{\varphi})$ .

**Grenzfall**  $T \rightarrow \infty$

Für  $T \rightarrow \infty$  gilt  $\varphi_k = \mathbf{a}_{XXZ}(\mu_k) = 1$ , also insbesondere  $\varphi_k^0 = 1$  und  $\varphi_k^{(0,1)} = 0$ . Damit vereinfacht sich die Werte der  $\delta_k^{(1,0)}$  aus Gl. (79) zu

$$\delta_k^{(1,0)} = \frac{2k - m}{m}. \quad (81)$$

Das Gleichungssystem (80) reduziert sich auf

$$\begin{aligned} \delta_2^{(1,1)} &= 2\delta_1^{(1,1)} - \coth(\varphi - \bar{\varphi} - \eta) \left[ 1 + \delta_2^{(1,0)} \right], \\ \delta_{k+1}^{(1,1)} &= 2\delta_k^{(1,1)} - \delta_{k-1}^{(1,1)} - \coth(\varphi - \bar{\varphi} - k\eta) \left[ \delta_{k+1}^{(1,0)} - \delta_{k-1}^{(1,0)} \right], \quad k = 2, \dots, m-2, \\ \delta_{m-1}^{(1,1)} &= \frac{1}{2}\delta_{m-2}^{(1,1)} - \frac{1}{2}\coth(\varphi - \bar{\varphi} + \eta) \left[ \delta_{m-2}^{(1,0)} - 1 \right]. \end{aligned} \quad (82)$$

Die Lösung ist gegeben durch

$$\begin{aligned} \delta_0^{(1,1)} &= -\coth(\varphi - \bar{\varphi}) + \frac{2}{m} \sum_{k=0}^{m-1} \coth(\varphi - \bar{\varphi} - k\eta), \\ \delta_k^{(1,1)} &= \frac{2k}{m} X_m - 2X_k, \quad k = 1, \dots, m-1, \\ \delta_m^{(1,1)} &= -\delta_0^{(1,1)} \end{aligned} \quad (83)$$

mit

$$X_k = \sum_{l=1}^{k-1} (\delta_k^{(1,0)} - \delta_l^{(1,0)}) \coth(\varphi - \bar{\varphi} - l\eta). \quad (84)$$

Die Integralgleichungen (67) werden durch  $\mathbf{a}(\lambda) = \frac{\sinh(\lambda + \varphi - s + \eta) \sinh(\lambda + \bar{\varphi} - \bar{s}) Q_s(\lambda + \eta)}{\sinh(\lambda + \varphi + s - \eta) \sinh(\lambda + \bar{\varphi} + \bar{s}) Q_s(\lambda - \eta)}$  und  $\Lambda(\lambda) = (-1)^l \sinh(\lambda + \varphi + s - \eta) \sinh(\lambda + \bar{\varphi} + \bar{s}) \frac{Q_s(\lambda - \eta)}{Q_s(\lambda)} (1 + \mathbf{a}(\lambda))$  gelöst. Für  $s = \bar{s} = 0$  gilt  $Q(\lambda) = \frac{\sinh(m(\lambda + \varphi))}{\sinh(\lambda + \varphi)}$  (s.o.) und daher  $\mathbf{a}(\lambda) = 1$  und  $\Lambda(\lambda) = 2 \sinh(\lambda + \varphi) \sinh(\lambda + \bar{\varphi})$  für  $\lambda \neq \mu_k$ .

Für die Ableitungen erhalten wir außerdem folgende Lösungen:

$$\partial_s \ln \mathbf{a}(\lambda) \Big|_{s=\bar{s}=0} = - \frac{\sinh(2(\lambda + \varphi))}{\sinh(\lambda + \varphi + \eta) \sinh(\lambda + \varphi - \eta)} - \sum_{k=1}^{m-1} K(\lambda - \mu_k^0) \delta_k^{(1,0)}, \quad (85)$$

$$\partial_{\bar{s}} \ln \mathbf{a}(\lambda) \Big|_{s=\bar{s}=0} = -2 \coth(\lambda + \bar{\varphi}), \quad (86)$$

$$\partial_s \partial_{\bar{s}} \ln \mathbf{a}(\lambda) \Big|_{s=\bar{s}=0} = - \sum_{k=1}^{m-1} K(\lambda - \mu_k^0) \delta_k^{(1,1)}, \quad (87)$$

$$\partial_s \ln \Lambda(\lambda) \Big|_{s=\bar{s}=0} = \partial_{\bar{s}} \ln \Lambda(\lambda) \Big|_{s=\bar{s}=0} = 0, \quad (88)$$

$$\begin{aligned}
\partial_s \partial_{\bar{s}} \ln \Lambda(\lambda) \Big|_{s=\bar{s}=0} &= - \sum_{k=1}^{m-1} e(\mu_k^0 - \lambda) \delta_k^{(1,1)} + \partial_s \partial_{\bar{s}} \ln(1 + \mathbf{a}(\lambda)) \Big|_{s=\bar{s}=0} \\
&= - \sum_{k=1}^{m-1} [e(\mu_k^0 - \lambda) + \frac{1}{2} K(\lambda - \mu_k^0)] \delta_k^{(1,1)} \\
&\quad + \frac{1}{4} (\partial_s \ln \mathbf{a}(\lambda) \Big|_{s=\bar{s}=0}) \cdot (\partial_{\bar{s}} \ln \mathbf{a}(\lambda) \Big|_{s=\bar{s}=0}).
\end{aligned} \tag{89}$$

Gleichung (89) lässt sich nach Einsetzen aller bekannten Größen durch etwas Rechnung vereinfachen zu

$$\partial_s \partial_{\bar{s}} \ln \Lambda(0) \Big|_{s=\bar{s}=0} = \coth(\varphi) \coth(\bar{\varphi}) - \frac{2}{\sinh(\varphi) \sinh(\bar{\varphi})} \frac{\sinh((m-1)(\varphi - \bar{\varphi}))}{\sinh(m(\varphi - \bar{\varphi}))}. \tag{90}$$

Alles zusammen ergibt schließlich mit Gl. (55)

$$\begin{aligned}
\frac{\partial^2}{\partial \bar{s} \partial s} \| |t_{\mathcal{A}}(\varphi, s) | \|^2 \Big|_{s=0} &= N \sinh^{N-1}(\varphi) \sinh^{N-1}(\bar{\varphi}) \\
&\quad \cdot \left[ \cosh(\varphi) \cosh(\bar{\varphi}) - 2 \frac{\sin(2(m-1)\text{Im}\varphi)}{\sin(2m\text{Im}\varphi)} \right].
\end{aligned} \tag{91}$$

### 3.2. Berechnung von $\langle J, Q(\varphi) \rangle$

Nutzen wir aus, dass der Hamiltonoperator gerade unter Paritätstransformation ist,  $\hat{P}H\hat{P} = H$ , und der Spinstromoperator ungerade,  $\hat{P}J\hat{P} = -J$ , so vereinfacht sich das gesuchte Skalarprodukt zu

$$\langle JQ(\varphi) \rangle = -2(-i)^N \partial_s \langle Jt_{\mathcal{A}}(\varphi, s) \rangle \Big|_{s=0}. \tag{92}$$

Weiterhin sind der Hamiltonoperator  $H$  und die zweiparametrische Transfermatrix  $t_{\mathcal{A}}(\varphi, s)$  translationsinvariant. Mit  $\hat{U}^{-1}A_j\hat{U} = A_{j-1}$  erhalten wir daher

$$\langle Jt_{\mathcal{A}}(\varphi, s) \rangle = iN \langle (\sigma_1^+ \sigma_2^- - \sigma_1^- \sigma_2^+) t_{\mathcal{A}}(\varphi, s) \rangle. \tag{93}$$

Wir definieren die modifizierte Zustandssumme  $Z(\varphi, s) = \text{tr}_V \{ \rho(\varphi, s) \}$  mit dem Dichtepoperator  $\rho(\varphi, s) = e^{-\beta H_N} t_{\mathcal{A}}(\varphi, s)$ . Der assoziierte Erwartungswert eines Operators  $A$  ist gegeben durch

$$\langle A \rangle_s = \frac{\text{tr}_V \{ \rho(\varphi, s) A \}}{Z(\varphi, s)}. \tag{94}$$

Damit lässt sich Gl. (93) umformulieren zu

$$\langle Jt_{\mathcal{A}}(\varphi, s) \rangle = iN \left( \langle e_{11}^2 e_{22}^1 \rangle_s - \langle e_{12}^1 e_{21}^2 \rangle_s \right) \frac{Z(\varphi, s)}{Z}. \tag{95}$$

Die Eigenschaften der Quantenmonodromiematrix

$$T_j(\lambda) = R_{a_1, j}^{t_1}(-\tau - \lambda) R_{j, a_2}(\lambda - \tau) \dots R_{a_{M-1}, j}^{t_1}(-\tau - \lambda) R_{j, a_M}(\lambda - \tau) R_{j, \mathcal{A}}(\lambda + \varphi, s) \tag{96}$$

ermöglichen eine Berechnung der Erwartungswerte in Gl. (95). Sie genügt der Yang-Baxter-Algebra (39) und wirkt auf den Zustand  $| \rangle = (| + \rangle \otimes | - \rangle)^{M/2} \otimes | 0 \rangle$  wie eine Dreiecksmatrix. Daher lassen sich auch hier Bethe-Ansatz-Gleichungen für die Eigenwerte der Quantentransfermatrix  $t(\lambda) = \text{tr}_{V_j} \{ T_j(\lambda) \}$  herleiten. Im Trotter-Limes  $M \rightarrow \infty$  kann der dominante Eigenwert von  $t(\lambda) = \text{tr}_{V_j} \{ T_j(\lambda) \}$  über die Integralgleichung

$$\ln \Lambda(\lambda) = \ln (\sinh(\lambda + \varphi - s)) + \int_{\mathcal{C}} \frac{dw}{2\pi i} e^{(w - \lambda)} \ln(1 + \mathbf{a}(w)) \quad (97)$$

bestimmt werden. Er wird durch die Hilfsfunktion

$$\ln \mathbf{a}(\lambda) = -\beta e(\lambda) + \ln \left( \frac{\sinh(\lambda + \varphi + s)}{\sinh(\lambda + \varphi - s)} \right) + \int_{\mathcal{C}} \frac{dw}{2\pi i} K(\lambda - w) \ln(1 + \mathbf{a}(w)) \quad (98)$$

charakterisiert. Hierbei bezeichnet  $\mathcal{C}$  die „kanonische“ Kontur, die die reelle Achse entgegen des Uhrzeigersinns innerhalb des Streifens  $\{ \lambda \in \mathbb{C} : -\gamma/2 < \text{Im}\lambda < \gamma/2 \}$  umrundet.

Die Zustandssumme  $Z(\varphi, s)$  lässt sich gemäß

$$Z(\varphi, s) = \lim_{M \rightarrow \infty} \text{tr}_{a_1, \dots, a_M, \mathcal{A}} \{ (t(0))^N \} \quad (99)$$

durch die Quantentransfermatrix  $t(\lambda)$  ausdrücken und ist für eine große Anzahl  $N$  an Gitterplätzen durch den dominanten Eigenwert (97) von  $t(\lambda)$  bestimmt:  $Z(\varphi, s) \stackrel{N \rightarrow \infty}{\sim} \Lambda^N(0)$ .

In [4] wurde in Korollar 1 eine Integralformel angegeben, die es ermöglicht, auch die Erwartungswerte  $\langle e_{12}^1 e_{21}^2 \rangle_s$  und  $\langle e_{11}^2 e_{22}^1 \rangle_s$  in Gl. (95) aus den Größen der Quantentransfermatrix-Methode zu bestimmen. Durch Betrachtung spezieller Fälle der dort angegebenen Gleichung (s. Anhang A.3.1) kann gezeigt werden, dass für die Differenz der beiden Erwartungswerte gilt

$$\langle e_{11}^2 e_{22}^1 \rangle - \langle e_{12}^1 e_{21}^2 \rangle = -\sinh(\eta) \int_{\mathcal{C}} \frac{dw}{2\pi i} \frac{\partial_\xi G(w, \xi)|_{\xi=0}}{1 + \mathbf{a}(w)}, \quad (100)$$

wobei die Funktion  $G(\lambda, \xi)$  durch die Integralgleichung

$$G(\lambda, \xi) = e(\xi - \lambda) - \int_{\mathcal{C}} \frac{dw}{2\pi i} K(\lambda - w) \frac{G(w, \xi)}{1 + \mathbf{a}(w)} \quad (101)$$

definiert ist und die Funktion  $\bar{\mathbf{a}}(\lambda) = 1/\mathbf{a}(\lambda)$  verwendet wurde.

Wir wollen die rechte Seite in Gl. (101) durch thermodynamische Größen ausdrücken. Die Eigenwertfunktion lässt sich auch durch  $\bar{\mathbf{a}}$  ausdrücken

$$\ln \Lambda(\lambda) = \ln (\sinh(\lambda + \varphi + s)) - \int_{\mathcal{C}} \frac{dw}{2\pi i} e^{(\lambda - w)} \ln(1 + \mathbf{a}(\bar{w})), \quad (102)$$

wobei für die Hilfsfunktion  $\bar{\mathbf{a}}$  folgende Integralgleichung gilt:

$$\ln \bar{\mathbf{a}}(\lambda) = \beta e(\lambda - \eta) + \ln \left( \frac{\sinh(\lambda + \varphi - s)}{\sinh(\lambda + \varphi + s)} \right) - \int_{\mathcal{C}} \frac{d\varphi}{2\pi i} K(\lambda - \varphi) \ln(1 + \bar{\mathbf{a}}(\varphi)). \quad (103)$$

Hierbei wurde durch Anwendung eines Twists auf die Monodromiematrix,

$$T(\lambda) \mapsto T(\lambda) \begin{pmatrix} e^{-\frac{h}{2T}} & 0 \\ 0 & e^{\frac{h}{2T}} \end{pmatrix}, \quad (104)$$

d.h.  $a(\lambda) \mapsto e^{-\frac{h}{2T}} a(\lambda)$  und  $d(\lambda) \mapsto e^{\frac{h}{2T}} d(\lambda)$ , ein Magnetfeld der Stärke  $h$  in das System eingeführt. In Analogie zur freien Energie und Magnetisierung pro Gitterplatz der XXZ-Spin-1/2-Heisenbergkette führen wir die beiden Größen  $f(h, T, \xi) = -T \ln \Lambda(\xi)$  und  $m(h, T, \xi) = -\frac{\partial f(h, T, \xi)}{\partial h}$  ein. Wegen Gl. (102) gilt für die Magnetisierung die Integralgleichung

$$m(h, T, \xi) = -\frac{1}{2} - \int_{\mathcal{C}} \frac{dw}{2\pi i} e(\xi - w) \frac{\sigma(w)}{1 + \bar{\mathbf{a}}(w)}, \quad (105)$$

wobei die Funktion  $\sigma(\lambda)$  durch

$$\sigma(\lambda) = T \partial_h \ln \bar{\mathbf{a}}(\lambda) = 1 - \int_{\mathcal{C}} \frac{dw}{2\pi i} K(\lambda - w) \frac{\sigma(w)}{1 + \bar{\mathbf{a}}(w)} \quad (106)$$

definiert ist. Aus den Gln. (101) und (106) lässt sich mittels des „Dressed Function Tricks“ die folgende Relation ableiten:

$$\int_{\mathcal{C}} \frac{dw}{2\pi i} \frac{\partial_\xi G(w, \xi)|_{\xi=0}}{1 + \mathbf{a}(w)} = \int_{\mathcal{C}} \frac{dw}{2\pi i} \partial_\xi e(\xi - w)|_{\xi=0} \frac{\sigma(w)}{1 + \bar{\mathbf{a}}(w)}. \quad (107)$$

Daraus folgt direkt

$$\partial_\xi m(h, T, \xi)|_{\xi=0} = - \int_{\mathcal{C}} \frac{dw}{2\pi i} \frac{\partial_\xi G(w, \xi)|_{\xi=0}}{1 + \mathbf{a}(w)} \quad (108)$$

und wir können Gl. (100) umformulieren zu

$$\langle e_{11}^2 e_{22}^1 \rangle - \langle e_{12}^1 e_{21}^2 \rangle = \sinh(\eta) \partial_\xi m(0, T, \xi)|_{\xi=0}. \quad (109)$$

Gleichung (92) wird schließlich zu

$$\begin{aligned} \langle JQ(\varphi, s) \rangle &= -2(-i)^{N-1} N \sinh(\eta) \sinh^N(\varphi) \\ &[(\partial_s \ln Z(\varphi, s)|_{s=0}) \cdot (\partial_\xi m(0, T, \xi)|_{\xi=s=0}) + \partial_s \partial_\xi m(0, T, \xi)|_{\xi=s=0},] \end{aligned} \quad (110)$$

wobei  $Z(\varphi, 0) = \sinh^N(\varphi) \cdot Z$  verwendet wurde.

### Grenzfall $T \rightarrow \infty$

Für  $T = \infty$  löst  $\mathbf{a}(\lambda) = \frac{\sinh(\lambda + \varphi + s)}{\sinh(\lambda + \varphi - s)}$  die Integralgleichung (98). Für den dominanten Eigenwert der Quantentransformmatrix erhalten wir dann nach Gl. (97)  $\Lambda(0) = 2 \sinh(\varphi) \cosh(s)$ . Für großes  $N$  folgt daher

$$\frac{Z(\varphi, s)}{Z} \sim \left( \frac{\Lambda(0)}{2} \right)^N = (\sinh(\varphi) \cosh(s))^N. \quad (111)$$

Insbesondere gilt  $\partial_s \ln Z(\varphi, s)|_{s=0} = 0$ .

Ferner löst  $G(\lambda, \xi) = e(\xi - \lambda) + \frac{K(\lambda - \xi)}{1 + a(\xi)}$  die Integralgleichung (101). Für die Ableitung ergibt sich  $\partial_\xi G(\lambda, \xi)|_{\xi=0} = \frac{\sinh(\eta) \sinh(2\lambda - \eta)}{\sinh(\lambda) \sinh^2(\lambda - \eta)} + \dots$ , wobei der nicht explizit aufgeführte Anteil holomorph im Inneren der Kontur  $\mathcal{C}$  ist. Gleichung (108) liefert damit

$$\partial_\xi m(h, T, \xi)|_{\xi=0} = \frac{\tanh(s)}{2 \sinh^2(\varphi)}. \quad (112)$$

Daher ist  $\partial_s \partial_\xi m(0, T, \xi)|_{\xi=s=0} = \frac{1}{\sinh^2(\varphi)}$  und Gl. (110) liefert schließlich

$$|\langle JQ(\varphi, s) \rangle|^2 = N^2 \sin^2(\gamma) \sinh^{N-2}(\varphi) \sinh^{N-2}(\bar{\varphi}). \quad (113)$$

### 3.3. Grenzfall $T \rightarrow \infty$

In den Abschnitten 3.1 und 3.2 wurden die in der Mazur-Schranke  $D_Q$  auftauchenden Terme bereits für den Grenzfall  $T \rightarrow \infty$  bestimmt. Für die Norm erhalten wir mit den Ergebnissen aus 3.1.1 und 3.1.2 nach Gl. (36) insgesamt

$$\|Q(\varphi)\|^2 = -4N \sinh^{N-1}(\varphi) \sinh^{N-1}(\bar{\varphi}) \frac{\sin(2(m-1)\text{Im}\varphi)}{\sin(2m\text{Im}\varphi)} \quad (114)$$

Mit dem Ergebnis (113) für den Überlapp aus Abschnitt 3.2 erhalten wir insgesamt also die Mazur-Schranke

$$D_Q = -\frac{\sin^2(\gamma)}{2\beta^2} \frac{\sin(2m\text{Im}\varphi)}{\sin(2(m-1)\text{Im}\varphi)} \quad (115)$$

und können das Ergebnis aus dem Zugang nach Peireira et al. für  $T \rightarrow \infty$  vollständig reproduzieren.

## A. Anhang

### A.1. Ergänzungen zu Abschnitt 1

#### A.1.1. Getwistete Randbedingungen

Es kann durch Modifikation der Monodromiematrix

$$T_a(\varphi, \phi) = L_N(\varphi) e^{\frac{i\phi}{N} s_a^z} \dots L_1(\varphi) e^{\frac{i\phi}{N} s_a^z} \quad (116)$$

ein Twist um den Winkel  $\phi$  eingeführt werden. Die Yang-Baxter-Gleichung in  $\mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^2$  bleibt wegen

$$e^{\frac{i\phi}{N} s_a^z} L_j(\varphi, s) e^{-\frac{i\phi}{N} s_a^z} = e^{-\frac{i\phi}{N} s_j^z} L_j(\varphi, s) e^{\frac{i\phi}{N} s_j^z} \quad (117)$$

unverändert gültig, d.h. die Transfermatrizen  $t_a(\varphi, \phi) = \text{tr}_a\{T_a(\varphi, \phi)\}$  bilden bei fixiertem Twistwinkel  $\phi$  eine kommutierende Familie:

$$[t_a(\varphi, \phi), t_a(\mu, \phi)] = 0 \quad \forall \quad \varphi, \mu \in \mathbb{C}. \quad (118)$$

Der mit  $t_a(\varphi, \phi)$  assoziierte Hamiltonoperator hat die Gestalt

$$H_N(\phi) = \frac{d}{d\varphi} \log t_a(\varphi, \phi)|_{\varphi=0} = \frac{1}{\sinh(\eta)} \sum_{j=1}^N [e^{\frac{i\phi}{N}} \sigma_j^- \sigma_{j+1}^+ + e^{-\frac{i\phi}{N}} \sigma_j^+ \sigma_{j+1}^- + \frac{\Delta}{2} (\sigma_j^z \sigma_{j+1}^z - 1)] \quad (119)$$

mit periodischen Randbedingungen  $\sigma_{N+1}^\alpha \equiv \sigma_1^\alpha$ . Im Einzelnen gilt

$$t_a(0, \phi) = e^{\frac{i\phi}{N} \sum_{j=1}^N s_j^z \hat{U}},$$

$$\left. \frac{\partial t_a(\varphi, \phi)}{\partial \varphi} \right|_{\varphi=0} = e^{\frac{i\phi}{N} \sum_{j=1}^N s_j^z \hat{U}} \left( H_N + \frac{\sin(\frac{\phi}{2N})}{\sinh \eta} \sum_{j=1}^N \left[ e^{-\frac{i\phi}{N} s_{j-1}^z} (\sigma_j^x \sigma_{j-1}^y - \sigma_j^y \sigma_{j-1}^x) \right] \right) \quad (120)$$

und  $\hat{P}H_N(\phi)\hat{P} = H_N(-\phi)$ . In Analogie zu  $a = \mathbb{C}^2$  definieren wir die getwistete Monodromiematrix bzgl. des Hilfsraums  $\mathcal{A}$  durch

$$T_{\mathcal{A}}(\varphi, s, \phi) = \mathcal{L}_N(\varphi, s) e^{\frac{i\phi}{N} S_{\mathcal{A}}^z} \dots \mathcal{L}_1(\varphi, s) e^{\frac{i\phi}{N} S_{\mathcal{A}}^z}. \quad (121)$$

Es gelten folgende Relationen:

$$e^{\frac{i\phi}{N} S^z} S^\pm e^{-\frac{i\phi}{N} S^z} = e^{\pm \frac{i\phi}{N} S^\pm}, \quad (122)$$

$$e^{\frac{i\phi}{N} S_{\mathcal{A}}^z} \mathcal{L}_j(\varphi, s) e^{-\frac{i\phi}{N} S_{\mathcal{A}}^z} = e^{-\frac{i\phi}{N} s_j^z} \mathcal{L}_j(\varphi, s) e^{\frac{i\phi}{N} s_j^z}, \quad (123)$$

$$[S_{\mathcal{A}}^z, \mathcal{L}_j(\varphi, s)] = [\mathcal{L}_j(\varphi, s), s_j^z] = i \sinh^2(\eta) \mathcal{J}_j(s), \quad (124)$$

$$[S_{\mathcal{A}}^z, T_{\mathcal{A}}(\varphi, s)] = [T_{\mathcal{A}}(\varphi, s), \sum_{j=1}^N s_j^z] \Rightarrow [t_{\mathcal{A}}(\varphi, s), \sum_{j=1}^N s_j^z] = 0 \quad (125)$$

mit

$$\mathcal{J}_j(s) = \frac{i}{\sinh(\eta)} (\sigma_j^+ S_{\mathcal{A}}^- - \sigma_j^- S_{\mathcal{A}}^+(s)). \quad (126)$$

Relation (123) führt zusammen mit der Yang-Baxter-Gleichung in  $\mathbb{C}^2 \otimes \mathbb{C}^2 \otimes \mathcal{A}$  im ungetwisteten Fall für  $t_{\mathcal{A}}(\varphi, \phi, s) = \text{tr}_{\mathcal{A}}\{T_{\mathcal{A}}(\varphi, \phi, s)\}$  auf

$$[t_a(\varphi, \phi), t_{\mathcal{A}}(\mu, s, \phi)] = 0 \quad \forall \quad \varphi, \mu \in \mathbb{C}. \quad (127)$$

Wegen  $\hat{P}H(\phi)\hat{P} = H(-\phi)$  ist

$$Q(\varphi, \phi) = (-i)^N [\hat{P} \partial_s t_{\mathcal{A}}(\varphi, -\phi, s)|_{s=0} \hat{P} - \partial_s t_{\mathcal{A}}(\varphi, \phi, s)|_{s=0}] \quad (128)$$

eine Erhaltungsgröße bzgl. des Systems mit Hamiltonoperator  $H_N(\phi)$ . Zu beachten ist, dass diese Erhaltungsgröße nicht ungerade unter Paritätstransformation ist. Genauer gilt  $\hat{P}Q(\varphi, \phi)\hat{P} = -Q(\varphi, -\phi)$ . Für  $\phi = 0$  gehen die getwisteten wieder in die entsprechenden nichtgetwisteten Größen über.

Es gibt eine andere Möglichkeit, einen Twist einzuführen, ohne die Integrabilität des Modells zu beeinflussen, indem man statt (116) und (121) die Monodromiematrizen

$$\begin{aligned}\tilde{T}_a(\varphi, \phi) &= e^{i\phi s_a^z} L_N(\varphi) \dots L_1(\varphi) \\ \tilde{T}_{\mathcal{A}}(\varphi, s, \phi) &= e^{i\phi s_{\mathcal{A}}^z} \mathcal{L}_N(\varphi, s) \dots \mathcal{L}_1(\varphi, s)\end{aligned}\tag{129}$$

betrachtet. Für die Transfermatrizen  $\tilde{t}_a(\varphi, \phi) = \text{tr}_a\{\tilde{T}_a(\varphi, \phi)\}$  und  $\tilde{t}_{\mathcal{A}}(\varphi, \phi) = \text{tr}_a\{\tilde{T}_{\mathcal{A}}(\varphi, \phi)\}$  gelten entsprechende Vertauschungsrelationen wie in (118) und (127). Als logarithmische Ableitung der Transfermatrix  $\tilde{t}_a(\varphi, \phi)$  ergibt sich der Hamiltonoperator

$$\tilde{H}_N(\phi) = \frac{1}{\sinh(\eta)} \sum_{j=1}^{N-1} [\sigma_j^- \sigma_{j+1}^+ + \sigma_j^+ \sigma_{j+1}^- + \frac{\Delta}{2} (\sigma_j^z \sigma_{j-1}^z - 1)] + R(\phi),\tag{130}$$

wobei offene (keine) Randbedingungen benutzt wurden und der Randbeitrag  $R(\phi)$  gegeben ist durch

$$R(\phi) = \frac{1}{\sinh(\eta)} [e^{i\phi} \sigma_1^+ \sigma_N^- + e^{-i\phi} \sigma_1^- \sigma_N^+ + \frac{\Delta}{2} (\sigma_1^z \sigma_{N-1}^z - 1)].\tag{131}$$

Wählt man gemäß  $\sigma_{N+1}^\pm = e^{\pm i\phi} \sigma_1^\pm$  und  $\sigma_{N+1}^z = \sigma_1^z$  getwistete Randbedingungen, so lässt sich der Hamiltonoperator einfach schreiben als  $\tilde{H}_N(\phi) = H_N$ . Es gilt jetzt allerdings nicht  $J = \partial_\phi \tilde{H}_N(\phi)$ , sodass diese Variante zur Berechnung von  $\langle J, Q(\varphi) \rangle$  unpraktikabel ist.

Die beiden Varianten stehen über eine Ähnlichkeitstransformation

$$M(\phi) = \exp\left\{\frac{i\phi}{N} \sum_{j=1}^N j s_j^z\right\}\tag{132}$$

miteinander in Verbindung. Es gilt:

$$\begin{aligned}H_N(\phi) &= M(\phi) \tilde{H}_N(\phi) M^\dagger(\phi), \\ t_a(\varphi, \phi) &= M(\phi) \tilde{t}_a(\varphi, \phi) M^\dagger(\phi), \\ t_{\mathcal{A}}(\varphi, s, \phi) &= M(\phi) \tilde{t}_{\mathcal{A}}(\varphi, s, \phi) M^\dagger(\phi),\end{aligned}\tag{133}$$

wobei

$$e^{i\phi s_j^z} R_{j,a}(\varphi) e^{-i\phi s_j^z} = e^{-i\phi s_a^z} R_{j,a}(\varphi) e^{i\phi s_a^z}\tag{134}$$

benutzt wurde.

## A.2. Ergänzungen zu Abschnitt 2

### A.2.1. Dominanter Eigenwert von $\mathcal{T}_1$ bzw. $\mathcal{T}_2$

Die Matrix  $\mathcal{T}_2$  ist symmetrisch und die Matrix  $\mathcal{T}_1$  weist über die Transformation

$$S = \sum_{r=1}^{m-1} |\sin(\lambda r)| |r\rangle \langle r| + \sum_{r=0}^{m-1} C_{m-1-r} |0\rangle \langle r| \quad (135)$$

mit

$$C_r := \sum_{s=0}^{\lfloor \frac{r}{2} \rfloor} \binom{r-s}{s} (-1)^s 2^{r-2s} (\beta^2 - \alpha^2)^{r-2s} \quad (136)$$

eine Ähnlichkeit zur symmetrischen Matrix

$$\mathcal{M}_1(\varphi) := \beta^2 \mathbb{1} + BA_1B \quad (137)$$

mit

$$\begin{aligned} A_1 &= \frac{1}{2}\Delta - (\beta^2 - \alpha^2)\mathbb{1}, \\ B &= \sum_{r=0}^{m-1} |\sinh(\eta r)| |r\rangle \langle r|, \\ \Delta &= \sum_{r=0}^{m-2} (|r\rangle \langle r+1| + |r+1\rangle \langle r|) \end{aligned} \quad (138)$$

auf. Die Matrizen  $\mathcal{M}_1(\varphi)$  und  $\mathcal{T}_2(\varphi)$  haben beide Blockgestalt. Der eine Block ist je eindimensional und enthält den dominanten Eigenwert  $\beta^2 = \sinh(\varphi) \sinh(\bar{\varphi})$ . Der andere Block kann durch die jeweilige Matrix

$$\begin{aligned} m_1(\varphi) &= \beta^2 \mathbb{1}_{m-1} + ba_1b, \\ m_2(\varphi) &= (-1)^l [\beta^2 \mathbb{1}_{m-1} + ba_2b] \end{aligned} \quad (139)$$

mit

$$\begin{aligned} a_1 &= \frac{1}{2}\delta - (\beta^2 - \alpha^2)\mathbb{1}_{m-1}, \\ a_2 &= \frac{1}{2}\delta - (\beta^2 + \alpha^2)\mathbb{1}_{m-1}, \\ b &= \sum_{r=1}^{m-1} |\sinh(\eta r)| |r\rangle \langle r|, \\ \delta &= \sum_{r=1}^{m-2} (|r\rangle \langle r+1| + |r+1\rangle \langle r|) \end{aligned} \quad (140)$$

ausgedrückt werden, wobei bei dem Block von  $\mathcal{T}_2(\varphi)$  zusätzlich eine Reskalierung der Basis gemäß  $|r\rangle \mapsto (-1)^r \text{sign}(\sin(\lambda r))$  durchgeführt wurde.

Dass es sich bei  $\beta^2$  in beiden Fällen um den dominanten Eigenwert handelt, kann gezeigt werden, indem das Spektrum von  $m_1(\varphi)$  und  $m_2(\varphi)$  untersucht wird. Eine Methode hier ist es, die Matrix  $\widetilde{m}_1(\varphi) := m_1(\varphi) - \beta^2 \mathbb{1}_{m-1}$  bzw.  $\widetilde{m}_2(\varphi) := (-1)^l m_2(\varphi) - \beta^2 \mathbb{1}_{m-1}$  zu betrachten. Diese Matrix ist negativ definit genau dann, wenn  $\lambda < \beta^2$  für alle Eigenwerte  $\lambda$  von  $m_1(\varphi)$  bzw.  $(-1)^l m_2(\varphi)$ <sup>1</sup>. Es lässt sich für  $m_1(\varphi)$  zeigen, dass  $\widetilde{m}_1(\varphi) < 0$  gleichbedeutend ist mit  $\left| |\operatorname{Im}(\varphi)| - \frac{\pi}{2} \right| < \frac{\pi}{2m}$ , während  $\widetilde{m}_2(\varphi) < 0$  für alle  $\varphi \in \mathbb{C}$  gilt.

Alle Matrixelemente von  $m_1(\varphi)$  sind reell und nichtnegativ. Außerdem ist  $m_1(\varphi)$  tridiagonal mit positiven Einträgen auf den Haupt- und Nebendiagonalen. Also gilt  $m_1(\varphi)^k > 0$  (elementweise) für ein  $k \in \mathbb{N}$ , d.h.  $m_1(\varphi)$  ist irreduzibel. Nach dem Satz von Perron-Frobenius ist der Spektralradius  $\rho_1$  von  $m_1(\varphi)$  ein positiver, einfacher Eigenwert von  $m_1(\varphi)$ . Daher gilt für alle Eigenwerte  $\lambda$  von  $m_1(\varphi)$  auch, dass  $\lambda > -\beta^2$ .

Für  $(-1)^l m_2(\varphi)$  lässt sich über das Gershgorin-Kreis-Theorem zeigen, dass für alle Eigenwerte  $\lambda$  gilt  $\lambda > -\beta^2$ , wenn  $\left| |\operatorname{Im}(\varphi)| - \frac{\pi}{2} \right| < \frac{\pi}{2m}$ .

Damit gilt insgesamt für  $j = 1, 2$ :

$$\left| |\operatorname{Im}(\varphi)| - \frac{\pi}{2} \right| < \frac{\pi}{2m} \Rightarrow |\lambda| < \beta^2 \quad \forall \text{ Eigenwerte } \lambda \text{ von } m_j(\varphi). \quad (141)$$

Wir wollen uns im Folgenden auf solche Werte von  $\varphi$  beschränken, die die Bedingung  $\left| |\operatorname{Im}(\varphi)| - \frac{\pi}{2} \right| < \frac{\pi}{2m}$  erfüllen.

### A.2.2. Linker Eigenvektor von $\mathcal{T}_1(\varphi)$ zum Eigenwert $\beta^2$

Wir bezeichnen die Matrixelemente von  $\mathcal{T}_1(\varphi)$  durch  $t_{r,s} := \langle r | \mathcal{T}_1(\varphi) | s \rangle$ . Es gilt die Beziehung

$$t_{r+1,r} = \frac{1}{4} \frac{(\beta^2 - t_{r,r})(\beta^2 - t_{r+1,r})}{(\beta^2 - \alpha^2)^2}. \quad (142)$$

Die Komponenten des linksseitigen Eigenvektors  $\langle 0_L |$  von  $\mathcal{T}_1(\varphi)$  zum Eigenwert  $\beta^2$  seien  $v_r$ ,  $r = 0, \dots, m-1$ . Das Gleichungssystem  $\langle 0_L | \mathcal{T}_1(\varphi) = \beta^2 \langle 0_L |$  lässt sich mithilfe der Gl. (142) äquivalent als Rekursionsbeziehung

$$v_{m-r} = \frac{t_{m-r-1,m-r}}{(\beta^2 - t_{m-r,m-r})c_{r-1}} v_{m-r-1} \quad (143)$$

zwischen den Einträgen von  $\langle 0_L |$  formulieren, wobei die Größen  $c_r$  wiederum über die Rekursionsgleichung

$$\begin{aligned} c_r &:= 1 - \frac{1}{4(\beta^2 - \alpha^2)^2 c_{r-1}}, \quad r = 1, \dots, m-1, \\ c_0 &:= 1 \end{aligned} \quad (144)$$

---

<sup>1</sup>Es ist irrelevant, ob hier  $+m_2(\varphi)$  oder  $-m_2(\varphi)$  betrachtet wird, da der Spektralradius beider Matrizen gleich ist.

definiert sind. Gleichung (144) wird gelöst durch

$$c_r := \frac{\sin(2(r+2)\text{Im}\varphi)}{\sin(2(r+2)\text{Im}\varphi) + \sin(2r\text{Im}\varphi)}, \quad r = 0, \dots, m-1. \quad (145)$$

Das Lösen von Gl. (143) ergibt schließlich den linksseitigen Eigenvektor zu

$$\langle 0_L | = \sum_{r=0}^{m-1} (-1)^r \frac{\sin(2(m-r)\text{Im}\varphi)}{\sin(2m\text{Im}\varphi)}. \quad (146)$$

Es gilt  $\langle 0_L, 0 \rangle = 1$ .

### A.2.3. Ableitungen der eingeschränkten Matrizen

$$\mathcal{T}_1^{(1,0)}(\varphi) = [\alpha^2 - \beta^2] \sum_{r=0}^{m-1} \sinh(\eta r) \cosh(\eta r) |r\rangle \langle r| + \sum_{r=0}^{m-2} \sinh(\eta r) \cosh(\eta r) |r+1\rangle \langle r|,$$

$$\mathcal{T}_1^{(0,1)}(\varphi) = -\mathcal{T}_1^{(1,0)}(\varphi),$$

$$\mathcal{T}_1^{(1,1)}(\varphi) = \sum_{r=0}^{m-1} [\beta^2 \cosh^2(\eta r) - \alpha^2 \sinh^2(\eta r)] |r\rangle \langle r| + 2 \sum_{r=0}^{m-2} \cosh^2(\eta r) |r+1\rangle \langle r|$$

$$\mathcal{T}_2^{(1,0)}(\varphi) = -(-1)^l \left\{ [\alpha^2 + \beta^2] \sum_{r=0}^{m-1} \sinh(\eta r) \cosh(\eta r) |r\rangle \langle r| + \sum_{r=1}^{m-2} \sinh(\eta(r+1)) \cosh(\eta r) |r+1\rangle \langle r| \right\},$$

$$\mathcal{T}_2^{(0,1)}(\varphi) = -(-1)^l \left\{ [\alpha^2 + \beta^2] \sum_{r=0}^{m-1} \sinh(\eta r) \cosh(\eta r) |r\rangle \langle r| + \sum_{r=1}^{m-2} \cosh(\eta(r+1)) \sinh(\eta r) |r+1\rangle \langle r| \right\},$$

$$\mathcal{T}_1^{(1,1)}(\varphi) = \beta^2 |0\rangle \langle 0| + (-1)^l \left\{ \sum_{r=1}^{m-1} [\beta^2 \sinh^2(\eta r) + \alpha^2 \cosh^2(\eta r)] |r\rangle \langle r| \right. \\ \left. + 2 \sum_{r=1}^{m-2} \cosh(\eta r) \cosh(\eta(r+1)) |r+1\rangle \langle r| \right\}$$

(147)

## A.3. Ergänzungen zu Abschnitt 3

### A.3.1. Anwendung der Integralformel aus [4] für Zweipunkt-Korrelatoren

$$\langle e_{11}^2 e_{22}^1 \rangle = \int_{\mathcal{C}} \frac{dw_1}{2\pi i (1 + \mathbf{a}(w_1))} \sinh(w_1 - \eta) \int_{\mathcal{C}} \frac{dw_2}{2\pi i (1 + \bar{\mathbf{a}}(w_2))} \sinh(w_2 + \eta) \\ \det \left\{ \left( -\frac{\partial_{\xi}^{(k-1)} G(w_j, \xi)|_{\xi=0}}{(k-1)!} \right)_{j,k=1,2} \right\} \frac{1}{\sinh(w_1 - w_2 - \eta)}, \quad (148)$$

$$\langle e_{12}^1 e_{21}^2 \rangle = \int_{\mathcal{C}} \frac{dw_1}{2\pi i (1 + \mathbf{a}(w_1))} \sinh(w_1) \int_{\mathcal{C}} \frac{dw_2}{2\pi i (1 + \bar{\mathbf{a}}(w_2))} \sinh(w_2) \\ \det \left\{ \left( -\frac{\partial_{\xi}^{(k-1)} G(w_j, \xi)|_{\xi=0}}{(k-1)!} \right)_{j,k=1,2} \right\} \frac{1}{\sinh(w_1 - w_2 - \eta)},$$

## Literaturverzeichnis

- [1] J. Sirker, R. G. Pereira und I. Affleck, Conservation laws, integrability, and transport in one-dimensional quantum systems, *Phys. Rev. B*, 83, **2011**.
- [2] R. G. Pereira et al., Exactly conserved quasilocal operators for the XXZ spin chain, *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, 2014(9), **2014**.
- [3] F. Essler et al., *The One-Dimensional Hubbard Model*, Cambridge University Press, **2005**.
- [4] F. Göhmann, N. P. Hasenclever und A. Seel, The finite temperature density matrix and two-point correlations in the antiferromagnetic xxz chain, *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*, 2005(10), **2005**.