# Numerische Untersuchung von Korrelationsfunktionen für das quantengruppeninvariante Heisenbergmodell

von

Thomas Heinzel

Diplomarbeit in Physik
angefertigt im
Physikalischen Institut

vorgelegt der
Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät
der
Rheinischen Friedrich-Wilhelms-Universität
Bonn

Februar 1995

Ich versichere, daß ich diese Arbeit selbständig verfaßt und keine anderen als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel benutzt sowie die Zitate kenntlich gemacht habe.

| | |
|---|---|
| Referent: | Prof. Dr. V. Rittenberg |
| Korreferent: | Prof. Dr. G. von Gehlen |

Inhalt

## 1. Einleitung

Für die Gleichgewichtssysteme der statistischen Physik stellt die Berechnung von Korrelationsfunktionen eine zentrale Aufgabe dar. Sie können nur für wenige Fälle analytisch bestimmt werden. Auch für eindimensionale integrable Systeme ist dieses Problem im allgemeinen nicht gelöst. In dieser Arbeit werden spezielle Korrelationsfunktionen [1] für eine Klasse von eindimensionalen kritischen quantenmechanischen Modellen untersucht und für verschiedene Fälle numerisch berechnet. Dabei ist insbesondere der Zusammenhang zwischen den Zweipunktoperatoren auf dem Gitter und zugehörigen Operatoren in der konformen Feldtheorie von Interesse.

Die Modelle werden durch einen Hamiltonoperator beschrieben, der sich durch die Generatoren $e_i$ einer Temperley-Lieb-Algebra ausdrücken läßt [2]

$$H = H(q) = -\sum_{i=1}^{N-1} e_i \; . \tag{1.1}$$

Eine Temperley-Lieb-Algebra $T_N(q)$ ist die assoziative Algebra mit Eins, deren Generatoren $e_i$, $i = 1, 2, \ldots, N-1$, die Relationen

$$e_i \, e_i = (q + q^{-1}) \, e_i \tag{1.2}$$

$$e_i \, e_{i\pm 1} \, e_i = e_i \tag{1.3}$$

$$e_i \, e_j = e_j \, e_i \qquad\qquad (j \neq i \pm 1) \tag{1.4}$$

erfüllen [3, 4]. In dieser Arbeit werden nur gerade Werte von $N$ betrachtet, so daß der Hamiltonoperator einen eindeutigen Grundzustand besitzt. Die Korrelationsfunktionen werden für Einheitswurzeln $q$ berechnet.
Der Operator $H$ kann als Element der Temperley-Lieb-Algebra – unabhängig von einer speziellen Darstellung dieser Algebra – betrachtet werden. Verschiedene Darstellungen der Temperley-Lieb-Algebra ergeben für $H$ die Hamiltonoperatoren spezieller Quantenspinketten mit Quantengruppensymmetrien (siehe z.B. [5, 6]). Eine Darstellung von $T_N(q)$ auf dem Konfigurationsraum $(\mathbb{C}^2)^{\otimes N}$ einer Spin-$\frac{1}{2}$ Quantenkette mit $N$ Gitterplätzen ist durch

$$e_i = -\frac{1}{2}\Big(\sigma_i^x \sigma_{i+1}^x \; + \; \sigma_i^y \sigma_{i+1}^y \; + \; \frac{q+q^{-1}}{2}\,(\sigma_i^z \sigma_{i+1}^z - 1) \; + \; \frac{q-q^{-1}}{2}\,(\sigma_i^z - \sigma_{i+1}^z)\Big) \tag{1.5}$$

gegeben. Hierbei sind $\sigma_i^x$, $\sigma_i^y$ und $\sigma_i^z$ Pauli-Spinmatrizen, die auf den zu Gitterplatz $i$ gehörenden Raum $\mathbb{C}^2$ wirken. In dieser Darstellung beschreibt der Hamiltonoperator ein $XXZ$ Spin-$\frac{1}{2}$ Heisenbergmodell mit speziellen Randtermen, die eine Symmetrie von $H$ unter einer entsprechenden Darstellung der Quantengruppe $U_qSU(2)$ bewirken.
Das Heisenbergmodell wurde ursprünglich zur Erklärung des Magnetismus vorgeschlagen [7]. Es ist ein einfaches quantenmechanischen Vielteilchensystem und beschreibt eine Austauschwechselwirkung zwischen Spins, die einzelnen Gitterplätzen zugeordnet werden:

$$H = \sum_i J_x \, \sigma_i^x \sigma_{i+1}^x \; + \; J_y \, \sigma_i^y \sigma_{i+1}^y \; + \; J_z \, \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z \; , \tag{1.6}$$

mit Kopplungskonstanten $J_x$,$J_y$ und $J_z$. Das $XXZ$-Modell ($J_x = J_y$) für periodische Randbedingungen wurde durch den Bethe-Ansatz, als Verallgemeinerung der Lösung des Eigenwertproblems für das $XXX$-Modell ($J_x = J_y = J_z$) durch Bethe [8], behandelt und gelöst [9].
Ein Zusammenhang zwischen der periodischen $XXZ$-Kette und einem zweidimensionalen klassischen statistischen Modell wurde in [10] hergeleitet: Der Hamiltonoperator für das $XXZ$-Modell läßt sich auch als logarithmische Ableitung der Transfermatrix des zweidimensionalen 6-Vertex-Modells auffassen. Für zweidimensionale statistische Systeme mit kurzreichweitiger isotroper Wechselwirkung erwartet man an einem kritischen Punkt allgemein ein konform invariantes Verhalten, wodurch die kritischen Exponenten und *bulk*-Korrelationsfunktionen festgelegt werden [11, 12]. Der Hamiltonoperator als logarithmische Ableitung der Transfermatrix gehört dann im Kontinuumslimes zu einer konformen Feldtheorie. Der Hamiltonoperator des $XXZ$-Modells (und damit $H$) ist masselos für Werte von $q$ auf dem Einheitskreis und massiv für reelle Werte von $q$ (außer 1).
Auch das $U_qSU(2)$ symmetrische $XXZ$-Heisenbergmodell, das dem in dieser Arbeit betrachteten Hamiltonoperator (1.1) in der Darstellung (1.5) entspricht, wurde mit Koordinaten- [2, 13] und algebraischem Bethe-Ansatz (siehe z.B. [14, 15, 16, 17]) behandelt. Es tritt ebenfalls bei der Beschreibung von eindimensionalen Reaktions-Diffusions-Prozessen auf [18]. In letzterem Fall ist der Deformationsparameter $q$ der Quantengruppe reell und hat eine einfache physikalische Interpretation als das Verhältnis von Diffusionsraten.
Betrachtet man Einheitswurzeln $q = \exp(\frac{i\pi}{m+1})$, so ist aus numerischen und analytischen Rechnungen [2, 13, 19, 20] bekannt, daß das Spektrum von $H$ (mit den die Quantengruppensymmetrie erzeugenden Randbedingungen) das Spektrum eines Hamiltonoperators enthält, dessen zugehöriges statistisches Modell im Kontinuumslimes durch ein minimales Modell der konformen Feldtheorie beschrieben wird. Die zentrale Ladung ist dabei jeweils durch

$$c = 1 - \frac{6}{m(m+1)} \tag{1.7}$$

gegeben. Für das kritische $XXZ$-Modell mit periodischen Randbedingungen findet man hingegen die zentrale Ladung $c = 1$ (siehe [21] und darin enthaltene Literaturverweise).

Korrelationsfunktionen für Quantenspinketten, insbesondere auch für das Heisenbergmodell, sind Gegenstand großen Interesses. Für die $XXZ$-Kette (mit periodischen oder offenen Randbedingungen, also ohne Quantengruppensymmetrie) wurde eine erste numerische Untersuchung der Korrelationsfunktion zum Operator $\sigma_k^z\sigma_l^z$ in [22] durchgeführt. Für das $SU(2)$ symmetrische $XXX$-Modell wurde die entsprechende Korrelationsfunktion durch numerische Diagonalisierung [23, 24, 25, 26] oder unter Verwendung des Koordinaten-Bethe-Ansatzes [27] für Ringe von bis zu 30 Gitterplätzen bestimmt. Auf analytischem Weg wurde in [28] die Korrelationsfunktion zu $\sigma_k^z\sigma_l^z$ für die kritische periodische $XXZ$-Kette in einem magnetischem Feld untersucht. Dazu wurde eine im Anisotropieparameter perturbative Theorie entwickelt, die auf dem algebraischen Bethe-Ansatz beruht und bereits in erster Ordnung das langreichweitige

Verhalten der Korrelationsfunktion und den kritischen Exponenten liefert. Das Resultat steht in Übereinstimmung mit der feldtheoretisch bestimmten asymptotischen Form [29, 30] der Spin-Spin-Korrelationsfunktionen. Entsprechende numerische Ergebnisse, die für Ringe von bis zu 28 Gitterplätzen mit Hilfe einer Fouriertransformation der Korrelationsfunktion erzielt wurden, finden sich in [31].

In neuester Zeit wurden bei der analytischen Bestimmung von Korrelationsfunktionen für das Heisenbergmodell wichtige Fortschritte erzielt. Mit dem ebenfalls auf dem algebraischen Bethe-Ansatz aufbauenden "Dual Field Approach" können für den kritischen $XXZ$-Hamiltonoperator mit äußerem Magnetfeld und periodischen Randbedingungen Determinantendarstellungen für Korrelationsfunktionen hergeleitet werden, die auf Integro-Differenz-Gleichungen führen [32, 33]. Das langreichweitige Verhalten der Korrelationsfunktionen läßt sich dann aus der Lösung des zugehörigen Riemann-Hilbert Problems bestimmen. Im Prinzip ist auf analoge Weise die Berechnung von Korrelationsfunktionen für alle Modelle möglich, für die sich ein entsprechender Bethe-Ansatz formulieren läßt. Für die unendliche massive $XXZ$-Kette können mit einem anderen Ansatz Integraldarstellungen von Korrelationsfunktionen gefunden werden, aus denen das kurzreichweitige Verhalten bestimmt werden kann [34, 35].

Für den Hamiltonoperator $H$ als Element der Temperley-Lieb-Algebra können Korrelationsfunktionen zu speziellen Zweipunktoperatoren [1, 36] betrachtet werden, die als Elemente der Temperley-Lieb-Algebra ausgedrückt werden können [1]. Diese Zweipunktoperatoren $g_{k,l}$ (in dieser Arbeit definiert in Kapitel 2) werden mit der Darstellung (1.5) zu $U_qSU(2)$ skalaren Verallgemeinerungen des $SU(2)$ invarianten Skalarprodukts zweier Vektoren von Paulimatrizen. Sie werden als skalare Zweipunktoperatoren (*two-point scalar operators*) bezeichnet. Die $g_{k,l}$ wirken nicht lokal auf alle Gitterplätze von $k$ bis $l$.

Über die zugehörigen Korrelationsfunktionen, d.h. auch über die konformen Felder, denen die Zweipunktoperatoren im Kontinuumslimes entsprechen, sind nur wenige Ergebnisse bekannt. Analytische Resultate existieren nur für $q = \exp(\frac{i\pi}{3})$ und $q = \exp(\frac{i\pi}{4})$ [1]; weiterführende (numerische) Untersuchungen sind Gegenstand dieser Arbeit (vgl. auch [37]). Im ersten Fall verschwinden die Korrelationsfunktionen, im zweiten Fall kann $H$ als Ising-Quantenkette dargestellt werden (es ist $c = \frac{1}{2}$ gemäß (1.7)) und man findet zwei verschiedene nicht verschwindende Korrelationsfunktionen, deren Kontinuumslimes durch Zweipunktfunktionen von Linearkombinationen konformer Felder mit Dimensionen $(h, \bar{h}) = (\frac{1}{2}, 0)$ und $(0, \frac{1}{2})$ gegeben sind. Der $U_qSU(2)$ symmetrischen $XXZ$-Kette entspricht dabei eine konforme Feldtheorie auf einer Geometrie mit Rand. Für $m = 5$ existiert eine Quotienten-Darstellung der Temperley-Lieb-Algebra, die $H$ als ein 3-Zustands-Pottsmodell realisiert. Aber in diesem Fall bleiben die Korrelationsfunktionen unbekannt. Allerdings kann man aufgrund einer Symmetrie der skalaren Zweipunktoperatoren erwarten, daß für allgemeine $q = \exp(\frac{i\pi}{m+1})$ ihr Kontinuumslimes in der konformen Feldtheorie das Produkt von Operatoren mit Spin $\frac{m-1}{m+1}$ beinhaltet (vgl. Abschnitt 4.3).

In dieser Arbeit werden die Ergebnisse von numerischen Untersuchungen für die Fälle $q = \exp(\frac{i\pi}{4})$, $q = \exp(\frac{i\pi}{6})$ und $q = \exp(\frac{i\pi 3}{5})$ diskutiert, die gemäß (1.7) minimalen Modellen mit $c = \frac{1}{2}$, $c = \frac{4}{5}$ und $c = -\frac{22}{5}$ entsprechen, also denselben zentralen Ladungen

wie Isingmodell, 3-Zustands-Pottsmodell bzw. Lee-Yang-Singularität des Isingmodells in einem imaginären Magnetfeld. Es wird versucht, aus numerischen Resultaten kritische Exponenten für das *bulk*- und *surface*-Verhalten und damit die konformen Felder zu bestimmen, die den skalaren Zweipunktoperatoren im Kontinuumslimes entsprechen. Insbesondere soll untersucht werden, ob sich das Ergebnis der Symmetrieüberlegung bestätigt. Der erste Fall, für den die Korrelationsfunktionen auf dem Gitter (und die zugehörigen konformen Felder) bekannt sind, wird behandelt, um die Genauigkeit der numerischen Berechnungen abzuschätzen und zu untersuchen, mit welchen Methoden aus den Resultaten für endliche Gitter kritische Exponenten bestimmt werden können. Die Berechnung der Korrelationsfunktionen kann, wie in dieser Arbeit durchgeführt, unabhängig von einer speziellen Darstellung der Temperley-Lieb-Algebra auf dem Konfigurationsraum einer Quantenspinkette erfolgen. Dazu werden graphische Darstellungen der Temperley-Lieb-Algebra auf einem Pfadraum und auf Liniendiagrammen benutzt [5, 38]. Sie ermöglichen auf einfache Weise eine Einschränkung des Konfigurationsraums auf einen Raum, der für die Darstellung (1.5) den $U_qSU(2)$ Singulettzuständen entspricht, wohingegen für den Spinkonfigurationsraum $(\mathbb{C}^2)^{\otimes N}$ eine solche Reduktion nicht einfach erreicht werden kann. (Der Grundzustand ist Element dieses Raums.)
Dadurch wird die Behandlung großer Kettenlängen möglich. Für die Darstellung auf Liniendiagrammen werden 24 Gitterplätze erreicht (unabhängig von $q$, das in diesem Fall nur als Parameter in die Berechnungen eingeht). In der Pfadraumdarstellung ist die Dimension des Konfigurationsraums hingegen abhängig von $q$; mit $q = \exp(\frac{i\pi}{6})$ können die Korrelationen für bis zu 28 Gitterplätze berrechnet werden. (Die größten (periodischen) $XXZ$-Heisenbergketten, für die bisher numerisch durch "exakte" Diagonalisierung berechnete Korrelationsfunktionen publiziert worden sind, haben 28 Gitterplätze [31].)
Die Korrelationen verschiedener Gitterlängen werden auf die Werte der "semi-infiniten" Quantenkette extrapoliert, d.h. ein Ende der Kette bleibt bei der Extrapolation der Werte fest. Aus diesen Werten können im Fall $q = \exp(\frac{i\pi 3}{5})$ die kritischen Exponenten für *bulk*- und *surface*-Verhalten bestimmt werden, ebenso der *bulk*-Exponent für $q = \exp(\frac{i\pi}{4})$, wo das Ergebnis allerdings bereits analytisch bekannt ist. Die Vermutung über den Kontinuumslimes der Zweipunktoperatoren wird bestätigt. Im Fall $q = \exp(\frac{i\pi}{6})$ dominieren hingegen Gittereffekte das Verhalten der Korrelationsfunktionen.

Diese Arbeit ist in folgender Weise aufgebaut. Im folgenden Kapitel werden die skalaren Zweipunktoperatoren definiert und Resultate aus [1] zusammengestellt. Die $U_qSU(2)$ symmetrische Darstellung von $T_N(q)$ sowie für diese Arbeit relevante Eigenschaften von $U_qSU(2)$ und die Darstellung der Zweipunktoperatoren als skalare $U_qSU(2)$ Tensoroperatoren werden in Abschnitt 2.1 diskutiert, die Darstellung des Hamiltonoperators als Ising- und Pottsmodell in Abschnitt 2.2. Die graphischen Darstellungen von $T_N(q)$ und die Reduktion des Zustandsraums zur Berechnung der Korrelationsfunktionen werden in Kapitel 3 erläutert. In Kapitel 4 werden einige Eigenschaften von Hamiltonoperator und Zweipunktoperatoren zusammengestellt bzw. bewiesen. Insbesondere wird gezeigt, wie sich aus einer Symmetrie der Zweipunktoperatoren ableiten läßt, daß die zugehörigen konformen Operatoren Produkte von

Feldern mit konformen Dimensionen $(h,\bar{h}) = (\frac{m-1}{m+1},0)$ und $(0,\frac{m-1}{m+1})$ sind (Abschnitt 4.3). Kapitel 5 enthält eine Beschreibung der verwendeten numerischen Methoden und eine Fehlerabschätzung für die Resultate. Die Ergebnisse der Rechnungen werden in Abschnitt 6 nacheinander für die Fälle $q = \exp(\frac{\mathrm{i}\pi}{4})$, $q = \exp(\frac{\mathrm{i}\pi}{6})$ und $q = \exp(\frac{\mathrm{i}\pi 3}{5})$ analysiert und verglichen. Die numerischen Daten selbst für diese Fälle sowie für $q = \exp(\frac{\mathrm{i}\pi}{5})$ und $q = \exp(\frac{\mathrm{i}\pi}{7})$ finden sich in einem Anhang. In Kapitel 7 werden die erzielten Ergebnisse zusammengefaßt. Es enthält daneben Anmerkungen über die Korrelationsfunktionen für weitere Einheitswurzeln $q$.

## 2. Skalare Zweipunktoperatoren

In diesem Kapitel werden die skalaren Zweipunktoperatoren $g_{k,l}$ als spezielle Elemente der Temperley-Lieb-Algebra definiert. Ihre Darstellung durch die in der Einleitung angegebenen Matrizen (1.5) auf dem Konfigurationsraum einer Spin-$\frac{1}{2}$ Quantenkette ergibt skalare $U_qSU(2)$ Tensoroperatoren. In dieser Darstellung ist $g_{k,l}$ gegeben durch die skalare Kombination zweier Tensoroperatoren, die sich jeweils gemäß der irreduziblen dreidimensionalen $q$-Spin 1 Darstellung von $U_qSU(2)$ transformieren [1, 36]. Diese Tensoroperatoren lassen sich definieren, da $U_qSU(2)$ quasitriangulär ist. Sie verallgemeinern den $SU(2)$ skalaren Operator

$$g_{k,l}^{(q=1)} = -\frac{1}{2}\vec{\sigma}_k \cdot \vec{\sigma}_l \ . \tag{2.1}$$

Im Abschnitt 2.1 werden Eigenschaften der Quantengruppe $U_qSU(2)$ und ihrer Darstellungen zusammengestellt Die Konstruktion der Zweipunktoperatoren als $U_qSU(2)$ Tensoroperatoren wird am Ende des Abschnitts 2.1 genauer erläutert.
Für die speziellen Werte $q = \exp(\frac{i\pi}{m+1})$ mit $m = 2, 3$ und 5 können Quotienten der Temperley-Lieb-Algebra angegeben werden, die es erlauben, analytische Resultate für die skalaren Zweipunktfunktionen zu erzielen [1]. Diese Ergebnisse werden in Abschnitt 2.2 zusammengefaßt.

In [1] wird gezeigt, daß sich die Zweipunktoperatoren $g_{k,l}$ rekursiv durch Generatoren $e_i$ der Temperley-Lieb-Algebra ausdrücken lassen:

$$\begin{aligned}
g_{k,k+1} \equiv g_k &= e_k - (q+q^{-1})^{-1} && 1 \le k \le N-1 \\
g_{k,l} &= -q\, g_{k,n}\, g_{n,l} - q^{-1}\, g_{n,l}\, g_{k,n} && 1 \le k < n < l \le N \\
g_{l,k} &= q^{-4}\, g_{k,l} && 1 \le k < l \le N.
\end{aligned} \tag{2.2}$$

Für diese Arbeit ist es wichtig, daß man die Zweipunktoperatoren $g_{k,l}$, ebenso wie den Hamiltonoperator (1.1), als Elemente von $T_N(q)$ angeben kann.
Die Operatoren $g_{k,l}$ sind nicht lokal, sondern Linearkombinationen von Produkten aus den Faktoren $e_i$, $k \le i < l$. Die rekursive Zerlegung der $g_{k,l}$ ist unabhängig von der Wahl der jeweiligen $n$, $k < n < l$, was man leicht mit Hilfe der Temperley-Lieb-Relation (1.4) zeigen kann. Vertauscht man in der Definition (1.5) $q$ und $q^{-1}$, so kann man eine weitere Menge von Zweipunktoperatoren definieren [1], die jedoch die gleichen Erwartungswerte haben (vgl. Abschnitt 4.2), so daß sie hier nicht weiter betrachtet werden.

### *2.1. $U_qSU(2)$ symmetrische Darstellung der Temperley-Lieb-Algebra*

Mit der Darstellung (1.5) der Temperley-Lieb-Algebra auf $(\mathbb{C}^2)^{\otimes N}$, d.h.

$$e_i = \mathrm{id}_1 \otimes \cdots \otimes \mathrm{id}_{i-1} \otimes \begin{pmatrix} 0 & & & \\ & q^{-1} & -1 & \\ & -1 & q & \\ & & & 0 \end{pmatrix}_{i,i+1} \otimes \mathrm{id}_{i+2} \otimes \cdots \otimes \mathrm{id}_N \ , \tag{2.3}$$

wird der Hamiltonoperator $H$ zu einer $XXZ$-Quantenspinkette mit Randtermen [2]. Diese bewirken eine Symmetrie von $H$ unter der Quantengruppe $U_qSU(2)$.

Eine Quantengruppe ist eine Deformation der universellen einhüllenden Algebra einer Lie-Algebra, in diesem Fall eine einparametrige Deformation von $U\,SL(2)$. Elemente von $U_qSU(2)$ kommutieren in einer entsprechenden Darstellung auf $(\mathbb{C}^2)^{\otimes N}$ mit dem Hamiltonoperator. Die Eigenräume zu einem Eigenwert seines Spektrums bilden also jeweils einen Darstellungsraum für $U_qSU(2)$.
Es soll darauf hingewiesen werden, daß $H(q)$ durch unitäre Transformation mit $U = \prod_{l\,ungerade} \sigma_l^z$ und anschließende Umnumerierung der Gitterplätze von links nach rechts ähnlich zu $-H(-q^{-1})$ ist.

*Definition der quasitriangulären Hopf-Algebra $U_qSU(2)$*

Im folgenden werden zunächst einige Eigenschaften von $U_qSU(2)$ zusammengestellt, und es wird gezeigt, daß für eine Darstellung auf $(\mathbb{C}^2)^{\otimes N}$ die Temperley-Lieb-Algebra in der Darstellung (1.5) in der Kommutante von $U_qSU(2)$ enthalten ist.
$U_qSU(2)$ ist die komplexe assoziative Algebra mit Eins, die von Generatoren $S^\pm$ und $K^{\pm 1} \equiv q^{\pm S^0}$ mit den Relationen

$$\begin{aligned} K^{+1}K^{-1} &= K^{-1}K^{+1} = 1 \\ K^{+1}S^\pm K^{-1} &= q^{\pm 1}S^\pm \\ [S^+, S^-] &= \frac{K^2 - K^{-2}}{q - q^{-1}} \end{aligned} \tag{2.4}$$

erzeugt wird. Der Grenzfall $q = 1$ führt auf die Generatorrelationen von $SL(2)$.
Man kann $U_qSU(2)$ mit der Struktur einer Hopf-Algebra [39, 40] versehen, gegeben durch die Definition der linearen Abbildungen Koprodukt $\Delta$, Koidentität $\epsilon$ und Antipodenabbildung $\eta$:

$$\begin{aligned} \Delta : &U_qSU(2) \to U_qSU(2) \otimes U_qSU(2) \\ &S^\pm \mapsto S^\pm \otimes K^{-1} + K \otimes S^\pm \\ &(K^{\pm 1}) \mapsto K^{\pm 1} \otimes K^{\pm 1} \end{aligned} \tag{2.5}$$

$$\begin{aligned} \epsilon : \; &U_qSU(2) \to \mathbb{C} \\ &S^\pm \mapsto 0 \\ &K^{\pm 1} \mapsto 1 \end{aligned} \tag{2.6}$$

$$\begin{aligned} \eta : \; &U_qSU(2) \to U_qSU(2) \\ &S^\pm \mapsto -q^{\mp 1}S^\pm \\ &K^{\pm 1} \mapsto K^{\mp 1} \end{aligned} \tag{2.7}$$

Die Abbildungen $\Delta$ und $\epsilon$ sind Algebra-Homomorphismen und ergeben eine Koalgebra-Struktur für $U_qSU(2)$, d.h.

$$(\mathrm{id} \otimes \Delta) \circ \Delta = (\Delta \otimes id) \circ \Delta \qquad \text{Koassoziativität} \tag{2.8}$$

$$(\epsilon \otimes \mathrm{id}) \circ \Delta = \mathrm{id} = (\mathrm{id} \otimes \epsilon) \circ \Delta \qquad \text{Existenz der Koidentität.} \tag{2.9}$$

Die Antipode $\eta$ erfüllt

$$(\eta \otimes \mathrm{id})\Delta = \eta\epsilon = (\mathrm{id} \otimes \eta)\Delta \tag{2.10}$$

und ist ein Algebra-Antihomomorphismus.
Für eine allgemeine Hopf-Algebra $A$ kann man das Koprodukt $\Delta$ von $h \in A$ als

$$\Delta(h) = \sum_r h_r^1 \otimes h_r^2 \tag{2.11}$$

schreiben. Die adjungierte Darstellung der Hopf-Algebra auf sich selbst wird damit durch

$$ad(h)h' = \sum_r h_r^1\, h'\, \eta(h_r^2) \tag{2.12}$$

definiert. Für $q = 1$ ist $\Delta(h) = h \otimes 1 + 1 \otimes h$ und $S(h) = -h$ für $h \in SU(2)$. Man findet daher die bekannte Definition der adjungierten Darstellung für die Lie-Algebra $SU(2)$.
Die Hopf-Algebra $U_qSU(2)$ ist quasitriangulär, d.h. sie besitzt eine universelle $R$-Matrix.
Eine universelle $R$-Matrix einer Hopf-Algebra $A$ ist ein Element aus $A \otimes A$. Bezeichnet $P$ den Automorphismus

$$P\ :\ A \otimes A \to A \otimes A\ :\ h \otimes h' \mapsto h' \otimes h \tag{2.13}$$

so ist sie definiert durch

$$P\Delta(h) = R\Delta(h)R^{-1} \qquad \text{für alle } h \in A \tag{2.14}$$

$$(\Delta \otimes \mathrm{id})(R) = R_{13}R_{23} \tag{2.15}$$

$$(\mathrm{id} \otimes \Delta)(R) = R_{13}R_{12}\ \ . \tag{2.16}$$

Für $U_qSU(2)$ kann sie explizit angegeben werden [41]. Die $R$-Matrix beschreibt also einen Zusammenhang zwischen rechts und links im Bild von $\Delta$.
Für zwei $A$-Module $W$ und $W'$ definiert

$$(h)_{W\otimes W'} = \sum_r (h_r^1)_W \otimes (h_r^2)_{W'} \tag{2.17}$$

eine Darstellung auf $W \otimes W'$. Hierbei bezeichnet $(h)_V$ die Darstellung eines Elements $h \in A$ als lineare Abbildung auf dem Darstellungsraum $V$. Unter Verwendung von $R$ kann man einen $A$-Modul-Isomorphismus definieren

$$\begin{aligned} \psi : W \otimes W' &\to W' \otimes W \\ x \otimes y &\mapsto (R_{21})_{W'\otimes W}\,(y \otimes x)\ , \end{aligned} \tag{2.18}$$

der die Asymmetrie des Koprodukts "kontrolliert". Ein $A$-Modul-Homomorphismus ist dabei eine lineare Abbildung eines $A$-Moduls $V$ in einen $A$-Modul $W$, die

$$\begin{aligned} f : V &\to W \\ f\,(h)_V &= (h)_W\, f \qquad \text{für alle } h \in A \end{aligned} \tag{2.19}$$

erfüllt.

*Irreduzible Darstellungen von $U_qSU(2)$*

Für generische Werte von $q$ (d.h. keine Einheitswurzeln) existieren die endlich dimensionalen irreduziblen Darstellungen von $U_qSU(2)$ analog zum $SU(2)$ Fall [2]. Ihre Zustände können also durch einen ganz- oder halbbzahligen q-Spin $j$ und eine magnetische Quantenzahl $-j \leq m \leq j$ beschrieben werden. Die Aktion von $U_q SU(2)$ auf den Basisvektoren $|j\,m\rangle$ einer irreduziblen Darstellung $\rho_j$ ist durch

$$\begin{aligned} S^{\pm}\,|j\,m\rangle &= \sqrt{[j \mp m]_q [j \pm m + 1]_q}\,|j\,m \pm 1\rangle \\ S^0\,|j\,m\rangle &= m|j\,m\rangle \end{aligned} \tag{2.20}$$

gegeben, wobei

$$[x]_q = \frac{q^x - q^{-x}}{q - q^{-1}} \tag{2.21}$$

die $q$-Zahl bezeichnet. Der Casimiroperator von $U_q SU(2)$ ist

$$C = S^- S^+ + [S^0 + \tfrac{1}{2}]_q{}^2 - [\tfrac{1}{2}]_q{}^2 , \tag{2.22}$$

und hat auf dem Darstellungsraum $\rho_j$ den Eigenwert $[j+\frac{1}{2}]_q^2 - [\frac{1}{2}]_q^2$. Der Vektorraum $\rho_j$ hat die Dimension $2j+1$. Die $q$-Dimension eines allgemeinen Darstellungsraums $\rho$ wird als

$$\dim_q \rho = \mathrm{tr}_\rho(q^{-2S^0}) \tag{2.23}$$

definiert, und es gilt für $\rho_j$

$$\dim_q \rho_j = [2j+1]_q . \tag{2.24}$$

Für Einheitswurzeln $q = \exp(\frac{\mathrm{i}\pi r}{s})$ (mit teilerfremden ganzen Zahlen $s$ und $r$) sind die Ergebnisse der Darstellungstheorie von $U_q SU(2)$ nicht mehr analog zu denen für $SU(2)$. Es existieren zwei Arten von Darstellungen. Sogenannte Typ-I Darstellungen [2] haben eine positive oder negative $q$-Dimension und besitzen dieselbe Struktur wie $\rho_j$ im generischen Fall, wobei aber die möglichen $q$-Spins auf $j \leq \frac{r}{2} - 1$ begrenzt sind. Für $s = 1$ haben alle Typ-I Darstellungen positive $q$-Dimension. Darstellungsräume mit verschwindender $q$-Dimension werden als Typ-II Darstellungen bezeichnet. Für $q$-Spin $j = (nr-1)/2$ (mit ganzen Zahlen $n$) sind sie irreduzibel, ansonsten reduzibel, aber nicht vollständig zerlegbar. Letztere Darstellungsräume können als eine Mischung zweier irreduzibler Darstellungsräume $\rho_j$ und $\rho'_j$ des generischen Falls beschrieben werden, deren Casimir-Eigenwerte beim Übergang von $q$ zu einer Einheitswurzel zusammenfallen [2]. In diesem Fall verschwindet die Summe der $q$-Dimensionen von $\rho_j$ und $\rho'_j$.

*Darstellung von $U_q SU(2)$ auf $(\mathbb{C}^2)^{\otimes N}$*

Zur Definition $U_q SU(2)$ symmetrischer Quantenspinketten wird eine konkrete Matrix-Darstellung verwendet: Auf $\mathbb{C}^2$ läßt sich $U_q SU(2)$ wie $SU(2)$ darstellen [2]

$$(S^{\pm})_{\mathbb{C}^2} = \sigma^{\pm} = \frac{1}{2}(\sigma^x \pm \mathrm{i}\sigma^y) \qquad (S^0)_{\mathbb{C}^2} = \frac{1}{2}\sigma^z . \tag{2.25}$$

Hieraus erhält man mit dem Koprodukt die Darstellung

$$\begin{aligned} (S^{\pm})_{\mathbb{C}^{2\otimes N}} &= \sum_{i=1}^{N} q_1^{\sigma^z/2} \otimes \cdots q_{i-1}^{\sigma^z/2} \otimes \sigma^{\pm}{}_i \otimes q_{i+1}^{-\sigma^z/2} \otimes \cdots \otimes q_N^{-\sigma^z/2} \\ (q^{S^0})_{\mathbb{C}^{2\otimes N}} &= q_1^{\sigma^z/2} \otimes \cdots \otimes q_N^{\sigma^z/2} \end{aligned} \tag{2.26}$$

auf dem Konfigurationsraum $(\mathbb{C}^2)^{\otimes N}$ einer $q$-Spin-$\frac{1}{2}$ Quantenkette mit $N$ Gitterplätzen. Speziell für $N = 2$ kann man so $\mathbb{C}^4$ vollständig reduzieren (außer für komplexes $q$ mit $q^4 = 1$) und findet die Darstellungen $\rho_1$ mit

$$\begin{aligned} |1\,1\rangle &= |\tfrac{1}{2}\,\tfrac{1}{2}\rangle \otimes |\tfrac{1}{2}\,\tfrac{1}{2}\rangle \\ |1\,0\rangle &= (q+q^{-1})^{-\frac{1}{2}} \left( q^{\frac{1}{2}}\, |\tfrac{1}{2}\,\tfrac{1}{2}\rangle \otimes |\tfrac{1}{2}\,-\tfrac{1}{2}\rangle + q^{-\frac{1}{2}} |\tfrac{1}{2}\,-\tfrac{1}{2}\rangle \otimes |\tfrac{1}{2}\,\tfrac{1}{2}\rangle \right) \\ |1\,-1\rangle &= |\tfrac{1}{2}\,-\tfrac{1}{2}\rangle\rangle \otimes |\tfrac{1}{2}\,-\tfrac{1}{2}\rangle\rangle \end{aligned} \tag{2.27}$$

und $\rho_0$ mit

$$|0\,0\rangle = (q+q^{-1})^{-\frac{1}{2}} \left( q^{-\frac{1}{2}}\, |\tfrac{1}{2}\,\tfrac{1}{2}\rangle \otimes |\tfrac{1}{2}\,-\tfrac{1}{2}\rangle - q^{\frac{1}{2}} |\tfrac{1}{2}\,-\tfrac{1}{2}\rangle \otimes |\tfrac{1}{2}\,\tfrac{1}{2}\rangle \right) \ . \tag{2.28}$$

Hieraus liest man ab, daß die Generatoren $e_i$ der Temperley-Lieb-Algebra in der Darstellung (1.5) proportional sind zum Projektor $P_0$ auf die skalare Kombination der beiden $q$-Spins der Gitterplätze $i$ und $i+1$:

$$e_i = [2]_q P_0 \tag{2.29}$$

Damit kommutieren die $e_i$ mit $U_qSU(2)$ in der Darstellung auf $(\mathbb{C}^2)^{\otimes N}$. (In [38] wird gezeigt, daß die Generatoren $e_i$ für diese Darstellung sogar die Kommutante von $U_qSU(2)$ aufspannen.) Der Hamiltonoperator und die Zweipunktoperatoren $g_{k,l}$ sind also $U_qSU(2)$ symmetrisch. Damit sind die $q$-Dimension des Darstellungsraums und die magnetische Quantenzahl $m$ gute Quantenzahlen für die Eigenzustände von $H$.

*Zweipunktoperatoren als $U_qSU(2)$ Tensoroperatoren*

Die Existenz einer universellen $R$ Matrix für eine Hopf-Algebra $A$ ermöglicht es aufgrund des Isomorphismus (2.18), trotz des i.a. nicht kokommutativen Koprodukts $\Delta$, ein Tensorprodukt von Tensoroperatoren zu definieren [36, 42]. Ein Tensoroperator $T$ ist dabei als ein $A$-Modul-Homomorphismus

$$T : V \to L(W, W) \tag{2.30}$$

definiert, der ein Modul $V$ abbildet in den Modul der linearen Abbildungen $L(W, W)$ eines Moduls $W$ in sich selbst. Dabei wird die Hopf-Algebra $A$ auf $L(W, W)$ durch

$$(h)_{L(W,W)}(f) = \sum_r (h_r^1)_W \circ f \circ (\eta(h_r^2))_W \tag{2.31}$$

für $f \in L(W, W)$ und $h \in A$ dargestellt.
Mit der Abbildung (2.18) läßt sich ein Tensorprodukt zweier Tensoroperatoren

$$t : V \to L(W, W) \qquad t' : V' \to L(V', V') \tag{2.32}$$

definieren: Man kann zeigen [36], daß

$$\begin{aligned} T : V \otimes V' &\to L(W \otimes W', W \otimes W') \\ x \otimes x' &\mapsto (t(x) \otimes id_{W'}) \circ \Psi^{-1} \circ (id_W \otimes t'(x)) \circ \Psi \end{aligned} \tag{2.33}$$

einen Tensoroperator definiert.

Das (gewöhnliche) Produkt zweier Tensoroperatoren (2.32), definiert durch

$$\begin{aligned} tt' : V \otimes V' &\to L(W,W) \\ x \otimes x' &\mapsto t(x) \circ t(x') \ , \end{aligned} \tag{2.34}$$

ist ebenfalls ein Tensoroperator, der sich gemäß der Darstellung der Hopf-Algebra auf $V \otimes V'$ transformiert [36].
Speziell können $U_qSU(2)$ Tensoroperatoren, die sich gemäß der $q$-Spin 1 Vektordarstellung transformieren, hergeleitet, und das Tensorprodukt zweier solcher Operatoren kann angegeben werden [1, 36]. Betrachtet man die skalare Kombination der beiden Vektor-Tensoroperatoren und benutzt man die Darstellung von $U_qSU(2)$ auf $(\mathbb{C}^2)^{\otimes N}$, so erhält man gerade die Zweipunktoperatoren $g_{k,l}$ (2.2) in der Darstellung (1.5) für die Temperley-Lieb-Generatoren. Dies soll nun näher erläutert werden.
Durch die Elemente $t^m \in U_qSU(2)$, $m = -1,\, 0,\, 1$

$$\begin{aligned} t^1 &= -\, K^{-1}\, S^+ \\ t^0 &= 2^{-\frac{1}{2}}\, (qS^+S^- \,-\, q^{-1}S^-S^+) \\ t^{-1} &= K^{-1}S^- \end{aligned} \tag{2.35}$$

sind $U_qSU(2)$ Vektoroperatoren gegeben; bezüglich der adjungierten Darstellung von $U_qSU(2)$ transformieren sie sich wie die Vektoren $|1\, m\rangle$ der irreduziblen $U_qSU(2)$ Darstellung $\rho_1$. Das heißt, die Abbildung

$$\begin{aligned} F : \rho_1 \quad &\to \mathrm{span}\{t^0, t^1, t^{-1}\} \\ |1\, m\rangle &\mapsto t^m \end{aligned} \tag{2.36}$$

ist ein $U_qSU(2)$-Modul-Homomorphismus bezuglich der Darstellung (2.20) auf $\rho_j$ und der adjungierten Darstellung (2.12) auf $\mathrm{span}\{t^0, t^1, t^{-1}\}$. Die Darstellung von $t^m$ auf $\mathbb{C}^2$ (2.25) ergibt

$$\begin{aligned} (t^{\pm 1})_{\mathbb{C}^2} &= \mp\, q^{\mp\frac{1}{2}}\sigma^{\pm} \\ (t^0)_{\mathbb{C}^2} &= \frac{1}{2}(q+q^{-1})^{-\frac{1}{2}} \left( q - q^{-1} + (q+q^{-1})\, \sigma^z \right) \ . \end{aligned} \tag{2.37}$$

Man erhält also einen Tensoroperator

$$\begin{aligned} T : \rho_1 &\to L(\mathbb{C}^2, \mathbb{C}^2) \\ |1\, m\rangle &\mapsto (t^m)_{\mathbb{C}^2} \ . \end{aligned} \tag{2.38}$$

Mit

$$\begin{array}{lll} V = \mathbb{C} & V' = \rho_1 & V'' = \mathbb{C} \\ W = (\mathbb{C}^2)^{\otimes (j-1)} & W' = \mathbb{C}^2 & W'' = (\mathbb{C}^2)^{\otimes (N-j)} \end{array}$$

kann man hieraus durch (zweifache) Anwendung von (2.33) einen Tensoroperator $T_j$ vom Typ $\rho_1$ für den Konfigurationsraum der Quantenspinkette formulieren, der dem Gitterplatz $j$ "zugeordnet" ist [42]

$$T_j : \rho_1 \to L\left( (\mathbb{C}^2)^{\otimes N}, (\mathbb{C}^2)^{\otimes N} \right) \tag{2.39}$$

$$
\begin{aligned}
|1\,1\rangle \quad &\mapsto t_j^1 &&= -q^{-\frac{1}{2}}\,(K_{j-1}^+)^2\sigma_j^+ + (q^{-1}-q^{-2}) \\
& && \quad \times \left[\frac{1}{2}\,K_{j-1}^+\,S_{j-1}^+\,\left(q-q^{-1}+(q+q^{-1})\,\sigma_j^z\right) + q^{\frac{1}{2}}(q-q^{-1})\,(S_{j-1}^+)^2\,\sigma_j^-\right] \\
|1\,0\rangle \quad &\mapsto t_j^0 &&= \frac{1}{2}(q+q^{-1})^{-\frac{1}{2}}\left(q-q^{-1}+(q+q^{-1})\,\sigma_j^z\right) \\
& && \quad + q^{\frac{1}{2}}(q-q^{-1})(q+q^{-1})^{\frac{1}{2}}\,K_{j-1}^-\,S_{j-1}^+\,\sigma_j^- \\
|1\ -1\rangle &\mapsto t_j^{-1} &&= q^{\frac{1}{2}}\,(K_{j-1}^-)^2\,\sigma_j^- \quad .
\end{aligned}
$$

Hierbei wurden die Definitionen

$$
\begin{aligned}
K_{m,n}^{\pm} &= \prod_{i=m}^{n} q^{\pm\sigma_i^z} \qquad K_n^{\pm} \equiv K_{1,n}^{\pm} \\
S_m^+ &= \sum_{i=1}^{j-1} K_{1,i-1}^+\,\sigma_i^+\,K_{i+1,N}^-
\end{aligned}
$$

benutzt.

Betrachtet man das Produkt (2.34) zweier solcher Tensoroperatoren $T_k$ und $T_l$, so erhält man einen Tensoroperator auf $(\mathbb{C}^2)^{\otimes N}$, der sich wie das Tensorprodukt zweier $q$-Spin 1 Darstellungen transformiert. Insbesondere kann man mittels $U_qSU(2)$ Clebsch-Gordan Zerlegung die skalare Kombination dieser Operatoren bilden (da $T_N(q)$ in der Darstellung (1.5) die Kommutante von $U_qSU(2)$ in der Darstellung (2.1) bildet, muß diese skalare Kombination ein Element von $T_N(q)$ sein) und findet, daß sie mit dem durch (2.2) gegebenen Operator $g_{k,l}$ in der Darstellung (1.5) identisch ist:

$$
g_{k,l} = q^{-2}(q^{-1}\,t_k^{+1}t_l^{-1} + q\,t_k^{-1}t_l^{+1} - t_k^0 t_l^0)\ . \tag{2.40}
$$

Auf diese Weise wurden in [1] die skalaren Zweipunktoperatoren eingeführt.

### *2.2. Darstellungen von Quotienten der Temperley-Lieb-Algebra für spezielle Einheitswurzeln*

Im letzten Abschnitt wurde die Darstellung des Hamiltonoperators als $XXZ$ Spin-$\frac{1}{2}$ Heisenbergkette und die zugehörigen $U_qSU(2)$ skalaren Zweipunktoperatoren behandelt, wobei der Parameter $q$ beliebig gewählt werden kann. Für eine Einheitswurzel $q = \exp(\frac{\mathrm{i}\pi}{m+1})$ können Quotienten der Temperley-Lieb-Algebra [43] dazu benutzt werden, den allgemeinen Hamiltonoperator $H$ als weitere spezielle Quantenspinkette zu formulieren. In diesem Abschnitt werden die analytischen Ergebnisse für $m = 2, 3$ und 5 zusammengestellt, die man erhält, wenn man für Hamiltonoperator und Zweipunktoperatoren eine entsprechende Quotientendarstellung der Temperley-Lieb-Algebra benutzt [1]. Hierfür ist entscheidend, daß die Berechnung der Korrelationsfunktionen nur unter Benutzung der definierenden Relationen der Temperley-Lieb-Algebra (unabhängig von einer Quotientenrelation) erfolgen kann (vgl. Abschnitt 3.2).

$q = \exp(\frac{\mathrm{i}\pi}{3})$

Für $m = 2$ ist $q+q^{-1} = 1$, und die Temperley-Lieb-Algebra hat den trivialen Quotienten $e_i = 1$. Damit ist $g_{i,i+1} = 0$. Mit der Rekursionsbeziehung (2.2) verschwinden auch alle weiteren $g_{k,l}$ und damit die Korrelationsfunktionen (unabhängig von einer speziellen Darstellung).

$q = \exp(\frac{i\pi}{4})$ *(Isingmodell)*

Für den Fall $m = 3$ kann man aufgrund der Formel (1.7) für die zentrale Ladung einen Zusammenhang zum Isingmodell mit $c = \frac{1}{2}$ erwarten, der im folgenden beschrieben wird. Für $m = 3$ hat die Temperley-Lieb-Algebra einen Quotienten, der durch die Relation

$$\sqrt{2}(e_i + e_{i+1}) - e_i e_{i+1} - e_{i+1} e_i = 1 \tag{2.41}$$

gegeben ist. Definiert man Generatoren von $T_N(q)$ durch

$$\begin{aligned} e_{2i} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(1 + \sigma_i^x \sigma_{i+1}^x) \\ e_{2i-1} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(1 + \sigma_i^z)\ , \end{aligned} \tag{2.42}$$

so wird dieser Quotient erfüllt, und der Hamiltonoperator $H$ beschreibt in dieser Darstellung eine Isingquantenkette mit freien Randbedingungen und $L = N/2$ Gitterplätzen:

$$H = -\frac{1}{\sqrt{2}} \left( \sum_{i=1}^{L-1} \sigma_i^x \sigma_{i+1}^x + \sum_{i=1}^{L} \sigma_j^z \right) - \frac{2L-1}{\sqrt{2}}\ . \tag{2.43}$$

In derselben Darstellung können die Zweipunktoperatoren als Produkte von fermionischen Operatoren geschrieben werden, wobei je ein Operator zu den geraden bzw. ungeraden Gitterplätzen der ursprünglichen Quantenkette $H$ mit $N = 2L$ Gitterplätzen gehört:

$$\begin{aligned} g_{2j,2k} &= \frac{i}{\sqrt{2}} \tau_j^y \tau_k^y \\ g_{2j-1,2k-1} &= \frac{i}{\sqrt{2}} \tau_j^x \tau_k^x \\ g_{2j,2k-1} &= -\frac{i}{\sqrt{2}} \tau_j^y \tau_k^x \\ g_{2j-1,2k} &= -\frac{i}{\sqrt{2}} \tau_j^x \tau_k^y\ , \end{aligned} \tag{2.44}$$

mit

$$\tau_j^x = \Big( \prod_{i=1}^{j-1} \sigma_i^z \Big) \sigma_j^x\ , \qquad \tau_j^y = \Big( \prod_{i=1}^{j-1} \sigma_i^z \Big) \sigma_j^y\ . \tag{2.45}$$

Diese Operatoren erfüllen

$$\{\tau_k^x, \tau_j^x\} = 2\,\delta_{k,j} \qquad \{\tau_k^y, \tau_j^y\} = 2\,\delta_{k,j} \tag{2.46}$$

$$\{\tau_k^x, \tau_j^y\} = 0\,. \tag{2.47}$$

Die Erwartungswerte des Grundzustands $\langle g_{k,l}\rangle_N$ können dann berechnet werden, und man erhält [1]

$$\begin{aligned}
\langle g_{2j,2k}\rangle_N &= \langle g_{2j-1,2k-1}\rangle_N = 0 \\
\langle g_{2j,2k-1}\rangle_N &= -\frac{2\sqrt{2}}{2L+1}\sum_{n=0}^{L-1}\sin\Big(\pi\frac{2n+1}{2L+1}j\Big)\,\cos\Big(\pi\frac{2n+1}{2L+1}(k-\frac{1}{2})\Big) \\
\langle g_{2j-1,2k}\rangle_N &= \frac{2\sqrt{2}}{2L+1}\sum_{n=0}^{L-1}\sin\Big(\pi\frac{2n+1}{2L+1}k\Big)\,\cos\Big(\pi\frac{2n+1}{2L+1}(j-\frac{1}{2})\Big)\ ,
\end{aligned} \tag{2.48}$$

woraus sich im Grenzfall $L\to\infty$

$$\begin{aligned}
\langle g_{k,l}\rangle_\infty &= \frac{\sqrt{2}}{\pi}\Big(\frac{1}{l-k}-\frac{1}{l+k}\Big) && k \text{ gerade, } l \text{ ungerade} \\
\langle g_{k,l}\rangle_\infty &= \frac{\sqrt{2}}{\pi}\Big(\frac{1}{l-k}+\frac{1}{l+k}\Big) && k \text{ ungerade, } l \text{ gerade}
\end{aligned} \tag{2.49}$$

ergeben.
Dies impliziert, daß zwei verschiedene nicht verschwindende Korrelationsfunktionen existieren, und bei der Definition eines Kontinuumslimes für die Korrelationsfunktionen zwischen geraden und ungeraden Gitterplätzen unterschieden werden muß. Das Verschwinden der Korrelationen $\langle g_{k,k+2n}\rangle$ kann auch mit Hilfe der regulären Darstellung auf Liniendiagrammen (3.2) gezeigt werden [1]. Die Resultate (2.48) und (2.49) werden in dieser Arbeit dazu benutzt, Fehler der numerischen Berechnungen und Extrapolationen abzuschätzen.

$q=\exp(\frac{i\pi}{6})$ *(Pottsmodell)*

Für $m=5$ existiert ein anderer Quotient der Temperley-Lieb-Algebra, der durch die Definitionen

$$\begin{aligned}
e_{2j} &= (1+\Gamma_j\Gamma_{j+1}^\dagger+\Gamma_j^\dagger\Gamma_{j+1})/\sqrt{3} \\
e_{2j-1} &= (1+\sigma_j+\sigma_j^\dagger)
\end{aligned} \tag{2.50}$$

mit

$$\Gamma=\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1\\ 1 & 0 & 0\\ 0 & 1 & 0\end{pmatrix} \qquad \sigma=\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0\\ 0 & \exp\left(\frac{i\pi 2}{3}\right) & 0\\ 0 & 0 & \exp\left(\frac{i\pi 4}{3}\right)\end{pmatrix}$$

realisiert wird. Hiermit erhält man für den Hamiltonoperator ein selbstduales 3-Zustands-Pottsmodell mit freien Randbedingungen:

$$H=-\frac{1}{\sqrt{3}}\left(\sum_{i=1}^{L-1}(\Gamma_i\Gamma_{i+1}^\dagger+\Gamma_i^\dagger\Gamma_{i+1})+\sum_{i=1}^{L}(\sigma_i+\sigma_i^\dagger)\right)-\frac{2L-1}{\sqrt{3}}\qquad L=\frac{N}{2} \tag{2.51}$$

Die Operatoren $g_{k,l}$ können in dieser Darstellung durch das Produkt zweier verschiedener parafermionischer Operatoren ausgedrückt werden, die den geraden bzw. ungeraden

Gitterplätzen des Ausgangsmodells $H$ entsprechen. Diese parafermionischen Operatoren sind bereits aus [44] bekannt. Im Gegensatz zum Ising-Quotienten für $m = 3$ wurde auf diese Weise jedoch keine analytische Lösung für die Korrelationsfunktionen gefunden. Explizit werden die parafermionischen Operatoren auf dem Gitter in [1] angegeben.

## 3. Zwei graphische Darstellungen der Temperley-Lieb-Algebra zur Berechnung der Korrelationsfunktionen

Für die numerischen Berechnungen werden zwei verschiedene graphische Darstellungen der Temperley-Lieb-Algebra verwendet. Im folgenden werden sie definiert, und es wird erklärt, wie sie zur Berechnung von Korrelationsfunktionen verwendet werden können. Diese beiden Darstellungen von $T_N(q)$ auf einem Pfadraum [5, 38, 45] bzw. auf Liniendiagrammen [1, 38] haben den Vorteil, daß sie nicht auf einem Spin-Konfigurationsraum operieren, sondern es auf einfache Weise ermöglichen, den Darstellungsraum jeweils auf einen Unterraum einzuschränken, der den Grundzustand enthält. Für die Pfadraumdarstellung entspricht dieser Raum den eindimensionalen $U_qSU(2)$ Darstellungen im Fall der Realisierung als $XXZ$ Spin-$\frac{1}{2}$ Kette und enthält demnach den (nichtentarteten) Grundzustand. Bei der Darstellung auf Liniendiagrammen wird der Raum betrachtet, der den $U_qSU(2)$ Skalaren für generisches $q$ entspricht.

### *3.1. Darstellung auf einem Pfadraum*

Betrachten wir zunächst generische Werte von $q$. Eine Temperley-Lieb-Algebra mit $N-1$ Generatoren kann dann auf einem Vektorraum dargestellt werden, der von Vektoren $\vec{v}_k$ mit einem Multiindex $k = (k_0, k_1, \ldots, k_N)$ aufgespannt wird, wobei die $N+1$ Zahlen $k_i$ die folgenden Bedingungen erfüllen:

$$\begin{aligned} k_i &\geq 0 \\ k_0 &= \ 0 \\ k_i &= k_{i-1} \pm 1/2 \qquad\qquad i = 1, \ldots, N \ . \end{aligned} \tag{3.1}$$

Auf diesem Vektorraum definiert man die Darstellung eines Generators $e_i$ der Temperley-Lieb-Algebra als [5, 38]

$$e_i \, \vec{v}_k = \delta_{k_{i-1},k_{i+1}} \sum_{k'_i = k_{i-1} \pm \frac{1}{2}} [2k_i+1]_q^{\;1/2} \, [2k'_i+1]_q^{\;1/2} \, [2k_{i+1}+1]_q^{\;-1} \, \vec{v}_{k'} \tag{3.2}$$

mit

$$k' = (k_1, \ldots, k_{i-1}, k'_i, k_{i+1}, \ldots, k_N) \ . \tag{3.3}$$

Hier bezeichnet $[x]_q$ wiederum die $q$-Zahl (2.21). Die so definierte Darstellung ist (für generische $q$) eine reguläre Darstellung der Temperley-Lieb-Algebra [38].
Die Vektoren $\vec{v}_k$ können als Pfade auf einem Bratteli-Diagramm interpretiert werden [2]. Stellt man $U_qSU(2)$ auf $(\mathbb{C}^2)^{\otimes N}$ dar (Abschnitt 2.1), so beschreibt das Bratteli-Diagramm die Ausreduzierung dieses Darstellungsraums. Dabei gibt $k_i$ den $q$-Spin einer

irreduziblen $U_qSU(2)$-Darstellung an, die bei der Zerlegung des Tensorprodukts eines $q$-Spin $k_{i-1}$ Multipletts, das den ersten $i-1$ Gitterplätzen zugeordnet ist, und des Doubletts des Gitterplatzes $i$ entsteht. Der Index $k_N$ gibt also den Gesamtspin an, so daß man durch die Bedingung

$$k_N = 0 \tag{3.4}$$

auf einfache Art die $U_qSU(2)$ Skalare ausgewählen kann. Definiert man

$$\Gamma_j^{(N)} = \begin{pmatrix} N \\ N/2-j \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} N \\ N/2+j+1 \end{pmatrix} , \tag{3.5}$$

so hat dieser Unterraum, der hier mit $\mathcal{S}^{(N)}$ bezeichnet wird, die Dimension [2]

$$\dim(\mathcal{S}^{(N)}) = \Gamma_0^{(N)} \quad . \tag{3.6}$$

Der Raum $(\mathbb{C}^2)^{\otimes N}$ läßt sich also als direktes Produkt von Räumen $\rho_j$ schreiben, in denen die Operatoren $S^{\pm}, S^0$ agieren und die durch einen bestimmten Pfad $\vec{v}_k$ mit $k_N = j$ indiziert sind. Explizit erhält man die Zustände $|k m_{ges}\rangle$ eines solchen Darstellungsraums mittels Clebsch-Gordan-Zerlegung [17]. Bezeichnet $m = (m_1, \ldots, m_N) \in \{-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\}^N$ die magnetischen Quantenzahlen für die Darstellungsräume an den einzelnen Gitterplätzen, so ist $m_{ges} = \sum_{i=1}^N m_i$ und es gilt

$$|k\, m_{ges}\rangle = \sum_m \langle m|k\, m_{ges}\rangle \;\; |m\rangle \tag{3.7}$$

mit den Matrixelementen

$$\langle m|k\, m_{ges}\rangle = \tag{3.8}$$

$$\sum_{m_2', m_3', \ldots, m_{N-1}'} \begin{pmatrix} k_N & \frac{1}{2} & k_{N-1} \\ m_{ges} & m_N & m_{N-1}' \end{pmatrix} \cdots \begin{pmatrix} k_3 & \frac{1}{2} & k_{N-1} \\ m_3' & m_3 & m_2' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} k_2 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ m_2' & m_2 & m_1 \end{pmatrix} .$$

Hierbei bezeichnen

$$\begin{pmatrix} k & k_2 & k_1 \\ m & m_2 & m_1 \end{pmatrix} = (\langle k_2\, m_2| \otimes \langle k_1\, m_1|) \cdot |k\, m\rangle \tag{3.9}$$

die $U_qSU(2)$ Clebsch-Gordan Koeffizienten [41] bei der Fusion von $\rho_{k_1}$ mit $\rho_{k_2}$ zu $\rho_k$.
Quantengruppensymmetrische Operatoren wirken, indem sie Pfade $k$ auf andere Pfade abbilden; dabei wird die magnetische Quantenzahl $m$ nicht geändert. Für solche Operatoren braucht man also die $U_qSU(2)$ Darstellungsräume $\rho_j$ selbst nicht zu betrachten. Insbesondere sind Generatoren der Temperley-Lieb-Algebra $U_qSU(2)$ symmetrisch und entsprechen den Abbildungen (3.2) [17]. Für $U_qSU(2)$ symmetrische Operatoren existieren nur Übergänge zwischen Vektoren $v_k$ mit gleichem $k_N$, d.h. Gesamtspin. Dies ergibt sich auch für die Temperley-Lieb-Generatoren, wie man an der Realisierung (3.2) erkennt.
Betrachtet man nun den Fall $q = \exp(\frac{i\pi r}{s})$ ($r$ und $s$ teilerfremd), so muß man beachten, daß $[s]_q = 0$. Es ist in diesem Fall möglich, die Darstellung (3.2) zu verwenden, wenn die Basis des Darstellungsraum auf die Vektoren $\vec{v}_k$ mit

$$k_i \leq \frac{s}{2} - 1 \tag{3.10}$$

eingeschränkt wird. Der durch diese Bedingung gegebene Raum ist unter (3.2) abgeschlossen; alle Faktoren in (3.2) sind für Vektoren dieses Raums definiert.
Die Einschränkung des Darstellungsraums spiegelt sich in der Theorie der $U_qSU(2)$ Darstellungen für Einheitswurzeln $q$ wieder. Nur diejenigen $q$-Spin $k_N$ Darstellungen, deren Pfade im Bratteli-Diagramm gemäß (3.10) beschränkt sind, bleiben als irreduzible Darstellungen mit positiver $q$-Dimension bestehen (vgl. Abschnitt 2.1). Wählt man die Vektoren mit $k_N = 0$ aus, so sind sie Basis für einen Raum, der die eindimensionalen $U_qSU(2)$ Darstellungen realisiert. Er wird in dieser Arbeit mit $\mathcal{S}^{(N)_q} \subset \mathcal{S}^{(N)}$ bezeichnet und hat die Dimension [2]

$$\Omega_m^{(N)} = \Gamma_0^{(N)} - \Gamma_{(m+1)-1}^{(N)} + \Gamma_{m+1}^{(N)} - \Gamma_{2(m+1)-1}^{(N)} + \Gamma_{2(m+1)}^{(N)} - \Gamma_{3(m+1)-1}^{(N)} + \cdots \quad , \tag{3.11}$$

abhängig von $q = \exp(\frac{\mathrm{i}\pi}{m+1})$. Für kurze Gitter mit

$$N \leq s - 2 \tag{3.12}$$

ergibt sich aus (3.10) keine Einschränkung, d.h. alle Darstellungen sind irreduzibel und von Typ-I.
Man definiert nun auf dem Pfadraum ein Skalarprodukt durch Fortsetzung von

$$\vec{v}_k \cdot \vec{v}_{k'} = \prod_{i=1}^{N} \delta_{k_i k_i'} \ . \tag{3.13}$$

Dieses Skalarprodukt ist in Übereinstimmung mit dem kanonischen Skalarprodukt

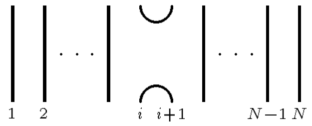
$$\langle k\, m_{ges} | k'\, m'_{ges} \rangle = \delta_{m_{ges} m'_{ges}} \prod_{i=1}^{N} \delta_{k_i k_i'} \tag{3.14}$$

des Spinkonfigurationsraums $(\mathbb{C}^2)^{\otimes N}$für reelle $q$. Auch für Einheitswurzeln $q = \exp(\frac{\mathrm{i}\pi}{m+1})$ und die Bedingung (3.10) (entsprechend den Typ-I Darstellungen), sowie für $q = \exp(\frac{\mathrm{i}\pi r}{s})$ bei Einschränkung auf $\mathcal{S}_q^{(N)}$ entspricht es dem Skalarprodukt auf $(\mathbb{C}^2)^{\otimes N}$, wenn man bei letzterem $q$ als formalen Parameter betrachtet, der bei der Bildung eines adjungierten Vektors oder Operators nicht komplex konjugiert wird ($r$,$s$ und $m$ ganzzahlig). Dies ist die natürliche Definition für $(\mathbb{C}^2)^{\otimes N}$, denn so gilt für die $U_qSU(2)$ Darstellung auf $(\mathbb{C}^2)^{\otimes N}$,daß $S^+$ zu $S^-$ adjungiert ist [2]. Für allgemeine Werte von $k_N$ und $q = \exp(\frac{\mathrm{i}\pi r}{s})$ erhält man hingegen auf dem Spinkonfigurationsraum Vektoren mit negativer Norm.
Für die numerischen Berechnungen kann man also den Darstellungsraum $\mathcal{S}_q^{(N)}$ mit der durch die $\vec{v}_k$ gegebenen orthonormalen Basis benutzen; da der Grundzustand nicht entartet ist, wird er durch ein Element aus $\mathcal{S}_q^{(N)}$ repräsentiert. Die Darstellung von Hamiltonoperator $H$ und skalaren Zweipunktoperatoren ergibt sich dann aus der Definition (3.2). Die Berechnung ist dabei unabhängig von der speziellen Darstellung von $H$ als $XXZ$ Spin-$\frac{1}{2}$ Quantenkette.

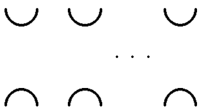
### *3.2. Darstellung auf Liniendiagrammen*

In [1] wurde eine graphische Möglichkeit zur Berechnung der Zweipunktfunktionen $\langle g_{k,l} \rangle_N$ beschrieben, mit der analytische Ergebnisse für die Einheitswurzeln $q = \exp(\frac{\mathrm{i}\pi}{4})$

und $q = \exp(\frac{i\pi}{3})$ erzielt wurden (vgl. Abschnitt 2.2), und es wurde vorgeschlagen, sie für numerische Berechnungen zu verwenden. Die Temperley-Lieb-Algebra $T_N(q)$ wird dazu auf (Grenz-)Liniendiagrammen (*boundary diagrams* [38]) dargestellt.
Ein Liniendiagramm ist durch $N$ sich nicht überschneidende Linien gegeben, die so zwischen $N$ Punkten einer oberen Reihe und $N$ Punkten einer unteren Reihe verlaufen, daß jeder Punkt mit genau einem anderen Punkt durch eine Linie verbunden wird.
Die Menge der so definierten Liniendiagramme erhält man auf folgende Weise als Darstellung von Wörtern der Temperley-Lieb-Algebra: Für einen Generator $e_i$ definiert man

$e_i =$  $1 \leq i \leq N-1$ . (3.15)

Die Identität wird durch $N$ senkrechte Linien dargestellt. Die Diagramme, die allgemeinen Wörtern (d.h. Produkten von Generatoren der Algebra) zugeordnet sind, erhält man hieraus durch die Definition der Komposition zweier Diagramme: Für das Produkt zweier Wörter werden die zugehörigen Liniendiagramme übereinander gestellt und dabei die Linien, die in den unteren Punkten des ersten Diagramms enden, mit den Linien, die in den entsprechenden oberen Punkten des zweiten Diagramms enden, verbunden. Jede geschlossene Linie wird aus dem Diagramm entfernt und durch einen skalaren Faktor $q + q^{-1}$ ersetzt. Dies entspricht der Temperley-Lieb-Relation (1.2). Daß die Diagramme auch die anderen Relationen (1.3) und (1.4) erfüllen, kann man leicht durch Zeichnen der jeweils zugehörigen Diagramme verifizieren. Das Zusammensetzen der Diagramme realisiert also auf graphische Weise die Temperley-Lieb-Algebra. Man erhält alle möglichen Liniendiagramme durch Komposition von Diagrammen (3.15). Darüberhinaus ist die Abbildung von der Menge der reduzierten Wörter von $T_N(q)$ auf die Menge der Liniendiagramme injektiv [38].
Betrachte die Menge der Liniendiagramme als Basis für einen $\mathbb{C}$ Vektoraum $\mathcal{L}^{(N)}$. Eine Darstellung von $T_N(q)$ auf $\mathcal{L}^{(N)}$ kann offensichtlich durch lineare Fortsetzung der beschriebenen Komposition von Diagrammen definiert werden. Da die reduzierten Wörter von $T_N(q)$ eine Basis für die reguläre Darstellung dieser Algebra sind [38], bildet die Algebra der Liniendiagramme $\mathcal{L}^{(N)}$ eine graphische Form der regulären Darstellung von $T_N(q)$ .
Für die numerischen Rechnungen wird die reguläre Darstellung von $T_N(q)$ auf das einseitige Ideal $\mathcal{I}^{(N)} \subset \mathcal{L}^{(N)}$ eingeschränkt, das durch das Wort $e_1 e_3 \ldots e_{N-1}$ generiert wird. Es gilt

$e_1 e_3 \ldots e_{N-1} =$  . (3.16)

Diese Ideal entspricht dem Raum der $U_qSU(2)$ Skalare für generisches $q$ [1, 38]. Ein expliziter $T_N(q)$-Modul-Isomorphismus zwischen der Darstellung auf den

Liniendiagrammen von $\mathcal{I}^{(N)}$ und auf skalaren Spinzuständen wird in [46, 47] beschrieben. Dabei wird zwei im Liniendiagramm durch einen Bogen verbundenen Zuständen ein $U_qSU(2)$ Singulett zugeordnet. Im Zusammenhang dieser Arbeit ist wichtig, daß der (nichtentartete) Grundzustand von $H$ durch einen Vektor aus $\mathcal{I}^{(N)}$ dargestellt wird.
Das Ideal $\mathcal{I}^{(N)}$ hat eine Basis aus denjenigen Liniendiagrammen, deren obere und untere Punkte durch keine Linie verbunden werden und deren unterer Teil mit demjenigen aus Diagramm (3.16) übereinstimmt. Es hat wie $S^{(N)}$ die Dimension

$$\dim(\mathcal{I}^{(N)}) = \Gamma_0^{(N)} \quad . \tag{3.17}$$

Man kann sofort verifizieren, daß die Dimensionen von $\mathcal{I}^{(N)}$ und $S^{(N)}$ gleich sind, wenn man die Abbildung betrachtet, die jedem Basisvektor $\vec{v}_k$ von $S^{(N)}$ dasjenige Liniendiagramm zuordnet, in dessen oberem Teil eine Linie vom $i$-ten Punkt nach rechts führt, wenn $k_{i-1} < k_i$, und nach links wenn $k_{i-1} > k_i$ ist $(1 \leq i \leq N)$. Diese Abbildung ist offensichtlich bijektiv.
Für die Berechnung von Erwartungswerten benötigt man ein Skalarprodukt für die Liniendiagramme. Das transponierte Diagramm eines Liniendiagramms sei durch das gespiegelte Diagramm, in dem oben und unten vertauscht werden, gegeben. Damit kann man dann für zwei beliebige Liniendiagramme $w_1$ und $w_2$ das Skalarprodukt $\langle w_1|w_2\rangle$ als

$$\langle w_1|w_2\rangle = (q + \frac{1}{q})^k \tag{3.18}$$

definieren, wobei

$$k = \text{Anzahl der geschlossenen Linien in der Komposition } w_1^T\, w_2 \quad .$$

Speziell gilt also für Diagramme $s_1$ und $s_2$ aus $\mathcal{I}^{(N)}$

$$s_1{}^T \cdot s_2 \;=\; \langle s_1|s_2\rangle \begin{array}{ccccc} \cup & \cup & & \cup \\ & & \cdots & \\ \cap & \cap & & \cap \end{array} \quad . \tag{3.19}$$

Mit dieser Definition und hermitescher Fortsetzung wird auf dem Raum der Liniendiagramme eine hermitesche Bilinearform definiert. Man kann zeigen, daß die so definierte Bilinearform für $q = \exp(\frac{i\pi r}{s})$ und kurze Kettenlängen (3.12) positiv definit ist.
Die Einschränkung auf das Ideal $\mathcal{I}^{(N)}$ ergibt eine Bilinearform, die dem kanonischen Skalarprodukt auf dem Spinkonfigurationsraum entspricht, wenn man die Liniendiagramme auf die zugehörigen skalaren Spinzustände abbildet. Dabei wird für den Spinkonfigurationsraum $q$ als formaler Parameter aufgefaßt, der nicht komplex konjugiert wird. Der genaue Zusammenhang wird wiederum in [47] diskutiert. Wie beim kanonischen Skalarprodukt auf dem Spinkonfigurationsraum treten für Einheitswurzeln $q$ also im allgemeinen Zustände in $\mathcal{I}_q^{(N)}$ mit negativer oder verschwindender Norm auf. Die Bilinearform (3.18) ist also nicht positiv definit.
Mit dieser Definition von Liniendiagrammen können Hamiltonoperator und die Zweipunktoperatoren $g_{k,l}$ dargestellt werden. Mit der Bilinearform (3.18) kann man

dann Matrixelemente $\langle v|g_{k,l}|v\rangle$ berechnen, indem man eine graphische Form der regulären Darstellung benutzt und Diagramme zusammensetzt, die die Temperley-Lieb-Relationen realisieren. Die Matrixelemente für $v, w \in \mathcal{I}_q^{(N)}$ und insbesondere die Korrelationsfunktionen stimmen mit den Ergebnissen für die $XXZ$-Kette überein. Die Berechnung der Korrelationsfunktionen kann also vollständig in der Darstellung auf $\mathcal{I}_q^{(N)}$ erfolgen.

In Kapitel 2.2 wurde zusammengefaßt, wie Quotienten der Temperley-Lieb-Algebra benutzt wurden, um u.a. mit der Liniendiagramm-Darstellung analytische Resultate zu erzielen. Dabei ist wichtig, daß die Berechnung von Matrixelementen mit der Darstellung auf Liniendiagrammen und dem Skalarprodukt (3.18) unabhängig ist von der Bildung eines Quotienten, weil sie nur auf der Anwendung der definierenden Relationen der Temperley-Lieb-Algebra beruht. Solche Quotienten existieren für jede Einheitswurzel $q = \exp(\frac{i\pi}{m+1})$ mit ganzzahligem $m$ [43] und können im Prinzip dazu verwendet werden, die benötigte Basis für einen Darstellungsraum, der den Grundzustand enthält, gegenüber der vollständigen Basis des Ideals $\mathcal{I}^{(N)}$ mit Hilfe der Quotientenrelation zu verkleinern. Für die Pfadraumdarstellung werden sie in natürlicher Weise realisiert. Aber für die numerische Berechnung der Korrelationsfunktionen mit den Liniendiagrammen ist die Verwendung der Quotienten nicht sinnvoll, da im Prinzip nach jeder Anwendung eines Generators auf ein Liniendiagramm die Quotientenrelation dazu verwendet werden müßte, unerwünschte Liniendiagramme durch andere auszudrücken.

# 4. Eigenschaften von Zweipunktfunktionen und Hamiltonoperator

In diesem Kapitel werden zunächst einige Eigenschaften des Hamiltonoperators und der Zweipunktoperatoren $g_{k,l}$ hergeleitet (Abschnitte 4.1 bzw. 4.2). Dabei werden die in Kapitel 3.2 definierten graphischen Darstellungen der Temperley-Lieb-Algebra benutzt. Darüberhinaus wird aus der Symmetrie $g_{l,k} = q^4 g_{k,l}$ für $k < l$ abgeleitet, daß die konformen Felder, die dem Kontinuumslimes der Gitteroperatoren $g_{k,l}$ entsprechen, konforme Dimension $(h, \bar{h}) = (\frac{m-1}{m+1}, 0)$ bzw. $(0, \frac{m-1}{m+1})$ haben. (Abschnitt 4.3). Die teilweise Bestätigung dieser Vermutung durch die numerische Berechnung kritischer Exponenten ist das hauptsächliche Ergebnis dieser Arbeit.

## *4.1. Hamiltonoperator*

Betrachtet man die definierenden Relationen der Temperley-Lieb-Algebra, so erkennt man, daß diese sich durch Vertauschen von $q$ und $q^{-1}$ nicht ändern, und damit auch die "abstrakte" Definition des Hamiltonoperators als Summe von Generatoren invariant ist. Deshalb ändert sich das Spektrum von $H$ nicht unter komplexer Konjugation. Die Eigenwerte von $H$ in einer beliebigen Darstellung sind also reell oder bilden komplex konjugierte Paare. Man erkennt dies auch an dem entsprechenden $XXZ$-Hamiltonoperator $H(q)$, der unter einer unitären Transformation, die die Gitterplätze von rechts nach links umnumeriert, ähnlich zu $H(q^{-1})$ ist [13].

In der Darstellung als $XXZ$-Heisenbergkette (1.5) ist der Hamiltonoperator allerdings für Einheitswurzeln $q$ im allgemeinen nicht diagonalisierbar [48, 49]. In diesem Fall kann man den Konfigurationsraum der Quantenspinkette in Zustände, die zu Typ-

I Darstellungen von $U_qSU(2)$ gehören, und solche aus Typ-II Darstellungsräumen zerlegen. Diese beiden Teilräume sind zueinander orthogonal [2]. In [48] wird für $N = 2{,}4$ und $q = \exp(\frac{\mathrm{i}\pi}{m+1})$ explizit gezeigt, daß man durch Einschränkung auf die Zustände, die zu irreduziblen $U_qSU(2)$ Darstellungen gehören (Typ-I Darstellungen und Typ-II Darstellungen mit $q$-Spin $j = (nr-1)/2$, vgl. Abschnitt 2.1), einen Unterraum erhält, auf dem der Hamiltonoperator diagonalisierbar ist, während dies für die reduziblen Darstellungen nicht möglich ist.
Die Darstellung der Temperley-Lieb-Algebra auf dem Pfadraum (3.2) mit der Einschränkung der Pfade gemäß (3.10) entspricht der Darstellung auf den Typ-I Zuständen, die bei der Zerlegung des Spinkonfigurationsraums auftreten. Für $q = \exp(\frac{\mathrm{i}\pi}{m+1})$ mit ganzzahligem $m$ (so daß die Koeffizienten in (3.2) reell sind) kann man daher allgemein die Diagonalisierbarkeit der $U_qSU(2)$ symmetrischen $XXZ$-Kette auf dem Unterraum derjenigen Zustände, die zu Typ-I Darstellungen gehören, beweisen: In diesem Fall ist die Darstellung von $H$ auf dem Pfadraum mit Skalarprodukt (3.2) selbstadjungiert. Es ist also physikalisch sinnvoll, den Darstellungsraum der $XXZ$-Kette $(\mathbb{C}^2)^{\otimes N}$ auf die Zustände der Typ-I Darstellungen einzuschränken, vgl. [16, 48]. In diesem Raum ist $H$ dann diagonalisierbar. Mit Hilfe des algebraischen Bethe-Ansatzes kann man alle Höchstgewichtsvektoren der Typ-I Darstellungen bestimmen [15, 17].
Als Resultat der numerischen Berechnungen findet man, daß der Grundzustand von $H$ unabhängig von $q$ folgende Paritätseigenschaft besitzt: Der Beitrag eines Pfadraumvektors $\vec{v}_k \in \mathcal{S}_q^{(N)}$ zum Grundzustand ist gleich dem Beitrag des Vektors $\vec{v}'_k$ mit $k' = (k_N, k_{N-1}, \dots, k_1)$. Das Gleiche gilt für ein Liniendiagrammm aus $\mathcal{I}_q^{(N)}$ und das zugehörende gespiegelte Liniendiagramm, bei dem rechts und links vertauscht sind. Da in der Pfadraum- bzw. Liniendiagrammdarstellung $H$ paritätsinvariant (rechts-links-symmetrisch) ist, haben alle Eigenzustände zu nichtentarteten Eigenwerten feste Parität; die Parität des Grundzustands ist positiv. Dies kann bei der Kalkulation der Korrelationsfunktionen verwendet werden, um den Rechenaufwand zu minimieren (vgl. Kapitel 5).

### *4.2. Zweipunktoperatoren*

Es soll zuerst gezeigt werden, daß die Erwartungswerte der skalaren Zweipunktoperatoren reell sind. Unmittelbar aus der Definition der Zweipunktoperatoren (2.2) sieht man, daß sie folgende Form besitzen:

$$g_{k,l} = \sum_{\pi \in \mathcal{P}_n} a^q_{\pi(0),\pi(1)\dots\pi(n-1)}\, g_{\pi(0)+k}\, g_{\pi(1)+k} \cdots g_{\pi(n-1)+k} \qquad g_i \equiv g_{i,i+1} \tag{4.1}$$

mit

$$a^{q^{-1}}_{\pi(n-1),\pi(n-2)\dots\pi(0)} = a^q_{\pi(0),\pi(1)\dots\pi(n-1)}\ ,$$

wobei $\mathcal{P}_n$ die Permutationen von $0, 1, \dots, n-1$ bezeichnet und $n = k - l$ ist.
Betrachtet man die Darstellung auf Liniendiagrammen, so gilt

$$g_i = \underset{1}{\Big|}\;\underset{2}{\Big|}\cdots\Big|\;\underset{i\;\;i+1}{\overset{\smile}{\frown}}\;\Big|\cdots\underset{N-1}{\Big|}\;\underset{N}{\Big|} - (q+q^{-1})^{-1}\,\underset{1}{\Big|}\;\underset{2}{\Big|}\cdots\underset{N-1}{\Big|}\;\underset{N}{\Big|} = g_i^T \ . \tag{4.2}$$

Mit der in (3.18) definierten Bilinearform und (4.1) findet man daher zunächst

$$g_{k,l}(q) = g^T_{k,l}(q^{-1}) \tag{4.3}$$

und für zwei Wörter $w_1$ und $w_2$ aus $\mathcal{L}^{(N)}$

$$\langle w_1 \,|\, g_{k,l}\, w_2\rangle(q) = \langle w_1\, g^T_{k,l} |\, w_2\rangle(q^{-1}) = \langle w_2 \,|\, g_{k,l}\, w_1\rangle(q^{-1}) = [\langle w_2 \,|\, g_{k,l}\, w_1\rangle(q)]^* \,. \tag{4.4}$$

Dabei bezeichnet der Stern komplexe Konjugation, und die letzte Gleichheit gilt für $q^* = q^{-1}$. Für einen beliebigen Vektor $v$ aus $\mathcal{L}^{(N)}$ und $q$ auf dem Einheitskreis sind daher die Matrixelemente $\langle v|g_{k,l}\, v\rangle$ reell, insbesondere also auch die Korrelationsfunktionen $\langle g_{k,l}\rangle_N$. (Für relle $q$ ist dies offensichtlich auch der Fall.)
In der Darstellung auf Liniendiagrammen wird ebenso klar, daß für die zweite Art von skalaren Zweipunktoperatoren $g'_{k,l}$, die in [1] definiert werden und die sich in den Rekursionsformeln (2.2) nur durch Übergang von $q$ zu $q^{-1}$ von den $g_{k,l}$ unterscheiden,

$$\langle w_1 \,|\, g'_{k,l}\, w_2\rangle = (\langle w_1 \,|\, g_{k,l}\, w_2\rangle)^* \tag{4.5}$$

gilt, so daß die Korrelationsfunktionen beider Operatoren gleich sind.
Obwohl die Korrelationsoperatoren $g_{k,l}$ auf dem Gitter nicht lokal operieren, kann man zeigen, daß für ein Wort $w \in \mathcal{I}^{(N)}_q$, bei dem in der oberen Reihe jeder Punkt zwischen $k$ und $l$ mit einem direkt benachbarten Punkt verbunden ist,

$$\langle w \,|\, g_{k,l}\, w\rangle = \begin{cases} (q+q^{-1})^{N/2-1}(q^2+3+q^{-2}) & \text{wenn } k \text{ und } l \text{ durch eine Linie verbunden} \\ 0 & \text{sonst} \end{cases} \tag{4.6}$$

gilt [46, 47]. Für den allgemeinen Fall kann man das gleiche Ergebnis erwarten.
Betrachtet man einen Vektor $v$ von Liniendiagrammen, der unter Rechts-Links-Spiegelung positive oder negative Parität (vgl. Abschnitt 4.1) besitzt, so gilt für die diagonalen Matrixelemente der Zweipunktoperatoren $g_{k,l}$ bei Gitterlänge $N$

$$\langle v|g_{k,l}|v\rangle = \langle v|g_{N+1-l,N+1-k}|v\rangle \quad . \tag{4.7}$$

Dies ist nicht sofort offensichtlich, da die Definition der $g_{k,l}$ nicht rechts-links-symmetrisch ist, kann aber leicht mit der Eigenschaft (4.1) bewiesen werden.

### *4.3. Kontinuumslimes der Zweipunktoperatoren "erfordert" konforme Felder mit Spin*

Da der Hamiltonoperator (1.1) für Einheitswurzeln $q$ kritisch ist, d.h. die Korrelationslänge divergiert, erwartet man für Korrelationsfunktionen im *bulk* einen algebraischen Abfall, also für die Grundzustandserwartungswerte $\langle g_{k,l}\rangle_N$

$$\langle g_{k,l}\rangle_N \propto \frac{1}{(l-k)^{2x}} \qquad \text{für } 1 \ll l \ll k \ll N \,. \tag{4.8}$$

Hierbei wird die Standarddefinition des kritischen Exponenten $x$ für das *bulk*-Verhalten benutzt; für die Definition von kritischen Exponenten für *bulk*- und *surface*-Verhalten vgl. [12].
Für das *bulk*-Verhalten erwartet man aufgrund von

$$g_{k,l} = q^4\, g_{l,k} \qquad \text{für } k < l \,,$$

daß der kritische Exponent $x$

$$\frac{1}{(l-k)^{2x}} = q^4 \frac{1}{(k-l)^{2x}} \tag{4.9}$$

erfüllt. Mit $q = \exp(\frac{\mathrm{i}\pi}{m+1})$ impliziert dies

$$x = \frac{1}{1+2n_1}(n_2 - \frac{2}{m+1}) \tag{4.10}$$

für zwei ganze Zahlen $n_1$ und $n_2$.
Der Kontinuumslimes der Korrelationsfunktion $\langle g_{k,l}\rangle_N$ entspricht einer Zweipunktfunktion einer konformen Feldtheorie mit zentraler Ladung (1.7) auf einem Streifen, bzw. in einer Halbebene, falls man die Korrelationen für die semi-infinite Kette ($H$ mit $N \to \infty$) betrachtet. In diesen minimalen Modellen existieren primäre Felder mit konformen Dimensionen

$$h_{p,q}(m) = \frac{[(m+1)p - mq]^2 - 1}{4m(m+1)}, \tag{4.11}$$

mit ganzen Zahlen $p$ und $q$ ungleich null [11]. Die konformen Dimensionen bestimmen die möglichen kritischen Exponenten der Korrelationsfunktionen zugehöriger statistischer Modelle. Es ist also zu erwarten, daß der Exponent $x$ mit den Gewichten der Darstellung der Virasoro-Algebra in Verbindung gebracht werden kann. Vergleicht man (4.10) mit (4.11), so findet man als einzig möglichen Exponenten für alle $m \geq 3$

$$x = \frac{m-1}{m+1} = h_{1,3}(m) \ . \tag{4.12}$$

Für den Ising-Fall sind die konformen Felder, die den skalaren Zweipunktoperatoren auf dem Gitter entsprechen, bekannt [1]. Man findet lineare Kombinationen von Produkten von Majoranafeldern $\Psi_1$ und $\Psi_2$ mit konformen Dimensionen $(h,\bar{h}) = (\frac{1}{2},0)$ bzw. $(0,\frac{1}{2})$. Betrachte die semi-infinite Kette. Die in Abschnitt (2.2) angegebenen Operatoren $\tau_k^y$ und $\tau_k^x$ werden im Kontinuum ($k$ als kontinuierliche Ortsvariable) auf der durch $\{t + \mathrm{i}k \,|\, k \geq 0\}$ gegebenen Halbebene zu

$$\tau_k^y(t) \;=\; \frac{1}{\sqrt{2\pi}}(\psi_1 \,+\, \psi_2)(t+\mathrm{i}k) \qquad \tau_k^x(t) \;=\; \frac{1}{\sqrt{2\pi}}(\psi_1 \,-\, \psi_2)(t+\mathrm{i}k) \ , \tag{4.13}$$

wobei durch $t$ die Zeitabhängigkeit gegeben ist [1]. Die (zeitabhängigen) Korrelationsfunktionen der $\Psi$ lassen sich wie folgt berechnen.
Nach [12] kann man die Zweipunktfunktionen $\langle\Phi(z_1,\bar{z}_1)\,\Phi'(z_2,\bar{z}_2)\rangle$ konformer Felder $\Phi$ und $\Phi'$ für die Halbebene bestimmen, indem man eine entsprechende Vierpunktfunktion $\langle\Phi(w_1,\bar{w}_1)\,\Phi'(w_2,\bar{w}_2)\,\Phi(w_3,\bar{w}_3)\,\Phi'(w_4,\bar{w}_4)\rangle$ für die Ebene betrachtet: Die Zweipunktfunktion als Funktion von $(z_1,\bar{z}_1,z_2,\bar{z}_2)$ erfüllt dieselben Differentialgleichungen wie der holomorphe Anteil der Vierpunktfunktion als Funktion von $(w_1 = z_1, w_2 = z_2, w_3 = \bar{z}_1, w_4 = \bar{z}_2)$.
Speziell für $\Phi = \Phi_1$ mit konformem Gewicht $(h,0)$ und $\Phi' = \Phi_2$ mit $(0,h)$ reduziert sich die Vierpunktfunktion in der Ebene zu einer Zweipunktfunktion, die durch konforme Invarianz bestimmt ist [11] , und man erhält in diesem Fall

$$\langle\Phi_i(z_1,\bar{z}_1)\,\Phi_j(z_2,\bar{z}_2)\rangle = \frac{1}{(z_1^i - z_2^j)^{2h}} \qquad \text{mit } i,j = 1,2 \text{ und } z_n^1 = z_n, z_n^2 = \bar{z}_n \ . \tag{4.14}$$

Für die Majoranafelder, d.h. $\Phi_i = \Psi_i$, wurden diese Korrelationsfunktionen in der Halbebene bereits in [50] berechnet.
Berechnet man nun gemäß (4.13) die Korrelationsfunktionen zwischen den $\tau^x$ und $\tau^y$ für die Halbebene, so erhält man vier Funktionen, die im Grenzfall $t_1 \to t_2$ gemäß (2.44) gerade die Gitter-Zweipunktfunktionen (2.49) für $1 \ll k \ll l$ ergeben.
Auch im allgemeinen Fall kann man erwarten, daß der Kontinuumslimes der skalaren Zweipunktoperatoren durch lineare Kombination von Produkten konformer Felder mit Dimension $(h_{1,3}, 0)$ oder $(0, h_{1,3})$ gegeben ist; in diesem Fall ist (4.12) erfüllt. Die Linearkombinationen müssen dabei insbesondere so beschaffen sein, daß die Zweipunktfunktionen reell sind.

## 5. Numerische Methoden zur Berechnung der Korrelationsfunktionen

Dieses Kapitel enthält eine Beschreibung der benutzten numerischen Methoden. Zur Berechnung der Grundzustandserwartungswerte werden die in Kapitel 3 definierten graphischen Darstellungen der Temperley-Lieb-Algebra verwendet. In dieser Arbeit werden die Fälle $q = \exp(\frac{\mathrm{i}\pi}{m+1})$ mit $m = 3$, $m = 5$ und $m = \frac{2}{3}$ analysiert, aber analoge Rechnungen können für jedes $m$ durchgeführt werden (siehe die Bemerkungen in 7 und die numerischen Daten für $q = \exp(\frac{\mathrm{i}\pi}{5})$ und $q = \exp(\frac{\mathrm{i}\pi}{7})$ im Anhang). — Alle Rechnungen wurden auf Workstations mit bis zu 96MByte Hauptspeicher ausgeführt.

### *Basen für die Darstellungsräume und Hamilton-Matrizen*

Zunächst wird eine Basis des Konfigurationsraums $\mathcal{I}_q^{(N)}$ (Darstellung auf Liniendiagrammen) bzw. $\mathcal{S}_q^{(N)}$ (Pfadraumdarstellung) generiert. Ein Element dieser Basis ist ein Vektor von $N$ natürlichen Zahlen, dessen Einträge im ersten Fall die jeweiligen, mit der Stelle des Eintrags verbundenen Punkte der oberen Reihe, und im zweiten Fall für den Basisvektor $\vec{v}_k$ die Zahlen $2k_i$ enthalten. Damit ist offensichtlich, daß man die Basisvektoren anordnen kann, um eine effiziente Suche nach demjenigen Vektor zu ermöglichen, auf den ein Basisvektor unter Anwendung eines Temperley-Lieb-Generators abgebildet wird,
Für die jeweilige Basis wird die Matrix erzeugt, die den Hamiltonoperator repräsentiert. Diese Matrizen haben für die Darstellung auf Liniendiagrammen für alle Werte von $q$ reelle Einträge, sind aber nichtselbstadjungiert, so daß der Lanczös-Algorithmus nicht verwendet werden kann. Die Pfadraumdarstellung von $H$ für $q = \exp(\frac{\mathrm{i}\pi 3}{5})$ ist komplexwertig und ebenfalls nicht hermitesch. Für ganzzahlige Werte von $m$ ist $H$ in der Pfadraumdarstellung hingegen reell und diagonalisierbar, einen entsprechenden Unterraum enthält auch der Darstellungsraum der Liniendiagramme (vgl. Abschnitt 4.1).

*Grundzustand und zugehörige Energie*

Betrachtet werden die Fälle mit reellwertigen Hamilton-Matrizen; der Grundzustand wird dann mit einem einfachen Vektoriterationsverfahren berechnet (der komplexe Fall erfordert größere Speicherkapazität und mehr Rechenaufwand bei jeder Iteration): Wiederholte Anwendung der Matrix auf einen passenden Startvektor projiziert auf den Eigenvektor mit dem betragsmäßig größten Eigenwert. Dabei kann man durch Addition eines Vielfachen der Einheitsmatrix zu $H$ den Grundzustand zu diesem Eigenvektor machen. Im vorliegenden Fall erfordert die Vektoriteration ungefähr 2000 Iterationsschritte und erreicht einen relativen Fehler der Eigenenergie von weniger als $10^{-11}$ ($10^{-18}$ für kleine Werte von $N$). Der Fehler berechnet sich dabei aus der Abweichung der Quotienten aus den einzelnen Komponenten des Vektors vor und nach einer Anwendung von $H$ von dem Mittelwert dieser Quotienten. Letzterer ergibt den Eigenwert. Die Vektoriteration wird mit verschiedenen Startvektoren durchgeführt, die alle denselben Grundzustand (mit positiver Parität, vgl. Abschnitt 4.1) ergeben.
Im Fall der Liniendiagrammdarstellung wird zu dem Grundzustandsvektor $v = \sum_i v_i s_i$ ($s_i$ aus der Basis von $\mathcal{I}_q^{(N)}$, $v_i$ der zugehörige Eintrag) ein Vektor $v'$ mit Einträgen

$$v'_i = \frac{1}{(||v||)^2} \sum_j v_j \langle s_j | s_i \rangle \tag{5.1}$$
$$\text{wobei} \quad (||v||)^2 = \sum_{j,i} v_j v_i \langle s_j | s_i \rangle$$

berechnet. $||v||$ bezeichnet also die Norm von $v$. (Für das nicht unitäre Modell mit $q = \exp(\frac{i\pi 3}{5})$ ist diese Zahl negativ.) Mit $v'$ ergeben sich die Korrelationsfunktionen als

$$\langle g_{k,l} \rangle_N = \sum_i v'_i (g_{k,l}\, v)_i \tag{5.2}$$

Für die Bestimmung von $v'$ muß $\langle s_i | s_j \rangle = \langle s_j | s_i \rangle$ für je zwei Liniendiagramme $s_i$ und $s_j$ aus der Basis von $\mathcal{I}_q^{(N)}$ bestimmt werden. Die Berechnung dieser graphisch über die Anzahl geschlossener Linien in $s_i^T s_j$ definierten Zahlen erfordert sehr viele Rechenoperationen, für das $N = 24$ Gitter 5 Tage CPU-Zeit.
Für die Pfadraumdarstellung ist die Berechnung der Korrelationsfunktionen hingegen einfacher, da die Basis von $\mathcal{S}_q^{(N)}$ orthonormal ist.
Für $q = \exp(\frac{i\pi}{4})$ und $q = \exp(\frac{i\pi}{6})$ kann die numerisch bestimmte Grundzustandsenergie mit Bethe-Ansatz Rechnungen verglichen werden [9, 13]. Die Ergebnisse (bis zu $N = 28$) sind identisch mit den in [13] angegebenen. Darüberhinaus kann man prüfen, ob man aus dem *finite-size*-Verhalten der Grundzustandsenergie $E_0 = E_0(N)$ die zentrale Ladung (1.7) erhält. Es gilt

$$E_0(N)/N = e_\infty + \frac{f_\infty}{N} - \frac{\pi \xi c}{24 N^2} + \mathrm{o}(N^{-2}) \,, \tag{5.3}$$

wobei $e_\infty$ and $f_\infty$ die Grundzustands- bzw. *surface*-Energie pro Gitterplatz im Grenzfall $N \to \infty$ bezeichnen [13, 51, 52]. Der Skalierungsfaktor $\xi$ ist (unabhängig von den Randbedingungen) für das $XXZ$-Modell und $q = \exp(\frac{i\pi}{m+1})$ durch

$$\xi = (m+1) \sin\left(\frac{\pi}{m+1}\right) \tag{5.4}$$

gegeben [53]. Aus den berechneten Grundzustandsenergien für die verschiedenen Gitterlängen $2, 4, \ldots, 24$ (Darstellung auf Liniendiagrammen) wird durch (dreimalige) Extrapolation (vgl. den nächsten Abschnitt) der Wert für $c$ berechnet. In einer ersten Extrapolation errechnet man $e_\infty$, mit der zweiten $f_\infty$ und mit der dritten die zentrale Ladung, jeweils unter Einbeziehung der vorher bestimmten Werte. Man erhält in Übereinstimmung mit (1.7) $c = 0.50$ für $q = \exp(\frac{i\pi}{4})$, $c = 0.79$ für $q = \exp(\frac{i\pi}{6})$ und $c = -4.40$ für $q = \exp(\frac{i\pi 3}{5})$. Hierbei läßt sich ein Fehler aufgrund der dreimaligen Anwendung eines Extrapolationsverfahrens nicht angeben.

*Berechnung von Extrapolationswerten*

An dieser Stelle soll kurz auf den Extrapolationsalgorithmus von Bulirsch und Stoer [54] eingegangen werden, der in dieser Arbeit für alle Extrapolationen verwendet wurde. Für die Extrapolation einer Größe $T(N)$ mit asymptotischer Form

$$T(N) = T + a_1 N^{-\omega_1} + a_2 N^{-\omega_2} + \ldots \tag{5.5}$$

zu ihrem Grenzwert $T$ ist dieser Algorithmus, im folgenden mit BST-Algorithmus bezeichnet, im allgemeinen besser geeignet als andere Extrapolationsalgorithmen (siehe [55, 56], darin enthaltene Literaturverweise und die dort behandelten Beispiele). Dies gilt insbesondere, wenn nicht alle der $\omega_i$ ganzzahlig sind.
Es seien die Werte $T(N)$ für eine Reihe von aufsteigenden Werten $N = N_1, N_2, \ldots, N_k$ bekannt. Der BST-Algorithmus errechnet rekursiv aus den $k \equiv k_0$ Startwerten $T(N_i) \equiv T_i^0$ (und $T_i^{-1} = 0$) in $k-1$ Schritten eine Tafel von Extrapolationswerten: Enthält die Stufe $j$ die $k_j$ Werte $T_i^j$, $i = 1, \ldots, k_j$, so ergeben sich die $k_{j+1} = k_j - 1$ Werte $T_i^{j+1}$, $i = 1, \ldots, k_{j+1}$ der Stufe $j+1$ aus

$$T_i^{j+1} = T_{i+1}^j + (T_{i+1}^j - T_i^j)\left[\left(\frac{N_{i+m}}{N_i}\right)\left(1 - \frac{T_{i+1}^j - T_i^j}{T_{i+1}^j - T_{i+1}^{j1}}\right) - 1\right] \quad , \tag{5.6}$$

wobei $\omega$ ein freier Parameter ist. Mit dem BST-Algorithmus wird die Funktion $T(N)$ (5.5) durch eine Folge rationaler Funktionen in der Variablen $\frac{1}{N}^{\omega}$ genähert. Er ist so konstruiert, daß die Werte $T^{j+1}$ (im allgemeinen) schneller gegen $T$ konvergieren als die Werte $T^j$. Man führt die Berechnung der Extrapolanten für verschiedene Werte von $\omega$ durch. Dasjenige $\omega$, für das die Differenz der Extrapolanten der zweitletzten Stufe, das ist $|T_1^{k-2} - T_2^{k-2}|$, (und der Stufen davor) minimal ist, wird ausgewählt. Der Wert von $T_1^{k-1}$ für dieses $\omega$ ist das Ergebnis der Extrapolation, also Approximation von $T$. Die Differenz $|T_1^{k-2} - T_2^{k-2}|$ ist dabei ein Maß für den Fehler des Ergebnisses. In Anwendungen zeigt es sich, daß sich $T_1^{k-1}$ für weite Bereiche von $\omega$ nur um wenige Prozent ändert, während diese Größe für einzelne Werte von $\omega$ $T_1^{k-1}$ einen Pol aufweisen kann (und ein falsches Ergebnis liefert) [55]. Die Änderung von $T_1^{k-1}$ bei geringfügiger Variation von $\omega$ (einige Prozent) kann ebenfalls zur Bestimmung der Genauigkeit der Extrapolation verwendet werden.
Für die Berechnung von Extrapolationswerten wurde ein Computerprogramm entwickelt, das den BST-Algorithmus für verschiedene Werte von $\omega$ durchführt, wobei das Intervall, in dem $\omega$ variiert, in mehreren Schritten verkleinert wird, um dasjenige $\omega$,

das den geringsten "Fehler" für $T$ ergibt, sukzessive zu bestimmen. Als zu minimierender Fehler wird dabei ein gewichteter Mittelwert der Differenzen der Extrapolationswerte auf den Stufen $k-2$ und $k-3$ verwendet.
Für die *finite-size* Bestimmung der zentrale Ladung aus den Grundzustandsenergien ist gemäß (5.3) $\omega = 1$ für alle drei Extrapolationsschritte.

*Korrelationsfunktionen*

Zur Berechnung der Korrelationsfunktionen $\langle g_{k,l}\rangle = \langle g_{k,l}\rangle_N$ für die einzelnen Kettenlängen $N$ wurde explizit die Rekursionsbeziehung in der Definition der $g_{k,l}$ verwendet. Das heißt, zunächst wird der Operator $g_{k,l}$ rekursiv gemäß $g_{k,l} = -q\, g_{k,n}\, g_{n,l} - q^{-1}\, g_{n,l}\, g_{k,n}$ mit $n = [(k-l)/2]_{\text{Gauß}}$ in Produkte von Operatoren $g_{i,i+1} \equiv g_i$ zerlegt. Durch rekursiven Aufbau dieser Zerlegung kann man erreichen, daß alle bei der Anwendung von $g_{k,l}$ auf den Grundzustand $v$ zu berechnenden Vektoren

$$v_{i_1,i_2,\ldots,i_n} = g_{i_1}\, g_{i_2} \cdots g_{i_n}\, v \qquad i_1, i_2, \ldots, i_n \in \{k, k+1, \ldots, l\} \qquad n \in \{1, \ldots, k-l\}$$

nur einmal erzeugt werden müssen; die Vektoren $v_{i_1,i_2,\ldots,i_n}$ der entsprechenden Rekursionsebenen werden abgespeichert. Eine nicht rekursive Berechnung der Korrelationsfunktionen erfordert ein Vielfaches an Rechenzeit. Weiterhin wird bei der Berechnung der Korrelationen die Symmetrie (4.7) benutzt; der Grundzustand ist eindeutig und hat daher feste Parität. Sie ermöglicht eine Halbierung der Anzahl zu berechnender $\langle g_{k,l}\rangle_N$. Die $\langle g_{k,l}\rangle_N$ selbst ergeben sich bei der Darstellung auf Liniendiagrammen aus (5.2).
Mit der Darstellung von $H$ und $g_{k,l}$ auf Liniendiagrammen können mit der zur Verfügung stehenden Workstation, unabhängig von $q$, bis zu $N = 24$ Gitterplätze behandelt werden. In diesem Fall ist die Dimension des Darstellungsraums $\Gamma_0^{(24)} = 208012$. Die Gittergröße ist begrenzt durch den Speicherbedarf der die Liniendiagramme repräsentierenden Basisvektoren und die Zeit, die zur Berechnung des Vektors $v'$ benötigt wird.
Für die Pfadraumdarstellung auf $\mathcal{S}_q^{(N)}$ begrenzt die Speicherkapazität, die für die Zwischenergebnisse bei der rekursiven Berechnung der Korrelationsfunktionen benötigt wird, die maximale Gitterlänge. Die Dimension des Darstellungsraums und die Größe der die Vektoren $\vec{v}_k$ repräsentierenden Basis ist abhängig von $m$. Für $q = \exp(\frac{\mathrm{i}\pi}{4})$ können numerisch die Korrelationen von Ketten bis zu $N = 40$ Gitterplätzen ($\dim \mathcal{S}_q = \Omega_{m=3}^{(40)} = 524288$) berechnet werden. Für $q = \exp(\frac{\mathrm{i}\pi}{6})$ ist die maximal erreichbare Kettenlänge $N = 28$ ($\Omega_{m=5}^{(28)} = 797162$). Für $q = \exp(\frac{\mathrm{i}\pi}{5})$ wurden ebenfalls mit der Pfadraumdarstellung die Korrelationen für maximal 28 Gitterplätze berechnet ($\Omega_{m=4}^{(28)} = 196418$), eine mögliche Berechnung für $N = 30$ ($\Omega_{m=4}^{(28)} = 514229$) wurde wegen der begrenzten Rechenzeit nicht ausgeführt.
Mit den bekannten Resultaten für den Ising-Fall und aus einem Vergleich der mit der Liniendiagramm- bzw. Pfadraum-Darstellung können die numerischen Fehler bei der Berechnung der Korrelationsfunktionen bestimmt werden. Die Werte sind genau auf 14 signifikante Stellen für $N = 14$ und auf 11 Stellen für $N = 28$. Die beiden Methoden zur Berechnung der Korrelationsfunktionen stimmen bis auf 12 Stellen überein ($N = 24$).

Um Korrelationen für die semi-infinite Geometrie zu berechnen, werden die Werte für endliche $N$ mit dem BST-Algorithmus extrapoliert, d.h. man extrapoliert $\langle g_{k,l}\rangle_N$ für verschiedene $N$ mit festem $k$ und $l$ zu

$$\langle g_{k,l}\rangle_\infty = \lim_{N\to\infty} \langle g_{k,l}\rangle_N \ . \tag{5.7}$$

Voraussetzung für eine erfolgreiche Anwendung des BST-Algorithmus zur Berechnung der Korrelationsfunktionen $\langle g_{k,l}\rangle_N$ ist eine hohe Präzision der Ausgangswerte. Mit der gegebenen Genauigkeit der Korrelationsfunktionen für die endlichen Ketten werden zumindest die Resultate von sechs verschiedenen Kettenlängen benötigt, um mit dem BST-Algorithmus verläßliche (vier Stellen) Korrelationsfunktionen für die semi-infinite Kette zu berechnen. Dies kann, wie im vorigen Abschnitt erläutert, aus dem Konvergenzverhalten des BST-Algorithmus bestimmt werden. Im Fall $q = \exp(\frac{\mathrm{i}\pi}{4})$ können zusätzlich die extrapolierten Resultate mit (2.49) verglichen werden, und man findet denselben Fehler.
Der Parameter $\omega$ des BST-Algorithmus wird hier für alle $\langle g_{k,l}\rangle$ izu einem Wert von $q$ fest gewählt; die Wahl von $\omega$ erfolgt dabei anhand der Extrapolationen mehrerer $\langle g_{k,l}\rangle_N$ mit kleinen $k$, $l$, für die die Werte einer möglichst großen Anzahl von Kettenlängen $N$ vorliegen. Diese Vorgehensweise, die davon ausgeht, daß das *finite-size* Verhalten von $\langle g_{k,l}\rangle_N$ für alle $k$ und $l$ gleich ist, führt zu genaueren Ergebnissen als eine für jedes $k$ und $l$ getrennte Bestimmung von $\omega$. Dies kann man anhand des Falls $q = \exp(\frac{\mathrm{i}\pi}{4})$ überprüfen.
Mit dem geschilderten Verfahren können also die Korrelationen $\langle g_{k,l}\rangle_\infty$ für die semi-infinite Kette mit $k, l \leq 18$ ($q = \exp(\frac{\mathrm{i}\pi}{6})$ und $q = \exp(\frac{\mathrm{i}\pi}{5})$) und $k, l \leq 14$ ($q = \exp(\frac{\mathrm{i}\pi 3}{5})$) berechnet werden. Diese Werte sowie die mit der Darstellung auf Liniendiagrammen für $q = \exp(\frac{\mathrm{i}\pi}{7})$ berechneten ($k, l \leq 14$) finden sich im Anhang.

## 6. Analyse der Gitter-Korrelationsfunktionen

In diesem Kapitel werden die numerisch berechneten Korrelationsfunktionen, d.h. die Grundzustandserwartungswerte $\langle g_{k,l}\rangle$, für $q = \exp(\frac{\mathrm{i}\pi}{4})$, $q = \exp(\frac{\mathrm{i}\pi}{6})$ und $q = \exp(\frac{\mathrm{i}\pi 3}{5})$ betrachtet. Der Fall $q = \exp(\frac{\mathrm{i}\pi}{4})$ wird dabei behandelt, um an dem (einzigen) Beispiel, für das (nicht verschwindende) Korrelationsfunktionen analytisch bekannt sind, die Möglichkeit einer Bestimmung der kritischen Exponenten aus den numerischen Werten zu untersuchen. Es wird versucht, die Vermutung (4.12) zu bestätigen, die impliziert, daß die konformen Operatoren zu den $g_{k,l}$ primäre Felder der Dimensionen $(\frac{m-1}{m+1}, 0)$ und $(0, \frac{m-1}{m+1})$ beinhalten (Abschnitt 4.3).
Im folgenden werden die für die semi-infinite Kette extrapolierten Erwartungswerte $\langle g_{k,l}\rangle_\infty$ betrachtet. Ihr Kontinuumslimes, d.h. $1 \ll k \ll l$, entspricht den Korrelationsfunktionen einer konformen Feldtheorie in der Halbebene. Es ist bekannt, daß die Zweipunktfunktionen $G_{HE}$ spinloser primärer Felder in der Halbebene $\{x + \mathrm{i}y \,|\, y \geq 0\}$ aufgrund des gegebenen Transformationsverhaltens unter einer speziellen konformen Abbildung, die den Rand der Halbebene $y = 0$ nicht verändert, die Form

$$G_{HE}(r_1 = x_1 + \mathrm{i}y_1, r_2 = x_2 + \mathrm{i}y_2) = \frac{\varphi\left(\left((x_1 - x_2)^2 + y_1^2 + y_2^2\right)/(y_1 y_2)\right)}{(y_1 y_2)^x} \tag{6.1}$$

haben, wenn man homogene Randbedingungen annimmt [12]. Dabei ist $x = h + \bar{h}$ der kritische Exponent für das *bulk*-Verhalten bei einem primären Feld mit konformen Dimensionen $h = \bar{h}$. Aus verschiedenen Ergebnissen über das Verhalten von Korrelationsfunktionen bei kritischen Systemen mit Rand und der Form von $G_{HE}$ folgt für die ansonsten unbekannte Funktion $\varphi$

$$\lim_{a\to\infty} \varphi(a)\, a^{x_s} = \text{const.} \ , \tag{6.2}$$

wobei $x_s$ den kritischen Exponent für das *surface*-Verhalten bezeichnet [12].
Hieraus erhält man für die entsprechende Korrelationsfunktion einer semi-infiniten Quantenspinkette im Kontinuumslimes die Form

$$G(k,l) = \frac{F\,(k/l)}{(l-k)^{2x}} \qquad \text{für } 1 \ll k \ll l \tag{6.3}$$

mit

$$F\left(\frac{k}{l}\right) \propto \left(\frac{k}{l}\right)^{x_s - x} \qquad \text{für } \frac{k}{l} \to 0 \ . \tag{6.4}$$

Im *bulk*-Limes ($k \to \infty$ mit $l - k \gg 1$ fest) wird $F$ konstant, vgl. (4.8). Ein solches Verhalten mit einer nur von $\frac{k}{l}$ abhängigen Skalenfunktion $F$ erwartet man auch für den allgemeinen Fall aufgrund von Skalenüberlegungen.

### *6.1.* $q = \exp(\frac{i\pi}{4})$ *(Isingmodell)*

Wie in Abschnitt (2.2) beschrieben, existieren für $q = \exp(\frac{i\pi}{4})$ die beiden verschiedenen, positiven Korrelationsfunktionen $\langle g_{2j,2k-1}\rangle$ und $\langle g_{2j-1,2k}\rangle$ (die anderen Korrelationen verschwinden). Diese können auch klar unterschieden werden, wenn man die numerisch berechneten $\langle g_{k,l}\rangle_N$ bzw. $\langle g_{k,l}\rangle_\infty$ aufträgt.
Aus der exakten Lösung (2.49) erhält man den kritischen Exponenten $x = \frac{1}{2}$, in Übereinstimmung mit (4.12). Die Skalenfunktionen sind durch

$$\begin{aligned} F_{2j,2k-1}(a) &= \frac{2\sqrt{2}}{\pi}\frac{1}{1+a} \\ F_{2j-1,2k}(a) &= \frac{2\sqrt{2}}{\pi}\frac{a}{1+a} \end{aligned} \tag{6.5}$$

gegeben, woraus sich $x_s = \frac{3}{2}$ für $\langle g_{2j,2k-1}\rangle$ und $x_s = \frac{1}{2}$ für $\langle g_{2j-1,2k}\rangle$ ergibt. Im Fall $q = \exp(\frac{i\pi}{4})$ gilt also die Form der Korrelationsfunktion (6.3) für alle Werte von $k$ und $l$, nicht erst im Kontinuumslimes $1 \ll k \ll l$.
Untersucht man die numerischen Ergebnisse $\langle g_{k,l}\rangle_\infty$, so kann man das Skalenverhalten von $F$ in Abbildung 1 erkennen. In dieser Abbildung sind Höhenlinien zu den Werten $\langle g_{k,l}\rangle_\infty (k-l)$ für die beiden Korrelationsfunktionen $\langle g_{2j,2k-1}\rangle$ und $\langle g_{2j-1,2k}\rangle$ gezeichnet. Um den Vergleich mit dem Fall $q = \exp(\frac{i\pi}{6})$ zu erleichtern, werden dazu die Werte $k < l \leq 18$ verwendet. Die Geraden durch den Ursprung implizieren, daß $F$ nur von $\frac{k}{l}$ abhängt. Nimmt man diese Abhängigkeit als exakt gegeben an, so kann man $x$ aus zwei

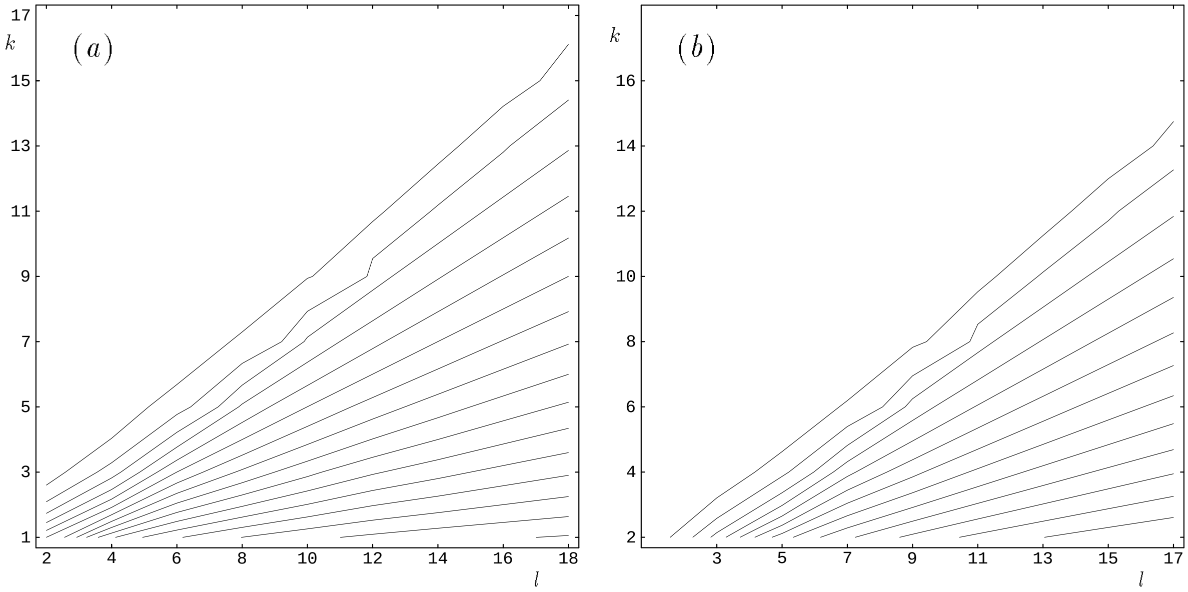



**Abbildung 1.** Höhenlinien für die numerisch berechneten Korrelationsfunktionen des semi-infiniten Gitters $\tilde{F} = \langle g_{k,l} \rangle_\infty (l-k)$ bei $q = \exp(\frac{\mathrm{i}\pi}{4})$, $k < l \leq 18$ mit

$(a)$ $k$ ungerade, $l$ gerade, Minimum $\tilde{F}(2,17) = 0.0948$, Maximum $\tilde{F}(16,17) = 0.4365$.
$(b)$ $k$ gerade, $l$ ungerade, Minimum $\tilde{F}(17,18) = 0.463$, Maximum $\tilde{F}(1,18) = 0.853$.
Der Abstand zwischen den Höhenlinien ist 0.25.

Werten $\langle g_{k_1,l_1} \rangle_\infty$ und $\langle g_{k_2,l_2} \rangle_\infty$ bestimmen:

$$x = -\frac{1}{2} \frac{\log \langle g_{k_1,l_1} \rangle_\infty - \log \langle g_{k_2,l_2} \rangle_\infty}{log\,(l_1 - k_1) - log\,(l_2 - k_2)} \qquad \text{für } \frac{k_1}{l_1} = \frac{k_2}{l_2}$$

In beiden Fällen findet man $x = 0.5000(1)$. Die *surface*-Exponenten hingegen können nur mit einer Genauigkeit von etwa 15% bestimmt werden, da der Grenzbereich in (6.4) nicht mit den Werten $k$ und $l$, für die die numerische Kalkulation von $\langle g_{k,l} \rangle$ möglich ist, erreicht wird.

### *6.2.* $q = \exp(\frac{\mathrm{i}\pi}{6})$ *(Pottsmodell)*

Als nächstes werden die Korrelationen $\langle g_{k,l} \rangle_\infty$ für den Fall $q = \exp(\frac{\mathrm{i}\pi}{6})$ analysiert, der bei Verwendung eines entsprechenden Quotienten der Temperley-Lieb-Algebra für $H$ ein 3-Zustands-Pottsmodell ergibt (Abschnitt 2.2). Die numerisch berechneten Korrelationen $\langle g_{k,l} \rangle$ sind positiv für $l-k$ gerade und ansonsten negativ.
Betrachtet man $|\langle g_{k,l} \rangle|$, so findet man, daß vier Korrelationsfunktionen unterschieden werden müssen: $|\langle g_{k,l} \rangle_\infty|$ zeigt verschiedenes Verhalten für gerade oder ungerade $k$ und $l$. Dies stimmt mit der Darstellung der $g_{k,l}$ als Produkt zweier parafermionische Operatoren an den Gitterplätzen $k$ und $l$ überein, die sich aus dem Potts-Quotienten ergibt. Bei dieser Darstellung werden ungeraden und geraden Gitterplätzen verschiedene Operatoren zugeordnet (Abschnitt 2.2).

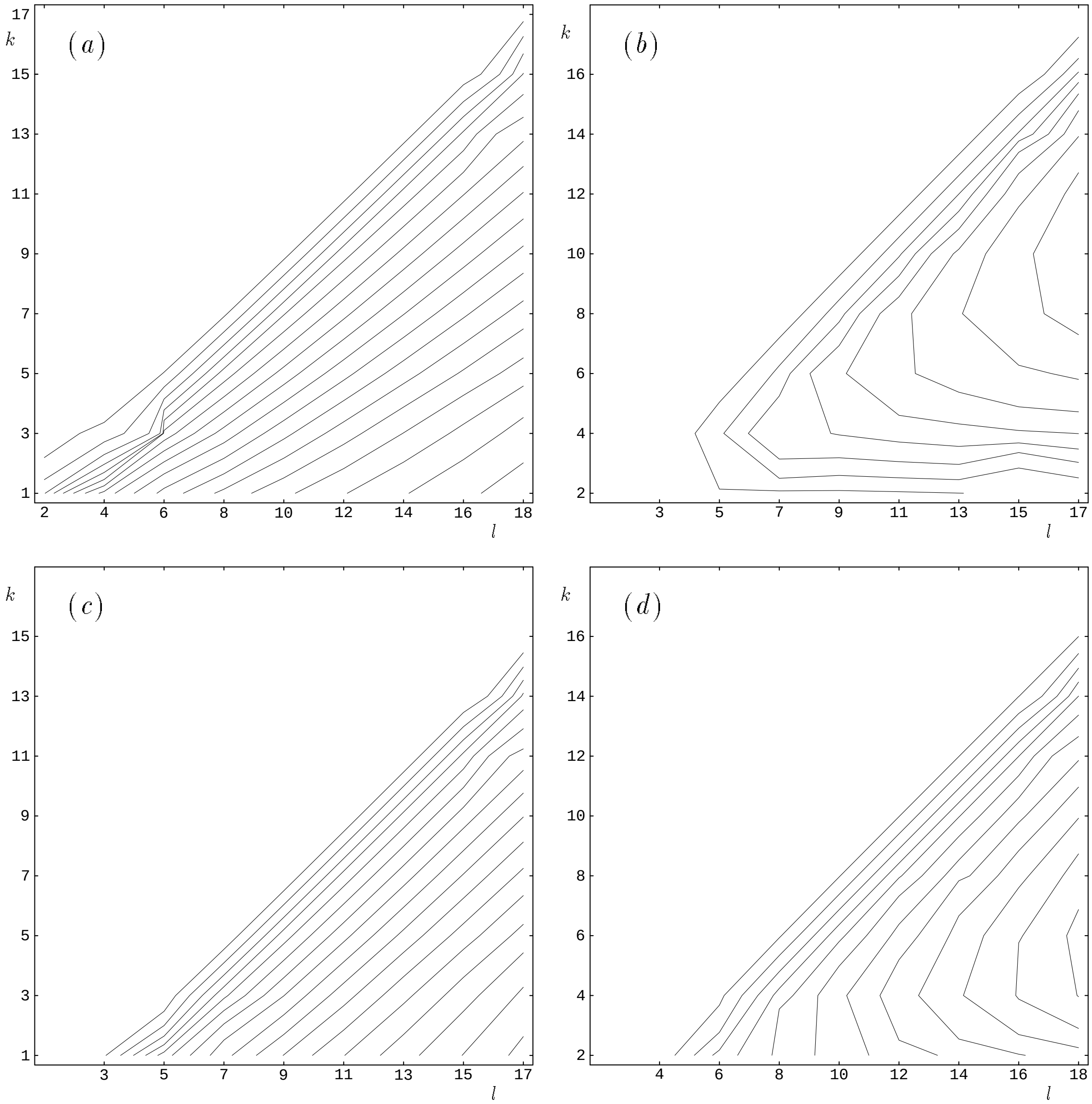



**Abbildung 2.** Höhenlinien für die numerisch berechneten Korrelationsfunktionen des semi-infiniten Gitters $\tilde{F} = \langle g_{k,l} \rangle_\infty (l-k)^{\frac{4}{3}}$ bei $q = \exp(\frac{i\pi}{6})$, $k < l \leq 18$ mit

$(a)$ $k$ ungerade, $l$ gerade, Minimum $\tilde{F}(17,18) = 0.744$, Maximum $\tilde{F}(1,18) = 2,55$.
$(b)$ $k$ gerade, $l$ ungerade, Minimum $\tilde{F}(2,3) = 0.514$, Maximum $\tilde{F}(8,17) = 0.935$.
$(c)$ $k$ ungerade, $l$ ungerade, Minimum $\tilde{F}(1,17) = -1,265$, Maximum $\tilde{F}(15,17) = -0.4024$.
$(d)$ $k$ gerade, $l$ gerade, Minimum $\tilde{F}(6,18) = -0.963$, Maximum $\tilde{F}(2,4) = -0.367$.

Der Abstand zwischen den Höhenlinien ist 0.1 für $(a)$ und 0.05 für $(b)$, $(c)$, $(d)$

Die unterschiedliche Form der vier verschiedenen Korrelationsfunktionen läßt sich besonders gut erkennen, wenn man die Funktion $\tilde{F}(k,l) = \langle g_{k,l}\rangle_\infty (k-l)^{\frac{4}{3}}$ betrachtet. ($\tilde{F}$ geht im Kontinuumsbereich in die Skalenfunktion $F(\frac{k}{l})$ über, wenn die Vermutung $x = h_{1,3} = \frac{2}{3}$ zutrifft.) In Abbildung 2 sieht man einen unterschiedlichen Verlauf der Höhenlinien von $\tilde{F}$ für $k$ und $l$ gerade bzw. ungerade; darüberhinaus sind die Wertebereiche unterschiedlich. Man erkennt, daß sich ohne die Unterscheidung vier verschiedener Funktionen kein glatter Verlauf von $\tilde{F}(k,l)$ ergeben würde.
Anhand Abbildung 2 erkennt man ebenfalls, daß für $k < l \leq 18$ (für die die Werte $\langle g_{k,l}\rangle_\infty$ bestimmt werden können) keine der vier Funktionen $\tilde{F}$ skaliert, d.h. sich als Funktion von $\frac{k}{l}$ beschreiben läßt: In keiner der vier Abbildungen lassen sich Ursprungsgeraden erkennen. (Man betrachte dazu insbesondere den Bereich $1 \ll k \ll l$.) Auf gleiche Weise zeigt sich, daß sich auch für alle anderen Werte von $x$ keine Skalenfunktion $F$ (6.3) ergibt.
Eine weitere Möglichkeit der Bestimmung des kritischen Exponenten $x$ ergibt sich, wenn man die Werte $\langle g_{k,l}\rangle_N$ zu den Korrelationen der unendlichen Kette extrapoliert. Dafür hält man nicht wie bei der Extrapolation zu $\langle g_{k,l}\rangle_\infty$ ein Ende der Kette fest (5.7), sondern extrapoliert so, daß der Einfluß beider Ränder auf die Korrelationsfunktion verschwindet (aus solchen Werten kann man selbstverständlich kein *surface*-Verhalten mehr bestimmen). Sei $N_{max}$ die maximale Kettenlänge, für die ein Wert $\langle g_{k',l'}\rangle_{N_{max}}$ vorliegt. Die Extrapolation erfolgt dann mit denjenigen Werten $\langle g_{k,l}\rangle_N$ anderer

Kettenlängen $N$, für die gilt

$$\frac{N_{max}}{2} - k' = \frac{N}{2} - k \qquad (k'-k) \text{ gerade} \qquad k' \geq 1 \tag{6.6}$$

$$\frac{N_{max}}{2} - l' = \frac{N}{2} - l \qquad (l'-l) \text{ gerade} \qquad l' \leq N \ . \tag{6.7}$$

Die jeweils erste Bedingung an $k$ bzw. $l$ ergibt einen gleichmäßig verschwindenden Einfluß beider Ränder der Quantenspinkette. Die zweite Bedingung ist nötig aufgrund des unterschiedlichen Verhaltens der Korrelationsfunktionen für gerade und ungerade Gitterplätze. Bezeichnet man das Ergebnis einer solchen Extrapolation mit $\langle g_{k',l'}\rangle'_\infty$, so erfüllen diese für $l'-k' \gg 1$, d.h. falls sie das Kontinuumsverhalten approximieren,

$$\langle g_{k,l}\rangle'_\infty = \frac{\text{const.}}{(l'-k')^{2x}} \tag{6.8}$$

Da nur die Hälfte der verschiedenen Gitter für die Berechnung von $\langle g_{k',l'}\rangle'_\infty$ zur Verfügung steht, ist diese Extrapolation nicht so genau wie die durch (5.7) definierte zu den Werten der semi-infiniten Kette.
Im Isingfall gilt (6.8) bereits für beliebig kleine $l'-k'$. Man erhält, wie aus den $\langle g_{k,l}\rangle_\infty$, $x = 0.500(1)$. Mit $q = \exp(\frac{i\pi}{6})$ hingegen ist die Form (6.8) für die erreichbaren Abstände $l'-k'$ nicht erfüllt, so daß auch auf diesem Weg $x$ nicht berechnet werden kann.
Zusammenfassend ergibt sich also, daß die kritischen Exponenten für *bulk*- und *surface*-Verhalten im Fall $q = \exp(\frac{i\pi}{6})$ nicht bestimmt werden können. Die Ursache liegt nicht in Ungenauigkeiten der numerischen Berechnug von $\langle g_{k,l}\rangle$ oder der Extrapolation zu $\langle g_{k,l}\rangle_\infty$ bzw. $\langle g_{k,l}\rangle'_\infty$, sondern in der Tatsache, daß in diesem Fall die Gitterlänge nicht ausreicht, um den Kontinuumslimes (6.3) zu erreichen.

### *6.3.* $q = \exp(\frac{i\pi 3}{5})$ *(Lee-Yang-Singularität)*

In diesem Fall entspricht der Hamiltonoperator $H$ einem minimalem Modell mit zentraler Ladung $c = -\frac{22}{5}$. Dies ist die zentrale Ladung der Feldtheorie, die der Lee-Yang-Singularität eines Isingmodells in einem imaginären magnetischen Feld entspricht [57]. Das nichtunitäre minimale Modell mit $c = -\frac{22}{5}$ besitzt nur einen primären Operator außer der Identität, dessen konforme Dimension durch $h = -\frac{1}{5}$ gegeben ist. Dies ist gerade die Dimension, die als kritischer Exponent für das *bulk*-Verhalten erwartet wird (4.12).
Die Korrelationen $\langle g_{k,l}\rangle$ haben für $q = \exp(\frac{i\pi 3}{5})$ andere Eigenschaften als für die minimalen Modelle mit $q = \exp(\frac{i\pi}{4})$ und $q = \exp(\frac{i\pi}{6})$. Es existiert nur eine (positive) Korrelationsfunktion $\langle g_{k,l}\rangle$ unabhängig davon, ob $k$ und $l$ gerade oder ungerade sind. Diese Korrelationsfunktion wächst mit dem Abstand $l-k$ entsprechend einem negativem kritischen Exponenten. In Abbildung 3 werden Höhenlinien für alle Werte $\tilde{F}(k,l) = \langle g_{k,l}\rangle_\infty (l-k)^{-2/5}$ mit $k < l \leq 14$ gezeigt. Gittereinflüsse finden sich für $k \leq 3$ und $l-k \leq 4$, aber die Funktion $\tilde{F}$ wird konstant für $k \gg 1$ und $l-k \gg 1$. Daher kann man für den Kontinuumslimes $F = F\left(\frac{k}{l}\right) = \text{const.}$ erwarten, was gemäß (6.4) $x_s = x$ ergibt. Nimmt man eine konstante Skalenfunktion $F$ für $k > 3$ und $l-k > 4$ an, so kann man Gleichung (6.3) zur Bestimmung von $x$ benutzen und erhält $x = -0.20(1)$ und damit

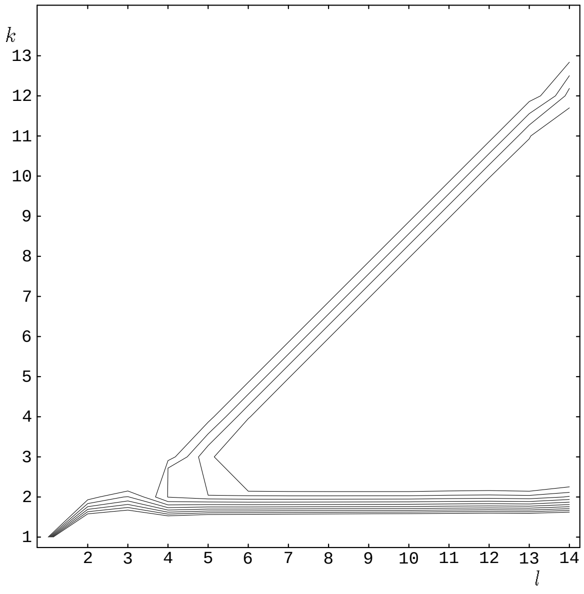



**Abbildung 3.** Höhenlinien für die numerisch berechneten Korrelationsfunktionen des semi-infiniten Gitters $\tilde{F} = \langle g_{k,l} \rangle_\infty (l-k)^{-\frac{2}{5}}$ bei $q = \exp(\frac{i\pi 3}{5})$, $k < l \leq 18$. Der Abstand zwischen den Höhenlinien ist 0.01. Minimum $\tilde{F}(1,14) = 0.627$, Maximum $\tilde{F}(13,14) = 2.04$.

auch $x_s = -0.2$. Dies verifiziert die Vermutung (4.12) für den Fall $q = \exp(\frac{i\pi 3}{5})$.

## 7. Zusammenfassung der Ergebnisse

Gegenstand dieser Arbeit ist eine auf graphischen Darstellungen der Temperley-Lieb-Algebra basierende, numerische Untersuchung von Korrelationsfunktionen für eine Klasse von eindimensionalen Modellen, die durch einen als (negative) Summe aller Generatoren gegebenen kritischen Hamiltonoperator beschrieben werden.
Für eine spezielle Darstellung der Temperley-Lieb-Algebra entsprechen die betrachteten Zweipunktoperatoren $U_qSU(2)$ invarianten Verallgemeinerungen der skalaren Kombination zweier $SU(2)$ Vektoroperatoren, d.h. des Skalarprodukts von Vektoren von Paulimatrizen; der Hamiltonoperator wird zu einer $U_qSU(2)$ invarianten $XXZ$-Quantenspinkette. Der Kontinuumslimes der Gitterkorrelationsfunktionen entspricht Zweipunktfunktionen einer zweidimensionalen konformen Feldtheorie mit Rand und zentraler Ladung $c$ in Abhängigkeit des in die Temperley-Lieb-Relation (1.2) eingehenden Parameters $q = \exp(\frac{i\pi}{m+1})$ (1.7). Mit der Untersuchung sollte versucht werden, kritische Exponenten zu bestimmen und damit Aussagen über die quantenfeldtheoretische Entsprechung der betrachteten Zweipunktoperatoren zu machen. Dies ist teilweise möglich.
Die graphischen Darstellungsräume der Temperley-Lieb-Algebra können zur Berechnung der Korrelationsfunktionen so (klein) gewählt werden, daß es möglich wird, bis zu 28 Gitterplätze zu behandeln, obwohl keine periodischen Randbedingungen vorliegen.

Dies entspricht den bisher größten $XXZ$-Ketten, für die überhaupt numerische Ergebnisse über Korrelationsfunktionen vorliegen. Die nicht lokale Struktur der Zweipunktoperatoren erfordert dabei eine rekursive Vorgehensweise bei der Berechnung der einzelnen Erwartungswerte.

Die Gitter-Korrelationsfunktionen haben in Abhängigkeit von $q = \exp(\frac{\mathrm{i}\pi}{m+1})$ unterschiedliche Eigenschaften. Für $q = \exp(\frac{\mathrm{i}\pi}{4})$, den einzigen nichttrivialen Fall, für den die Korrelationsfunktionen analytisch bekannt sind, findet man zwei verschiedene positive Funktionen $\langle g_{2j,2k-1}\rangle$ und $\langle g_{2j-1,2k}\rangle$, während die anderen Korrelationen verschwinden. Es ist weiterhin bekannt, daß in diesem Fall die Zweipunktoperatoren Linearkombinationen von Produkten konformer Felder mit Dimension $(h,\bar{h}) = (\frac{1}{2},0)$ und $(0,\frac{1}{2})$ entsprechen ($c = \frac{1}{2}$, Universalitätsklasse des Isingmodells) [1]. Auf dem Gitter erhält man bereits für beliebig kleine Abstände die Kontinuumsform der Korrelationsfunktionen und kann so auch aus numerischen Ergebnissen für kleine Kettenlängen den kritischen Exponenten für das *bulk*-Verhalten als $x = 0.500$ bestimmen.

Aufgrund diese Beispiels und einer Symmetrieeigenschaft der Zweipunktoperatoren erwartet man allgemein für $q = \exp(\frac{\mathrm{i}\pi}{m+1})$ den kritischen Exponenten $x = \frac{m-1}{m+1}$, wodurch impliziert wird, daß die Zweipunktfunktionen im Kontinuum durch Produkte konformer Felder der Dimension $(h,\bar{h}) = (\frac{m-1}{m+1},0)$ und $(0,\frac{m-1}{m+1})$ gegeben sind.

Für $q = \exp(\frac{\mathrm{i}\pi 3}{5})$, entsprechend dem nichtunitären minimalen Modell mit $c = -\frac{22}{5}$ (Universalitätsklasse der Lee-Yang-Singularität), kann dies numerisch bestätigt werden. Man findet eine positive Korrelationsfunktion, deren *surface*- und *bulk*-Exponent zu $-0.20$ bestimmt werden kann.

Für den Fall $q = \exp(\frac{\mathrm{i}\pi}{6})$ hingegen, der einem 3-Zustands-Pottsmodell und $c = \frac{4}{5}$ entspricht, ist es nicht möglich, mit den verfügbaren numerischen Daten von Ketten bis zu 28 Gitterplätzen Informationen über den Kontinuumslimes zu finden. Die Korrelationsfunktionen werden durch Gittereffekte dominiert. Insbesondere läßt sich also auf diese Weise nicht bestimmen, welchen konformen Operatoren die Gitter-Parafermionen entsprechen, die bei einer Quotienten-Darstellung der Temperley-Lieb-Algbra für $q = \exp(\frac{\mathrm{i}\pi}{6})$ auftreten [1].

In dieser Arbeit werden die Ergebnisse, die für eine Reihe andere $q = \exp(\frac{\mathrm{i}\pi}{m+1})$ berechnet worden sind, nicht analysiert, aber es soll angemerkt werden, daß auch für andere ganzzahlige $m$ das Verhalten der Korrelationsfunktionen durch Gittereinflüsse bestimmt ist. Für $q = \exp(\frac{\mathrm{i}\pi}{5})$ und $q = \exp(\frac{\mathrm{i}\pi}{7})$ ergeben sich ähnliche Diagramme wie in Abbildung 2 für $q = \exp(\frac{\mathrm{i}\pi}{6})$. Daraus ersieht man, daß auch für diese Fälle keine kritischen Exponenten aus den Gitterwerten bestimmt werden können.

Im allgemeinen bleibt das Problem offen, die feldtheoretische Entsprechung der in dieser Arbeit betrachteten Zweipunktoperatoren zu finden.

**Dank**

Ich möchte mich zuerst bei Professor Dr. Vladimir Rittenberg für seine andauernde intensive und hilfreiche Betreuung bedanken und bei Peter Arndt für die gute Zusammenarbeit während der letzten zwei Jahre (auch schon vor Beginn der Diplomarbeit). Darüberhinaus danke ich den Mitgliedern der Theoriegruppe für Unterstützung bei den verschiedensten Problemen und die freundliche Atmosphäre, insbesondere Dr. Fabian Eßler und Klaus Krebs für viele wertvolle Hinweise.

## Anhang: Numerische Daten

Im folgenden finden sich zunächst Tabellen der für die semi-infinite Kette extrapolierten Korrelationsfunktionen $\langle g_{k,l}\rangle_\infty$ zu den Werten $q = \exp(\frac{\mathrm{i}\pi 3}{5})$ ($N_{max} = 24$), $q = \exp(\frac{\mathrm{i}\pi}{5})$ ($N_{max} = 28$), $q = \exp(\frac{\mathrm{i}\pi}{6})$ ($N_{max} = 28$) und $q = \exp(\frac{\mathrm{i}\pi}{7})$ ($N_{max} = 24$) (Tabelle 1 bis 4). Hierbei bezeichnet $N_{max}$ die maximale untersuchte Gitterlänge. Die Werte der semi-infiniten Quantenspinkette können für $k, l \leq N_{max} - 10$ berechnet werden, wenn man sechs Startwerte für die Extrapolation mit dem BST-Algorithmus verwendet. Gemäß der Fehlerabschätzung in Kapitel (5) sind dann die $\langle g_{k,l}\rangle_\infty$ auf die hier angegebenen vier signifikanten Stellen genau. Aus den aufgelisteten Werten mit $k < l$ finden sich mittels $g_{l,k} = q^{-4} g_{k,l}$ alle weiteren.
Im Anschluß werden die numerisch bestimmten Grundzustandserwartungswerte $\langle g_{k,l}\rangle_N$, $k < l$ für die Gitterlänge $N = 24$ und wiederum $q = \exp(\frac{\mathrm{i}\pi 3}{5})$, $\exp(\frac{\mathrm{i}\pi}{5})$, $\exp(\frac{\mathrm{i}\pi}{6})$ bzw. $\exp(\frac{\mathrm{i}\pi}{7})$ zusammengestellt (Tabelle 5 bis 8). Das Vorzeichen der Erwartungswerte wird dort nicht mit angegeben, es ist stets positiv für $l - k$ ungerade und ansonsten negativ außer im Fall $q = \exp(\frac{\mathrm{i}\pi 3}{5})$ wo alle Erwartungswerte positiv sind. Für diese Gitterlänge können (mit der Darstellung auf Liniendiagrammen) die Korrelationsfunktionen zu beliebigen Werten von $q$ berechnet werden. Aufgrund der Symmetrie (4.7) und $g_{l,k} = q^{-4} g_{k,l}$ für $k < l$ reicht es für endliche Gitter aus, die Werte mit $k < l$ und $k + l \leq N + 1$ aufzulisten. Es werden elf Stellen von $\langle g_{k,l}\rangle_N$ angegeben, die gemäß der Fehlerbestimmung in Kapitel 5 signifikant sind.

**Tabelle 1.** $q = \exp(\frac{\mathrm{i}\pi 3}{5})$ entsprechend $c = -\frac{22}{5}$
Korrelationen $\langle g_{k,l}\rangle_\infty$ für die semi-infinite Quantenspinkette mit $k < l \leq 14$.
Die angegebenen Werte wurden von Gittern mit $2, 4, \ldots, 24$ Gitterplätzen extrapoliert.

| $k \setminus l$ | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 | 9 | 10 | 11 | 12 | 13 | 14 |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 1 | 1.81 | 2.392 | 2.788 | 3.108 | 3.384 | 3.629 | 3.85 | 4.054 | 4.244 | 4.418 | 4.578 | 4.746 | 4.879 |
| 2 | | 2.026 | 2.714 | 3.2 | 3.592 | 3.928 | 4.225 | 4.494 | 4.74 | 4.965 | 5.177 | 5.381 | 5.551 |
| 3 | | | 2.041 | 2.737 | 3.23 | 3.627 | 3.968 | 4.269 | 4.541 | 4.788 | 5.015 | 5.236 | 5.42 |
| 4 | | | | 2.042 | 2.739 | 3.232 | 3.63 | 3.971 | 4.272 | 4.543 | 4.793 | 5.024 | 5.224 |
| 5 | | | | | 2.043 | 2.739 | 3.232 | 3.63 | 3.971 | 4.272 | 4.544 | 4.793 | 5.012 |
| 6 | | | | | | 2.043 | 2.739 | 3.232 | 3.631 | 3.971 | 4.272 | 4.544 | 4.784 |
| 7 | | | | | | | 2.043 | 2.739 | 3.232 | 3.63 | 3.971 | 4.272 | 4.544 |
| 8 | | | | | | | | 2.043 | 2.739 | 3.232 | 3.63 | 3.97 | 4.27 |
| 9 | | | | | | | | | 2.043 | 2.739 | 3.232 | 3.63 | 3.971 |
| 10 | | | | | | | | | | 2.043 | 2.739 | 3.232 | 3.63 |
| 11 | | | | | | | | | | | 2.043 | 2.739 | 3.231 |
| 12 | | | | | | | | | | | | 2.043 | 2.734 |
| 13 | | | | | | | | | | | | | 2.043 |

**Tabelle 2.** $q = \exp(\frac{i\pi}{5})$ entsprechend $c = \frac{7}{10}$
Korrelationen $\langle g_{k,l} \rangle_\infty$ für die semi-infinite Quantenspinkette mit $k < l \leq 18$.
Die angegebenen Werte wurden von Gittern mit $2, 4, \ldots, 28$ Gitterplätzen extrapoliert.

| $k \setminus l$ | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 | 9 | 10 |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 1 | 0.8541 | −0.1002 | 0.3172 | −0.06237 | 0.1954 | −0.04574 | 0.1404 | −0.03625 | 0.1091 |
| 2 | | 0.4671 | −0.08307 | 0.1083 | −0.04768 | 0.05156 | −0.03319 | 0.0312 | −0.0253 |
| 3 | | | 0.7311 | −0.09323 | 0.2703 | −0.05831 | 0.1713 | −0.0433 | 0.1263 |
| 4 | | | | 0.5271 | −0.08763 | 0.1378 | −0.05217 | 0.06987 | −0.03724 |
| 5 | | | | | 0.6946 | −0.09167 | 0.2509 | −0.057 | 0.1589 |
| 6 | | | | | | 0.5518 | −0.08885 | 0.1521 | −0.05357 |
| 7 | | | | | | | 0.6766 | −0.09107 | 0.2401 |
| 8 | | | | | | | | 0.5655 | −0.08936 |
| 9 | | | | | | | | | 0.6658 |

| $k \setminus l$ | 11 | 12 | 13 | 14 | 15 | 16 | 17 | 18 |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 1 | −0.03008 | 0.08891 | −0.02574 | 0.07483 | −0.0225 | 0.06451 | −0.02 | 0.05655 |
| 2 | 0.02139 | −0.02035 | 0.01584 | −0.01696 | 0.01237 | −0.01451 | 0.01003 | −0.01265 |
| 3 | −0.03472 | 0.1001 | −0.02911 | 0.0829 | −0.02511 | 0.07068 | −0.02212 | 0.06158 |
| 4 | 0.04385 | −0.02893 | 0.0307 | −0.0236 | 0.02305 | −0.0199 | 0.01812 | −0.01718 |
| 5 | −0.04229 | 0.1177 | −0.03396 | 0.09395 | −0.02852 | 0.07832 | −0.02467 | 0.0672 |
| 6 | 0.07981 | −0.03866 | 0.05125 | −0.0303 | 0.03649 | −0.02491 | 0.02769 | −0.02114 |
| 7 | −0.0564 | 0.1513 | −0.04177 | 0.1121 | −0.03352 | 0.08964 | −0.02817 | 0.07497 |
| 8 | 0.1607 | −0.0542 | 0.08614 | −0.03934 | 0.05618 | −0.03099 | 0.04046 | −0.02559 |
| 9 | −0.09077 | 0.2332 | −0.05608 | 0.1462 | −0.04146 | 0.1081 | −0.03325 | 0.08648 |
| 10 | 0.5742 | −0.08962 | 0.1665 | −0.05454 | 0.09053 | −0.03971 | 0.05971 | −0.03138 |
| 11 | | 0.6585 | −0.0906 | 0.2283 | −0.05588 | 0.1425 | −0.04127 | 0.1052 |
| 12 | | | 0.5804 | −0.08977 | 0.1706 | −0.05474 | 0.09379 | −0.03994 |
| 13 | | | | 0.6533 | −0.0905 | 0.2247 | −0.05576 | 0.1397 |
| 14 | | | | | 0.5849 | −0.08986 | 0.1738 | −0.05487 |
| 15 | | | | | | 0.6493 | −0.09042 | 0.222 |
| 16 | | | | | | | 0.5884 | −0.08993 |
| 17 | | | | | | | | 0.6462 |

**Tabelle 3.** $q = \exp(\frac{i\pi}{6})$ entsprechend $c = \frac{4}{5}$
Korrelationen $\langle g_{k,l} \rangle_\infty$ für die semi-infinite Quantenspinkette mit $k < l \leq 18$.
Die angegebenen Werte wurden von Gittern mit $2, 4, \ldots, 28$ Gitterplätzen extrapoliert.

| $k \setminus l$ | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 | 9 | 10 |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 1 | 0.9907 | −0.1764 | 0.3546 | −0.1064 | 0.2139 | −0.07631 | 0.1514 | −0.05946 | 0.1162 |
| 2 | | 0.5136 | −0.1458 | 0.1247 | −0.08158 | 0.06304 | −0.05589 | 0.04036 | −0.04212 |
| 3 | | | 0.8489 | −0.1647 | 0.3074 | −0.1004 | 0.1918 | −0.0733 | 0.1397 |
| 4 | | | | 0.584 | −0.1542 | 0.156 | −0.08962 | 0.0822 | −0.06306 |
| 5 | | | | | 0.8051 | −0.162 | 0.287 | −0.09839 | 0.1798 |
| 6 | | | | | | 0.6139 | −0.1566 | 0.1714 | −0.09219 |
| 7 | | | | | | | 0.783 | −0.1609 | 0.2755 |
| 8 | | | | | | | | 0.6309 | −0.1575 |
| 9 | | | | | | | | | 0.7694 |

| $k \setminus l$ | 11 | 12 | 13 | 14 | 15 | 16 | 17 | 18 |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 1 | −0.04866 | 0.09376 | −0.04115 | 0.07825 | −0.03561 | 0.06696 | −0.03138 | 0.05834 |
| 2 | 0.02907 | −0.03358 | 0.02246 | −0.02778 | 0.01819 | −0.02361 | 0.01522 | −0.02047 |
| 3 | −0.05799 | 0.1096 | −0.04806 | 0.09002 | −0.04106 | 0.07617 | −0.03586 | 0.06595 |
| 4 | 0.05365 | −0.04847 | 0.03902 | −0.03923 | 0.03028 | −0.03285 | 0.02456 | −0.02819 |
| 5 | −0.0719 | 0.1319 | −0.05707 | 0.1044 | −0.04748 | 0.08643 | −0.04073 | 0.07369 |
| 6 | 0.0925 | −0.06561 | 0.06122 | −0.05092 | 0.0449 | −0.04155 | 0.03504 | −0.03504 |
| 7 | −0.09741 | 0.1722 | −0.07113 | 0.1267 | −0.05649 | 0.1006 | −0.04706 | 0.08364 |
| 8 | 0.1808 | −0.09336 | 0.09908 | −0.06684 | 0.06623 | −0.05215 | 0.04891 | −0.04276 |
| 9 | −0.1603 | 0.2679 | −0.09687 | 0.167 | −0.07072 | 0.1228 | −0.05611 | 0.0977 |
| 10 | 0.642 | −0.158 | 0.1872 | −0.09399 | 0.1037 | −0.06753 | 0.06984 | −0.05287 |
| 11 | | 0.7602 | −0.16 | 0.2626 | −0.09654 | 0.1632 | −0.07037 | 0.1199 |
| 12 | | | 0.6499 | −0.1583 | 0.1918 | −0.09437 | 0.1071 | −0.06796 |
| 13 | | | | 0.7534 | −0.1598 | 0.2586 | −0.09632 | 0.1603 |
| 14 | | | | | 0.6557 | −0.1585 | 0.1954 | −0.09462 |
| 15 | | | | | | 0.7482 | −0.1597 | 0.2555 |
| 16 | | | | | | | 0.6604 | −0.1587 |
| 17 | | | | | | | | 0.7441 |

**Tabelle 4.** $q = \exp(\frac{\mathrm{i}\pi}{7})$ entsprechend $c = \frac{6}{7}$
Korrelationen $\langle g_{k,l} \rangle_\infty$ für die semi-infinite Quantenspinkette mit $k < l \leq 14$.
Die angegebenen Werte wurden von Gittern mit $2, 4, \ldots, 24$ Gitterplätzen extrapoliert.

| $k \setminus l$ | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | 7 | 8 |
|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 1 | 1.073 | −0.2291 | 0.3761 | −0.1355 | 0.224 | −0.09584 | 0.1571 |
| 2 | | 0.538 | −0.1892 | 0.1371 | −0.1042 | 0.07249 | −0.07075 |
| 3 | | | 0.9206 | −0.2144 | 0.3297 | −0.1287 | 0.2039 |
| 4 | | | | 0.6145 | −0.2004 | 0.1691 | −0.1148 |
| 5 | | | | | 0.8725 | −0.2109 | 0.3094 |
| 6 | | | | | | 0.6476 | −0.2036 |
| 7 | | | | | | | 0.8479 |

| $k \setminus l$ | 9 | 10 | 11 | 12 | 13 | 14 |
|---|---|---|---|---|---|---|
| 1 | −0.07388 | 0.1197 | −0.05993 | 0.09603 | −0.0503 | 0.07975 |
| 2 | 0.04802 | −0.05295 | 0.03549 | −0.04199 | 0.02797 | −0.0346 |
| 3 | −0.09293 | 0.1474 | −0.0729 | 0.115 | −0.05998 | 0.09398 |
| 4 | 0.09202 | −0.08007 | 0.06174 | −0.06118 | 0.04593 | −0.0494 |
| 5 | −0.1263 | 0.1926 | −0.09144 | 0.1405 | −0.07205 | 0.1107 |
| 6 | 0.1849 | −0.1182 | 0.1024 | −0.08343 | 0.06932 | −0.06438 |
| 7 | −0.2095 | 0.2976 | −0.1251 | 0.1853 | −0.09058 | 0.1357 |
| 8 | 0.6666 | −0.2049 | 0.1947 | −0.1198 | 0.1089 | −0.08506 |
| 9 | | 0.8326 | −0.2088 | 0.2899 | −0.1245 | 0.1803 |
| 10 | | | 0.6792 | −0.2056 | 0.2012 | −0.1206 |
| 11 | | | | 0.8221 | −0.2083 | 0.2844 |
| 12 | | | | | 0.6881 | −0.206 |
| 13 | | | | | | 0.8144 |

**Tabelle 5.** $q = \exp(\frac{i\pi 3}{5})$ entsprechend $c = -\frac{22}{5}$
Korrelationen $\langle g_{k,l} \rangle_{24}$ für Quantenspinkette mit $N = 24$ Gitterplätzen.

| k | l | $\langle g_{k,l} \rangle_{24}$ | k | l | $\langle g_{k,l} \rangle_{24}$ | k | l | $\langle g_{k,l} \rangle_{24}$ |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 1 | 2 | 1.8083352502 | 1 | 3 | 2.3867824359 | 1 | 4 | 2.777658609 |
| 1 | 5 | 3.0897095285 | 1 | 6 | 3.3539335684 | 1 | 7 | 3.5840348241 |
| 1 | 8 | 3.7876506676 | 1 | 9 | 3.9695684682 | 1 | 10 | 4.133009299 |
| 1 | 11 | 4.2802479313 | 1 | 12 | 4.4129485321 | 1 | 13 | 4.5323611273 |
| 1 | 14 | 4.6394433414 | 1 | 15 | 4.7349390991 | 1 | 16 | 4.8194309247 |
| 1 | 17 | 4.8933747722 | 1 | 18 | 4.9571215201 | 1 | 19 | 5.0109237856 |
| 1 | 20 | 5.0549055538 | 1 | 21 | 5.0887770965 | 1 | 22 | 5.1086633805 |
| 1 | 23 | 5.0657493532 | 1 | 24 | 4.2829650854 | 2 | 3 | 2.024261616 |
| 2 | 4 | 2.7094701971 | 2 | 5 | 3.1898873602 | 2 | 6 | 3.5733433145 |
| 2 | 7 | 3.8968347552 | 2 | 8 | 4.1777393113 | 2 | 9 | 4.4258333623 |
| 2 | 10 | 4.6472307464 | 2 | 11 | 4.8460273679 | 2 | 12 | 5.0251035354 |
| 2 | 13 | 5.1865583795 | 2 | 14 | 5.3319633284 | 2 | 15 | 5.4625184725 |
| 2 | 16 | 5.5791529565 | 2 | 17 | 5.6825907072 | 2 | 18 | 5.7733921367 |
| 2 | 19 | 5.8519735479 | 2 | 20 | 5.9185799688 | 2 | 21 | 5.9729581748 |
| 2 | 22 | 6.0106416093 | 2 | 23 | 5.9743026825 | 3 | 4 | 2.0396856517 |
| 3 | 5 | 2.7326413364 | 3 | 6 | 3.2196448248 | 3 | 7 | 3.6084244915 |
| 3 | 8 | 3.9363868858 | 3 | 9 | 4.2211591245 | 3 | 10 | 4.4726631858 |
| 3 | 11 | 4.6971040678 | 3 | 12 | 4.8986384509 | 3 | 13 | 5.0801890065 |
| 3 | 14 | 5.2438852088 | 3 | 15 | 5.3913203468 | 3 | 16 | 5.5237096918 |
| 3 | 17 | 5.6419912152 | 3 | 18 | 5.7468894744 | 3 | 19 | 5.8389497048 |
| 3 | 20 | 5.9185209189 | 3 | 21 | 5.9854367012 | 3 | 22 | 6.0352998679 |
| 4 | 5 | 2.0408322921 | 4 | 6 | 2.7344379393 | 4 | 7 | 3.2220286068 |
| 4 | 8 | 3.6113102066 | 4 | 9 | 3.9397123062 | 4 | 10 | 4.2248770604 |
| 4 | 11 | 4.4767355267 | 4 | 12 | 4.701498498 | 4 | 13 | 4.9033264388 |
| 4 | 14 | 5.0851443377 | 4 | 15 | 5.2490826309 | 4 | 16 | 5.3967339112 |
| 4 | 17 | 5.5293100904 | 4 | 18 | 5.6477404576 | 4 | 19 | 5.7527275781 |
| 4 | 20 | 5.8447454945 | 4 | 21 | 5.9237351756 | 5 | 6 | 2.040928503 |
| 5 | 7 | 2.7346160846 | 5 | 8 | 3.2222943648 | 5 | 9 | 3.6116614163 |
| 5 | 10 | 3.9401453221 | 5 | 11 | 4.2253876387 | 5 | 12 | 4.4773190191 |
| 5 | 13 | 4.7021498073 | 5 | 14 | 4.9040397688 | 5 | 15 | 5.0859126533 |
| 5 | 16 | 5.2498965915 | 5 | 17 | 5.3975796886 | 5 | 18 | 5.5301645201 |
| 5 | 19 | 5.6485583733 | 5 | 20 | 5.7533940556 | 6 | 7 | 2.040940966 |
| 6 | 8 | 2.7346496331 | 6 | 9 | 3.2223548787 | 6 | 10 | 3.6117513163 |
| 6 | 11 | 3.9402651799 | 6 | 12 | 4.2255368372 | 6 | 13 | 4.477495972 |
| 6 | 14 | 4.7023518746 | 6 | 15 | 4.904262843 | 6 | 16 | 5.0861502111 |
| 6 | 17 | 5.250137658 | 6 | 18 | 5.3978042234 | 6 | 19 | 5.5303312342 |
| 7 | 8 | 2.040944425 | 7 | 9 | 2.7346620257 | 7 | 10 | 3.2223796933 |
| 7 | 11 | 3.6117902539 | 7 | 12 | 3.940318685 | 7 | 13 | 4.2256043316 |
| 7 | 14 | 4.4775758039 | 7 | 15 | 4.702440948 | 7 | 16 | 4.9043557339 |
| 7 | 17 | 5.0862372438 | 7 | 18 | 5.2502005074 | 8 | 9 | 2.0409459865 |
| 8 | 10 | 2.7346681654 | 8 | 11 | 3.2223923815 | 8 | 12 | 3.6118103656 |
| 8 | 13 | 3.9403461205 | 8 | 14 | 4.2256379617 | 8 | 15 | 4.4776131274 |
| 8 | 16 | 4.7024772665 | 8 | 17 | 4.9043823389 | 9 | 10 | 2.0409468149 |
| 9 | 11 | 2.7346714898 | 9 | 12 | 3.222399217 | 9 | 13 | 3.6118208914 |
| 9 | 14 | 3.940359564 | 9 | 15 | 4.2256522719 | 9 | 16 | 4.4776242052 |
| 10 | 11 | 2.0409472694 | 10 | 12 | 2.7346732692 | 10 | 13 | 3.2224026459 |
| 10 | 14 | 3.6118254703 | 10 | 15 | 3.9403636281 | 11 | 12 | 2.0409474996 |
| 11 | 13 | 2.7346740521 | 11 | 14 | 3.2224036932 | 12 | 13 | 2.0409475703 |

**Tabelle 6.** $q = \exp(\frac{i\pi}{5})$ entsprechend $c = \frac{7}{10}$
Korrelationen $|\langle g_{k,l}\rangle_{24}|$ für Quantenspinkette mit $N = 24$ Gitterplätzen.

| k | l | $\langle g_{k,l}\rangle_{24}$ | k | l | $\langle g_{k,l}\rangle_{24}$ | k | l | $\langle g_{k,l}\rangle_{24}$ |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 1 | 2 | 0.8558961752 | 1 | 3 | 0.10010759171 | 1 | 4 | 0.32013404159 |
| 1 | 5 | 0.062295165971 | 1 | 6 | 0.19956390005 | 1 | 7 | 0.04571843454 |
| 1 | 8 | 0.14575924918 | 1 | 9 | 0.036279810254 | 1 | 10 | 0.11559678212 |
| 1 | 11 | 0.030133310049 | 1 | 12 | 0.096569576915 | 1 | 13 | 0.025763226639 |
| 1 | 14 | 0.083676159443 | 1 | 15 | 0.022429355001 | 1 | 16 | 0.074513988502 |
| 1 | 17 | 0.019698915033 | 1 | 18 | 0.067767408812 | 1 | 19 | 0.01725121461 |
| 1 | 20 | 0.062612301742 | 1 | 21 | 0.014728342539 | 1 | 22 | 0.058385740558 |
| 1 | 23 | 0.011354630374 | 1 | 24 | 0.054073541807 | 2 | 3 | 0.46516364116 |
| 2 | 4 | 0.083293348565 | 2 | 5 | 0.10668585014 | 2 | 6 | 0.048139495556 |
| 2 | 7 | 0.050029921523 | 2 | 8 | 0.03387679314 | 2 | 9 | 0.029701136956 |
| 2 | 10 | 0.026223883384 | 2 | 11 | 0.019881678647 | 2 | 12 | 0.021513855645 |
| 2 | 13 | 0.014282721089 | 2 | 14 | 0.018369928979 | 2 | 15 | 0.010709848732 |
| 2 | 16 | 0.016156887809 | 2 | 17 | 0.0082164374385 | 2 | 18 | 0.014537868203 |
| 2 | 19 | 0.0063221549952 | 2 | 20 | 0.013309625067 | 2 | 21 | 0.0047302364138 |
| 2 | 22 | 0.012319156269 | 2 | 23 | 0.0031481860806 | 3 | 4 | 0.73498499671 |
| 3 | 5 | 0.093122382014 | 3 | 6 | 0.27506187737 | 3 | 7 | 0.058246710841 |
| 3 | 8 | 0.1771720687 | 3 | 9 | 0.043275987065 | 3 | 10 | 0.13334870039 |
| 3 | 11 | 0.034722923965 | 3 | 12 | 0.1084390114 | 3 | 13 | 0.029076897041 |
| 3 | 14 | 0.092505698498 | 3 | 15 | 0.024971712011 | 3 | 16 | 0.081581736412 |
| 3 | 17 | 0.021724468919 | 3 | 18 | 0.073733457332 | 3 | 19 | 0.018893679044 |
| 3 | 20 | 0.06785121764 | 3 | 21 | 0.016046087043 | 3 | 22 | 0.063116655195 |
| 4 | 5 | 0.52290558119 | 4 | 6 | 0.087905226524 | 4 | 7 | 0.13426412457 |
| 4 | 8 | 0.052730845106 | 4 | 9 | 0.066558462555 | 4 | 10 | 0.038106579342 |
| 4 | 11 | 0.040563872893 | 4 | 12 | 0.030090007823 | 4 | 13 | 0.027365182841 |
| 4 | 14 | 0.025070289416 | 4 | 15 | 0.019529769338 | 4 | 16 | 0.021673637806 |
| 4 | 17 | 0.014340319511 | 4 | 18 | 0.0192546244 | 4 | 19 | 0.010568460677 |
| 4 | 20 | 0.017458780818 | 4 | 21 | 0.0075424728034 | 5 | 6 | 0.70082964932 |
| 5 | 7 | 0.091545920256 | 5 | 8 | 0.25763656257 | 5 | 9 | 0.05690149313 |
| 5 | 10 | 0.16674005993 | 5 | 11 | 0.042203219948 | 5 | 12 | 0.12682456727 |
| 5 | 13 | 0.033839744294 | 5 | 14 | 0.10436985909 | 5 | 15 | 0.028287042364 |
| 5 | 16 | 0.090096985268 | 5 | 17 | 0.024166233032 | 5 | 18 | 0.080345711877 |
| 5 | 19 | 0.02075004206 | 5 | 20 | 0.073312381704 | 6 | 7 | 0.54506361335 |
| 6 | 8 | 0.089170579507 | 6 | 9 | 0.14644067519 | 6 | 10 | 0.054222310509 |
| 6 | 11 | 0.0743863131 | 6 | 12 | 0.039656902159 | 6 | 13 | 0.045802420148 |
| 6 | 14 | 0.03164485519 | 6 | 15 | 0.030842802375 | 6 | 16 | 0.0266116315 |
| 6 | 17 | 0.021681268815 | 6 | 18 | 0.023195803924 | 6 | 19 | 0.015385841557 |
| 7 | 8 | 0.68559295298 | 7 | 9 | 0.090910441264 | 7 | 10 | 0.24919838102 |
| 7 | 11 | 0.056235622355 | 7 | 12 | 0.16150229119 | 7 | 13 | 0.041557700249 |
| 7 | 14 | 0.12360433954 | 7 | 15 | 0.033182817779 | 7 | 16 | 0.10256165827 |
| 7 | 17 | 0.027543118141 | 7 | 18 | 0.089332524631 | 8 | 9 | 0.55577047043 |
| 8 | 10 | 0.08972494284 | 8 | 11 | 0.15245335877 | 8 | 12 | 0.054943999273 |
| 8 | 13 | 0.078126246707 | 8 | 14 | 0.040472546082 | 8 | 15 | 0.048019704932 |
| 8 | 16 | 0.032525268439 | 8 | 17 | 0.031879458678 | 9 | 10 | 0.67804378941 |
| 9 | 11 | 0.09055824398 | 9 | 12 | 0.24513556889 | 9 | 13 | 0.055794989427 |
| 9 | 14 | 0.15925389539 | 9 | 15 | 0.041037586312 | 9 | 16 | 0.12262573994 |
| 10 | 11 | 0.56092121292 | 10 | 12 | 0.090050458429 | 10 | 13 | 0.15501775644 |
| 10 | 14 | 0.055405644737 | 10 | 15 | 0.079249890301 | 11 | 12 | 0.67481980059 |
| 11 | 13 | 0.090301020188 | 11 | 14 | 0.2439114889 | 12 | 13 | 0.56247257308 |

**Tabelle 7.** $q = \exp(\frac{i\pi}{6})$ entsprechend $c = \frac{4}{5}$
Korrelationen $|\langle g_{k,l} \rangle_{24}|$ für Quantenspinkette mit $N = 24$ Gitterplätzen.

| k | l | $\langle g_{k,l} \rangle_{24}$ | k | l | $\langle g_{k,l} \rangle_{24}$ | k | l | $\langle g_{k,l} \rangle_{24}$ |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 1 | 2 | 0.99277471633 | 1 | 3 | 0.17616179459 | 1 | 4 | 0.35768681413 |
| 1 | 5 | 0.10614849947 | 1 | 6 | 0.21792030456 | 1 | 7 | 0.076138336055 |
| 1 | 8 | 0.15636861009 | 1 | 9 | 0.059322045238 | 1 | 10 | 0.12211730414 |
| 1 | 11 | 0.048501437108 | 1 | 12 | 0.10055825919 | 1 | 13 | 0.040878661378 |
| 1 | 14 | 0.085895614612 | 1 | 15 | 0.035106809176 | 1 | 16 | 0.075355899878 |
| 1 | 17 | 0.030413807064 | 1 | 18 | 0.067414340684 | 1 | 19 | 0.026247494813 |
| 1 | 20 | 0.061095877653 | 1 | 21 | 0.022028013575 | 1 | 22 | 0.055577589663 |
| 1 | 23 | 0.016586851802 | 1 | 24 | 0.049556773873 | 2 | 3 | 0.51119270952 |
| 2 | 4 | 0.14623467921 | 2 | 5 | 0.12293548402 | 2 | 6 | 0.082334237186 |
| 2 | 7 | 0.061501250541 | 2 | 8 | 0.056974094695 | 2 | 9 | 0.038903205448 |
| 2 | 10 | 0.043519093441 | 2 | 11 | 0.027636274555 | 2 | 12 | 0.035276360424 |
| 2 | 13 | 0.020992216983 | 2 | 14 | 0.029766758542 | 2 | 15 | 0.016602853508 |
| 2 | 16 | 0.025854605288 | 2 | 17 | 0.013422924686 | 2 | 18 | 0.022936449292 |
| 2 | 19 | 0.010895476998 | 2 | 20 | 0.020640469596 | 2 | 21 | 0.0086309752513 |
| 2 | 22 | 0.018669972685 | 2 | 23 | 0.006127353499 | 3 | 4 | 0.8535684283 |
| 3 | 5 | 0.1644505893 | 3 | 6 | 0.31236373761 | 3 | 7 | 0.10021470764 |
| 3 | 8 | 0.19764665517 | 3 | 9 | 0.073095345215 | 3 | 10 | 0.14646024158 |
| 3 | 11 | 0.057760605949 | 3 | 12 | 0.11737634037 | 3 | 13 | 0.047711667659 |
| 3 | 14 | 0.098691672998 | 3 | 15 | 0.040446367657 | 3 | 16 | 0.085732909579 |
| 3 | 17 | 0.034730005746 | 3 | 18 | 0.076209632285 | 3 | 19 | 0.02978379344 |
| 3 | 20 | 0.068780976791 | 3 | 21 | 0.024880633376 | 3 | 22 | 0.062408972708 |
| 4 | 5 | 0.57880194067 | 4 | 6 | 0.15475060501 | 4 | 7 | 0.15222097573 |
| 4 | 8 | 0.090574830118 | 4 | 9 | 0.078816440996 | 4 | 10 | 0.064442437733 |
| 4 | 11 | 0.050425528257 | 4 | 12 | 0.050259269681 | 4 | 13 | 0.035788669591 |
| 4 | 14 | 0.041400373962 | 4 | 15 | 0.026926474253 | 4 | 16 | 0.03537498008 |
| 4 | 17 | 0.020912241782 | 4 | 18 | 0.031016235535 | 4 | 19 | 0.016393967251 |
| 4 | 20 | 0.027673469181 | 4 | 21 | 0.012571116646 | 5 | 6 | 0.81281533776 |
| 5 | 7 | 0.16167260614 | 5 | 8 | 0.29429927329 | 5 | 9 | 0.098087422124 |
| 5 | 10 | 0.18772487519 | 5 | 11 | 0.071561514826 | 5 | 12 | 0.14077179465 |
| 5 | 13 | 0.056603655335 | 5 | 14 | 0.11419575106 | 5 | 15 | 0.046727587873 |
| 5 | 16 | 0.097099735807 | 5 | 17 | 0.039428621885 | 5 | 18 | 0.085157665649 |
| 5 | 19 | 0.0334091083 | 5 | 20 | 0.076199515298 | 6 | 7 | 0.60550807554 |
| 6 | 8 | 0.15715092645 | 6 | 9 | 0.16523374247 | 6 | 10 | 0.093307619779 |
| 6 | 11 | 0.086903492233 | 6 | 12 | 0.067222475316 | 6 | 13 | 0.05581398335 |
| 6 | 14 | 0.052995530602 | 6 | 15 | 0.039415332111 | 6 | 16 | 0.044055670511 |
| 6 | 17 | 0.029237000325 | 6 | 18 | 0.037922616262 | 6 | 19 | 0.022089336925 |
| 7 | 8 | 0.79424784062 | 7 | 9 | 0.16051146918 | 7 | 10 | 0.28539146119 |
| 7 | 11 | 0.096975615026 | 7 | 12 | 0.18263024881 | 7 | 13 | 0.07055222376 |
| 7 | 14 | 0.13787344764 | 7 | 15 | 0.055611878463 | 7 | 16 | 0.11271437838 |
| 7 | 17 | 0.045603506067 | 7 | 18 | 0.096556557005 | 8 | 9 | 0.61863620616 |
| 8 | 10 | 0.15822293625 | 8 | 11 | 0.17171105919 | 8 | 12 | 0.094644334518 |
| 8 | 13 | 0.090763261847 | 8 | 14 | 0.068685896028 | 8 | 15 | 0.058075617247 |
| 8 | 16 | 0.054523703 | 8 | 17 | 0.040482677329 | 9 | 10 | 0.78492862476 |
| 9 | 11 | 0.15984772166 | 9 | 12 | 0.28105698199 | 9 | 13 | 0.096204648695 |
| 9 | 14 | 0.18041919967 | 9 | 15 | 0.069679540696 | 9 | 16 | 0.13698175415 |
| 10 | 11 | 0.62501585484 | 10 | 12 | 0.15885998719 | 10 | 13 | 0.17448791955 |
| 10 | 14 | 0.095498141471 | 10 | 15 | 0.09192364303 | 11 | 12 | 0.78092024273 |
| 11 | 13 | 0.15935072123 | 11 | 14 | 0.27974460481 | 12 | 13 | 0.62694646566 |

**Tabelle 8.** $q = \exp(\frac{i\pi}{7})$ entsprechend $c = \frac{6}{7}$
Korrelationen $|\langle g_{k,l}\rangle_{24}|$ für Quantenspinkette mit $N = 24$ Gitterplätzen.

| k | l | $\langle g_{k,l}\rangle_{24}$ | k | l | $\langle g_{k,l}\rangle_{24}$ | k | l | $\langle g_{k,l}\rangle_{24}$ |
|---|---|---|---|---|---|---|---|---|
| 1 | 2 | 1.0753662584 | 1 | 3 | 0.22875954789 | 1 | 4 | 0.37912539783 |
| 1 | 5 | 0.13510734015 | 1 | 6 | 0.22784140558 | 1 | 7 | 0.095520032499 |
| 1 | 8 | 0.16172319849 | 1 | 9 | 0.073559580207 | 1 | 10 | 0.12508964175 |
| 1 | 11 | 0.059537630653 | 1 | 12 | 0.10206432776 | 1 | 13 | 0.049720327037 |
| 1 | 14 | 0.086377949643 | 1 | 15 | 0.042325964592 | 1 | 16 | 0.075039137474 |
| 1 | 17 | 0.036345603534 | 1 | 18 | 0.066403191752 | 1 | 19 | 0.031073335981 |
| 1 | 20 | 0.059413116303 | 1 | 21 | 0.025795871552 | 1 | 22 | 0.05316941693 |
| 1 | 23 | 0.019141878163 | 1 | 24 | 0.046266085129 | 2 | 3 | 0.53540485456 |
| 2 | 4 | 0.18974860179 | 2 | 5 | 0.13531516021 | 2 | 6 | 0.1051712668 |
| 2 | 7 | 0.070974405593 | 2 | 8 | 0.072039547706 | 2 | 9 | 0.046620602785 |
| 2 | 10 | 0.054575374195 | 2 | 11 | 0.034120387612 | 2 | 12 | 0.043904055605 |
| 2 | 13 | 0.026547735909 | 2 | 14 | 0.036765020611 | 2 | 15 | 0.021418656576 |
| 2 | 16 | 0.031671587412 | 2 | 17 | 0.017612163361 | 2 | 18 | 0.027834171182 |
| 2 | 19 | 0.014508893884 | 2 | 20 | 0.024763027006 | 2 | 21 | 0.011644628993 |
| 2 | 22 | 0.022061185799 | 2 | 23 | 0.0083578905953 | 3 | 4 | 0.92575896681 |
| 3 | 5 | 0.21405613024 | 3 | 6 | 0.33471105676 | 3 | 7 | 0.12835498376 |
| 3 | 8 | 0.20954679591 | 3 | 9 | 0.092537765449 | 3 | 10 | 0.15378926806 |
| 3 | 11 | 0.072416425797 | 3 | 12 | 0.12211614584 | 3 | 13 | 0.059294894228 |
| 3 | 14 | 0.10172337982 | 3 | 15 | 0.049846497742 | 3 | 16 | 0.087498434777 |
| 3 | 17 | 0.042442716629 | 3 | 18 | 0.07693159457 | 3 | 19 | 0.036072120085 |
| 3 | 20 | 0.068544916838 | 3 | 21 | 0.029819905574 | 3 | 22 | 0.061182397768 |
| 4 | 5 | 0.60867064913 | 4 | 6 | 0.20110697763 | 4 | 7 | 0.16525202805 |
| 4 | 8 | 0.11597952676 | 4 | 9 | 0.088693460113 | 4 | 10 | 0.081737839628 |
| 4 | 11 | 0.058634648914 | 4 | 12 | 0.063258194606 | 4 | 13 | 0.04284806456 |
| 4 | 14 | 0.051729762409 | 4 | 15 | 0.033097691027 | 4 | 16 | 0.043864324813 |
| 4 | 17 | 0.026337362351 | 4 | 18 | 0.03812575168 | 4 | 19 | 0.021129899954 |
| 4 | 20 | 0.033653345239 | 4 | 21 | 0.016575582612 | 5 | 6 | 0.88112285922 |
| 5 | 7 | 0.21047176099 | 5 | 8 | 0.31672258389 | 5 | 9 | 0.12581193755 |
| 5 | 10 | 0.20029363585 | 5 | 11 | 0.090847576013 | 5 | 12 | 0.14886869187 |
| 5 | 13 | 0.071240282857 | 5 | 14 | 0.11965807203 | 5 | 15 | 0.058341743042 |
| 5 | 16 | 0.10074827179 | 5 | 17 | 0.048838542879 | 5 | 18 | 0.087393834232 |
| 5 | 19 | 0.041032906408 | 5 | 20 | 0.077198068863 | 6 | 7 | 0.63807285055 |
| 6 | 8 | 0.20435603983 | 6 | 9 | 0.17853176619 | 6 | 10 | 0.11960414626 |
| 6 | 11 | 0.096820856319 | 6 | 12 | 0.085376873971 | 6 | 13 | 0.064087227364 |
| 6 | 14 | 0.066797367686 | 6 | 15 | 0.046590649645 | 6 | 16 | 0.055116899952 |
| 6 | 17 | 0.035552359679 | 6 | 18 | 0.047053131074 | 6 | 19 | 0.027636117113 |
| 7 | 8 | 0.86055085781 | 7 | 9 | 0.20894195707 | 7 | 10 | 0.30776132346 |
| 7 | 11 | 0.12443399888 | 7 | 12 | 0.19547155088 | 7 | 13 | 0.089655132918 |
| 7 | 14 | 0.14629683747 | 7 | 15 | 0.070097580519 | 7 | 16 | 0.1184572317 |
| 7 | 17 | 0.057040798555 | 7 | 18 | 0.10037791871 | 8 | 9 | 0.65266469417 |
| 8 | 10 | 0.20582225725 | 8 | 11 | 0.185159452 | 8 | 12 | 0.12138619003 |
| 8 | 13 | 0.10068163355 | 8 | 14 | 0.087289594671 | 8 | 15 | 0.066352674693 |
| 8 | 16 | 0.068752525284 | 8 | 17 | 0.047678682626 | 9 | 10 | 0.85015138193 |
| 9 | 11 | 0.20805111513 | 9 | 12 | 0.30337449683 | 9 | 13 | 0.12344785866 |
| 9 | 14 | 0.19336382707 | 9 | 15 | 0.088568855362 | 9 | 16 | 0.14549800023 |
| 10 | 11 | 0.65979581319 | 10 | 12 | 0.20669886236 | 10 | 13 | 0.18800689223 |
| 10 | 14 | 0.12252138413 | 10 | 15 | 0.10184089196 | 11 | 12 | 0.84566054392 |
| 11 | 13 | 0.20737371855 | 11 | 14 | 0.30204251693 | 12 | 13 | 0.66195958113 |

## Literatur


[1] Hinrichsen H., Martin P. P., Rittenberg V. und Scheunert M. 1994 *Nucl. Phys.* B **415** 533

[2] Pasquier V. und Saleur H. 1990 *Nucl. Phys.* B **330** 523

[3] Temperley H. N. V. und Lieb E. H. 1971 *Proc. R. Soc.* A **322** 251

[4] Jones V. F. R. 1983 *Invent. Math.* **72** 1

[5] Batchelor M. T. und Kuniba A. 1991 *J. Phys. A: Math. Gen.* **24** 2599

[6] Batchelor M. T., Mezincescu L., Nepomechie R. I. und Rittenberg V. 1990 *J. Phys. A: Math. Gen.* **23** L141

[7] Heisenberg W. 1928 *Z. Phys.* **49** 619

[8] Bethe H. A. 1931 *Z.Phys.* **71** 253

[9] Yang C. N. und Yang C. P. 1966 *Phys. Rev.* **150** 321

[10] Fan C. und Wu F. Y. 1970 *Phys. Rev.* B **2** 723

[11] Belavin A. A., Polyakov A. M. und Zamolodchikov A. B. 1983 *Nucl. Phys.* B**241** 333

[12] Cardy J. L. 1984 *Nucl. Phys.* B**240** 514

[13] Alcaraz F. C., Barber M. N., Batchelor M. T., Baxter R. J. und Quispel G. R. W. 1987 *J. Phys. A: Math. Gen.* **20** 6397

[14] Sklyanin E. K. 1988 *J. Phys. A: Math. Gen.* **21** 2375

[15] Mezincescu L. und Nepomechie R. I. 1991 *Mod. Phys. Lett.* **A6** 2497

[16] Destri C. und de Vega H. J. 1992 *Nucl. Phys.* **B374** 692, *Nucl. Phys.* **B385** 361

[17] Jüttner G. und Karowski M. 1994 *Completeness of Good Bethe Ansatz Solutions of a Quantum Group Invariant Heisenberg Model*, Preprint Berlin SFB 288-131

[18] Alcaraz F. C., Droz M., Henkel M. und Rittenberg V. 1994 *Ann. Phys., NY* **230** 250

[19] Hamer C. J., Quispel G. R. W. und Batchelor M. T. 1987 *J. Phys. A: Math. Gen.* **20** 5677

[20] Alcaraz F. C., Baake M., Grimm U. und Rittenberg V. 1989 *J. Phys. A: Math. Gen.* **22** L5

[21] Alcaraz F. C., Barber M. N. und Batchelor M. T. 1988 *Ann. Phys., NY* **182** 280

[22] Bonner J. C. und Fisher M. E. 1964 *Phys. Rev.* **135** A640

[23] Borosowicz J., Kaplan T. A. und Horsch P. 1985 *Phys. Rev.* B **31** 1590

[24] Gagliano E. R., Dagotto E., Moreo A. und Alcaraz F. C. 1986 *Phys. Rev.* B **34** 1677

[25] Lin H. Q. 1990 *Phys. Rev.* B**42** 6561

[26] Karbach M., Mütter K. H. 1992 *Z. Phys.* B **90** 83

[27] Grieger W. 1984 *Phys. Rev.* B **30** 344

[28] Izergin A. G. und Korepin V. E. 1985 *Comm. Math. Phys.* **99** 271

[29] Luther A. und Peschel I. 1975 *Phys. Rev.* B**12**, 3908 **99** 271

[30] Fogedby, H. C. 1978 *J. Phys. C: Solid State Phys.* **11**, 4767

[31] Karbach M., Mütter K. H. und Schmidt M. 1994 *Phys. Rev.* B **50** 9281 und Preprint WUB 94-25, Wuppertal

[32] Eßler F. H. L., Frahm H., Izergin A. G. und Korepin V. E. 1994 *Determinant representations for Correlation Functions of Spin-1/2 XXX and XXZ Heisenberg Magnets*, Preprint Bonn-TH-94-14, Hannover ITP-UH-09/94, Stony Brook ITP-SB-94-24, erscheint in *Comm. Math. Phys.*

[33] Eßler F. H. L. und Korepin V. E. 1995 *Dual Field Approach to Correlation Functions in the Heisenberg XXZ Spin Chain*, erscheint in Proceedings of SMQFT 1994, Los Angeles

[34] Jimbo M., Miki K., Miwa T. und Nakayashiki A. 1992 *Phys. Lett.* A **168** 256

[35] Davies B., Foda O., Jimbo M., Miwa T., Nakayashiki A., *Comm. Math. Phys.* **151** 89

[36] Rittenberg V. und Scheunert M. 1992 *J. Math. Phys.* **33** 436

[37] Arndt P. F. und Heinzel T. 1995 *Numerical investigation of correlation functions for the $U_qSU(2)$ invariant spin-$\frac{1}{2}$ Heisenberg chain*, Preprint Bonn TH-95-02, cond-mat/9501035

[38] Martin P. P. 1991 *Potts Models and Related Problems in Statistical Mechanics* (World Scientific: Singapore)

[39] Sweedler M. E. 1969 *Hopf Algebras* (Benjamin: New York)

[40] Majid S. 1990 *Int. J. Mod. Phys. A* **5** 1

[41] Kirillov A. N. und Reshetikhin N. Y. 1988 *Representations of the algebra $U_q(sl(2))$, q-orthogonal polynominals and invariants of links*, Preprint LOMI E-9-88, Leningrad

[42] Scheunert M. 1993 *The tensor product of tensor operators over quantum algebras*, Preprint Bonn HE-93-28

[43] Martin P. P. 1990 *J. Phys. A: Math. Gen.* **23** 7

[44] Mittag L. und Stephen M. J. 1971 *J. Math. Phys.* **12** 441

[45] Andrews G. E., Baxter R. J. und Forrester P. J. 1984 *J. Stat. Phys.* **35** 193

[46] Arndt P. F., Heinzel T. und Yung C. M. 1994 *Temperley–Lieb words as Valence-Bond Ground States* Preprint Bonn TH-94-26, cond-mat/9411085

[47] Arndt P. F. 1995 *Temperley–Lieb Wörter als Grundzustände von quantengruppensymmetrischen Modellen*, Diplomarbeit Bonn

[48] Jüttner G. 1994 *Der Bethe-Ansatz des quantengruppeninvarianten Heisenberg-Modells*, Dissertation, FU Berlin

[49] Bo-Yum Hou, Kang-Jie Shi, Zhong-Xia Yang und Rui-Hong Yue 1991 *J. Phys. A: Math. Gen.* **24** 3825

[50] Symanzik K. 1981 *Nucl. Phys.* B**190** 1

[51] Blöte H. W., Cardy J. L. und Nightingale M. P., 1986 *Phys. Rev. Lett.* **56** 742

[52] Affleck I. 1986 *Phys. Rev. Lett.* **56** 746

[53] Hamer C. J. 1985 *J. Phys. A: Math. Gen.* **18** L1133

[54] Bulirsch R. und Stoer J. 1964 *Numer. Math.* **6** 413

[55] Henkel M. und Schütz G. 1988 *J. Phys. A: Math. Gen.* **21** 2617

[56] Christe P. und Henkel M. 1992 *Introduction to Conformal Invariance and its Application to Critical Phenomena*, Lecture Notes in Physics, (Springer: Berlin)

[57] Cardy J. L. 1985 *Phys. Rev. Lett.* **54** 1354