Diplomarbeit

Numerische Untersuchungen von Spin-1-Ketten

vorgelegt von
Erik Bartel
aus Mönchengladbach

Köln 2002

Institut für Theoretische Physik
der Universität zu Köln

Institut für Theoretische Physik der Universtität zu Köln
Zülpicher Straße 77, 50937 Köln, Germany

<u>Gutachter</u>

1. Gutachter: Prof. Dr. J. Zittartz
2. Gutachter: Prof. Dr. W. Neuwirth

Inhaltsverzeichnis

1 Einleitung

Zu den etabliertesten und gleichzeitig faszinierendsten Modellen der Festkörperphysik dürfen quantenmechanische Spinsysteme gezählt werden. Von formaler Einfachheit vermögen sie, eine große Zahl von Phänomenen wie Magnetismus, Phasenübergänge oder kritisches Verhalten zu beschreiben. Diese Eigenschaften weist insbesondere die antiferromagnetische Spin-1-Kette auf. Die vielfältigen Varianten des Heisenberg-Modells erlauben das Studium von reichhaltigem Phasenverhalten.

Im Jahr 1993 gaben Klümper, Schadschneider und Zittartz das klare Konzept des Matrixprodukt-Grundzustands für die Spin-1-Kette an. Für eine große Klasse von bisher nicht gelösten Modellen wurden damit der Grundzustand und seine Eigenschaften erstmals analytisch exakt zugänglich. Etwa im gleichen Jahr entwickelte White die effiziente numerische Methode der Dichtematrix-Renormierungsgruppe, mit deren Hilfe man niedrigliegende Anregungsenergien und Korrelationen für viele eindimensionale Quantensysteme erstmals für große Systeme sehr genau bestimmen kann, die analytisch nicht berechenbar sind. Beide Verfahren etablierten sich erfolgreich bei der Untersuchung von Spinketten und haben im Laufe der letzten Jahre eine Fülle von Varianten und neuen Einsatzgebieten erlebt.

Im Rahmen der vorliegenden Arbeit wurde der DMRG-Algorithmus für Spinketten implementiert. Die verwendete Programmiersprache C++ gestattete es, viele Programmbereiche objektorientiert zu gestalten, um damit die Abstraktionseinheiten des DMRG-Algorithmus treffend widerzuspiegeln. Während sich die vorliegenden Messergebnisse auf die Spin-1-Kette mit Nächste-Nachbar-Wechselwirkungen beziehen, sind alternativ auch Untersuchungen zu anderen halb- und ganzzahligen Spinketten möglich. Auch Wechselwirkungen mit entfernteren Nachbarn können einbezogen werden. Eine einfache Schnittstelle erleichtert die Parameterübergabe für den Anwender.

Nachdem in dieser Arbeit zunächst Genauigkeit und Grenzen der numerischen Methode anhand der bilinear-biquadratischen Kette untersucht werden, beinhaltet ein weiterer Teil die Analyse von Anregungung über Spin-1-Ketten mit antiferromagnetischem Matrixprodukt-Grundzustand. Während der Grundzustand sich hier exakt als Matrixprodukt konstruieren lässt, ist das Anregungsspektrum noch weitestgehend unerforscht.

Es gelingt, mit DMRG das Spektrum der tiefstliegenden Anregungen in Abhängigkeit von Systemparametern zu skizzieren und eine Anregungslücke zu beobachten. Ein quadratisches Verschwinden der Anregungslücke ist in der Nähe eines kritischen Punktes mit höherer Symmetrie zu beobachten. Ferner wird für den Bereich um den isotropen Punkt der Modellklasse ein Variationszustand angegeben, der die Anregungslücke quantitativ gut reproduziert.

Eine systematische Untersuchung der möglichen Variationszustände über dem Matrixprodukt-Grundzustand steht noch aus. Die numerischen Ergebnisse nähren jedoch die Hoffnung, dass sich weitere Teile des Spektrums auf diese Weise erklären lassen.

1.1 Aufbau der Diplomarbeit

Kapitel 2 gibt ausgehend vom Heisenberg-Modell wichtige Modellparameter von Spinsystemen an. Die Untersuchung von *eindimensionalen Spinsystemen* wird motiviert und das besondere Interesse an Spin-1-Ketten auf die Vermutung von Haldane zurückgeführt.

In **Kapitel 3** wird ein allgemeiner Hamiltonian für die *Spin-1-Kette* angegeben und entsprechende Substanzen präsentiert. Für bestimmte Parameterkonfigurationen ergeben sich die anisotrope bilineare Kette und die isotrope bilinear-biquadratische (BLBQ-) Kette, die bereits gut untersucht sind. Unlängst wurde eine mikroskopische Motivation von biquadratischer Wechselwirkung vorgestellt, die hier skizziert wird. Eine Betrachtung der Spektraldarstellung und grundlegender Symmetrie-Eigenschaften beschließt das Kapitel.

Kapitel 4 stellt den Optimum-Grundzustand und – als seine Realisierung auf der Spinkette – die Methode des *Matrixprodukt-Grundzustands (MPG)* vor. Das VBS-Modell ist wohl das bekannteste nicht-triviale System, dessen Grundzustand sich als Matrixprodukt formulieren lässt. Das Transfermatrix-Verfahren, als ideale analytische Methode zur Berechnung von Eigenschaften des Matrixprodukt-Grundzustands, wird beschrieben. Explizit werden Ergebnisse angegeben.

Kapitel 5 beinhaltet eine Vorstellung der *Dichtematrix-Renormierungsgruppe (DMRG)*. Insbesondere wird die ihr zugrunde liegende Dichtematrix-Projektion beschrieben und legitimiert. Es folgt die Darstellung von zwei üblichen algorithmischen Realisierungen des DMRG-Konzepts und ein Überblick über Varianten der DMRG.

Kapitel 6 erläutert die Möglichkeiten und Grenzen der DMRG-Methode am Beispiel der *BLBQ-Kette*. Die Grundzustandsenergie wird berechnet und mit exakten Werten und Variationsenergien verglichen. Schließlich wird anhand der Konvergenzeigenschaften der ersten Energie-Anregung das unterschiedliche Phasenverhalten illustriert.

Kapitel 7 beginnt mit Symmetrieüberlegungen zum Matrixprodukt-Grundzustand. Nachfolgend werden niedrigliegende *Anregungen über dem MPG* untersucht. Dabei werden verschiedene S^z_T-Unterräume betrachtet und die Systemparameter variiert. Es wird eine Anregungslücke beobachtet, die mit den Systemparametern skaliert. Teile des Spektrums werden durch eine analytische Variationsrechnung erklärt. In der Nähe des kritischen Punktes a=0 stellt man fest, dass die Anregungen in quadratischer Ordnung verschwinden. Die Vorfaktoren werden aus den numerischen Daten extrapoliert.

Kapitel 8 gibt eine Zusammenfassung der Ergebnisse und einen Ausblick.

Im **Anhang** werden schließlich Rechungen ausformuliert und der Aufbau des im Rahmen dieser Arbeit entwickelten DMRG-Programms erläutert.

2 Magnetismus in einer Dimension

In diesem Kapitel soll das Interesse an der Untersuchung der Spin-1-Kette als eindimensionales Quantensystem begründet werden. Abschnitt 2.1 stellt das Heisenberg-Modell und einige Varianten vor. In Abschnitt 2.2 wird die Untersuchung von eindimensionalen Spinsystemen motiviert. Die Haldane-Vermutung, die in Abschnitt 2.3 angegeben wird, war wesentlicher Auslöser für rege Forschungsaktivitäten im Bereich der Spin-1-Kette.

2.1 Das Heisenberg-Modell

Magnetismus ist eines der wenigen reinen Quantenphänome, die auf einer makroskopischen Skala beobachtet werden können. Bereits seit dem Altertum ist der Ferromagnetismus bekannt. Erst im 20. Jahrhundert entdeckte man weitere makroskopisch beobachtbare Quantenphänomene wie Superfluidität und Supraleitung, die freilich einer aufwendigen experimentellen Umgebung bedürfen.

Heisenberg und Dirac erklärten die Entstehung von Magnetismus im Mikroskopischen durch ein Zusammenspiel von elektrostatischer Coulomb-Wechselwirkung, dem Elekronenspin und dem Paulischen Ausschlussprinzip. Für zwei lokalisierte Valenzelektronen-Spins der Größe $S = \frac{1}{2}$ wird die Wechselwirkung durch den *Heisenberg-Hamiltonian*

$$H = \sum_{i,j} J_{ij} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \tag{2.1}$$

ausgedrückt [1]. Die Konstanten J_{ij} geben die Energiedifferenz zwischen verschiedenen Konfigurationen zweier Spins an.

Für einen gegebenen Festkörper ist es alles andere als trivial, aus der mikroskopischen Struktur die Größe der Kopplungskonstanten J_{ij} herzuleiten. Im Folgenden sollen die Wechselwirkungen im Heisenberg-Modell als Parameter angesehen werden und die Eigenschaften der resultierenden Systeme in Abhängigkeit von diesen Systemparametern studiert werden.

Typische freie Parameter des Heisenberg-Modells umfassen:

- *Gitterdimension* ($d = 1, 2, 3$):
  Untersucht werden typischerweise dreidimensionale Festkörper. Eine ganze Reihe von Substanzen weisen allerdings eine Anordnung der magnetischen Struktur in Ebenen oder eindimensionalen Topologien auf, die untereinander nicht wechselwirken. Dazu zählen z.B. Stoffe, die unter geeigneten Bedingungen Hochtemperatur-Supraleitung aufweisen.

- *Gitterstruktur:*
  Neben dem Quadratgitter gibt es z.B. in der Ebene noch eine Reihe anderer Gittertypen, wie das Dreiecksgitter, das Hexagonalgitter und das Kagomé-Gitter. In einer Dimension werden Ketten, Leitern und Zick-Zack-Leitern untersucht.

- *Reichweite der Wechselwirkung:*
  Während es Mechanismen gibt, die langreichweitige magnetische Wechselwirkungen gestatten (beispielsweise die *RKKY-Wechselwirkung* als indirekte Wechselwirkung über die Polarisation der Leitungselektronen), sind die Wechselwirkungen der hier untersuchten Isolatoren gewöhnlich von schwacher Reichweite. Daher beschränkt man sich auf Wechselwirkungen von nächsten und eventuell übernächsten Nachbarn.

- *Anisotropie:* Die Topologie des Gitters kann die Translations- und Rotationssymmetrie verletzen. Dies führt zu einer bevorzugten Ausrichtung der Spins entlang einer Achse oder einer Ebene. Zwei uniaxiale Anisotropievarianten sind die *Austausch-Anisotropie*

$$J_{ij}\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \to J_{ij}^z S_i^z S_j^z + \frac{J_{ij}^{xy}}{2}(S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+) \tag{2.2}$$

  und die *Single-Ion-Anisotropie*

$$H \to H + D\sum_i (S_i^z)^2. \tag{2.3}$$

- *Spingrößen:*
  Abhängig von der Elektronenkonfiguration der Gitteratome können mehrere Elektronen zu einem effektiven Gesamtspin koppeln. Man betrachtet daher Spingrößen S mit einem beliebigen ganzzahligen Vielfachen von $S = \frac{1}{2}$.

Schließlich unterscheidet man anhand des Charakters der Wechselwirkung zwischen ferromagnetischem und antiferromagnetischem Verhalten. Ferromagnetismus bevorzugt die parallele Ausrichtung von Spins und weist bei niedrigen Temperaturen ein endliches magnetisches Moment auf. Die Spinausrichtung bei Antiferromagneten ist bevorzugt antiparallel, ein magnetisches Moment wird nicht beobachtet. Eine Sonderstellung nehmen Ferrimagnete ein, bei denen Spins unterschiedlicher Größe miteinander wechselwirken.

2.2 Spinketten

Die Eigenschaften eines magnetischen Systems ergeben sich aus dem Kräftespiel zwischen der magnetisch ordnenden Wechselwirkung und der Tendenz zur Unordnung durch Quanten- und thermische Fluktuationen. Der Einfluss der magnetisch ordnenden Wechselwirkung nimmt mit hoher Koordinationszahl, der Anzahl benachbarter Gitterpunkte, zu. Daher zeigen Systeme in höheren

Dimensionen bevorzugt ordnendes Verhalten, während in niedrigdimensionalen Systemen die Unordnung durch Fluktuationen überwiegt.

Nach Mermin und Wagner [2] reichen allein thermische Anregungen, um eine magnetische Ordnung bei endlichen Temperaturen in ein- und zweidimensionalen Systemen mit kontinuierlicher Symmetrie auszuschließen. Dies gilt dann, wenn die Wechselwirkung nicht langreichweitig ist. Beim thermischen Nullpunkt überleben schließlich nur noch Quantenfluktuationen. In zwei Dimensionen sind diese nicht hinreichend stark, so dass die meisten zweidimensionalen Magnete bei $T = 0$ ordnen. In einer Dimension hingegen führen die starken Quantenfluktuationen zur magnetischen Unordnung bei $T = 0$.

Nur wenige Systeme zeigen Quantenphänomene in dieser deutlichen und reinen Form. Neben starken numerischen Methoden (z.B. der in dieser Arbeit verwendeten *Dichtematrix-Renormierungsgruppe*) gibt es eine Reihe von analytischen Verfahren zur Untersuchung von Spinketten. Dies macht sie für den Theoretiker zu einem reizvollen Forschungsgebiet. Eindimensionale Spinsysteme sind Thema dieser Arbeit und sollen im Folgenden, wenn nicht anders vermerkt, angenommen werden.

2.3 Die Vermutung von Haldane

Auslöser für rege Forschungsaktivitäten im Gebiet des Quantenmagnetismus war die bis heute unbewiesene Vermutung von Haldane [3, 4], dass das antiferromagnetische isotrope Spin-S-Heisenbergmodell abhängig vom Spin verschiedenes Verhalten zeigt.

Für die Spin-1/2-Kette sind exakte Resultate bekannt. Analytisch lassen sich die Grundzustandseigenschaften der isotropen antiferromagnetischen Spin-1/2-Heisenbergkette mit ausschließlich Nächste-Nachbarn-Wechselwirkung

$$H = J \sum_j \mathbf{S}_j \cdot \mathbf{S}_{j+1}, \quad J > 0 \tag{2.4}$$

mithilfe des Bethe-Ansatzes [5] bestimmen. Numerische Auswertungen liefern das Anregungsspektrum und die thermodynamischen Eigenschaften. Man erhält einen eindeutigen, ungeordneten Grundzustand mit antiferromagnetischen algebraisch zerfallenden Spin-Spin-Korrelationen

$$\langle \mathbf{S}_0 \mathbf{S}_r \rangle \propto (-1)^r |r|^{-1} \sqrt{\ln |r|}. \tag{2.5}$$

Das System ist kritisch mit unendlicher Korrelationslänge ξ und *quasi langreichweitiger Ordnung*. Das Anregungsspektrum

$$E(k) = \frac{J\pi}{2} |\sin k| \tag{2.6}$$

zum Impuls k weist im thermodynamischen Limes keine Lücke auf. Lange hat man angenommen, dass diese Eigenschaften der Spin-1/2-Ketten qualitativ für alle Spingrößen S gültig sind. Nur wenige exakte, aber rückblickend nicht repräsentative Resultate für höhere Spins waren bekannt.

Im Jahre 1983 stellte HALDANE die Vermutung auf, dass es einen fundamentalen Unterschied zwischen halb- und ganzzahligen Spinketten gibt. Er bildete dazu die isotrope antiferromagnetische Heisenbergkette auf eine zweidimensionale effektive niederenergetische langwellige Feldtheorie – das nicht-lineare σ-Modell – ab.

Bei halbzahligen $S = 3/2, 5/2, \ldots$ ist das Modell masselos, d.h. im unendlichen System gibt es elementare Anregungen mit beliebig kleinen Energiebeträgen über dem Grundzustand. Die Korrelationen fallen gemäß eines Potenzgesetzes ab. Bei ganzzahligem Spin $S = 1, 2, 3, \ldots$ hingegen ist das Modell massiv, auch für das unendliche System liegen die elementaren Anregungen um einen endlichen Energiebetrag über dem eindeutigen Grundzustand. Weiter werden in diesem Fall exponentiell abfallende Korrelationsfunktionen erwartet.

Die Existenz einer endlichen Lücke im Energiespektrum direkt über dem Grundzustand ist wesentlich für das physikalische Verhalten eines System, nicht nur in einer Dimension. Denn dann ist das System auch bei endlichen, aber kleinen Temperaturen im wesentlichen im Grundzustand, und die Korrelationen im Grundzustand geben ein wichtiges Indiz für die Natur des Modells.

Die Haldane-Vermutung wird für große Spins und langwellige Anregungen exakt. Der mathematische Beweis, dass die Aussage auch für kleinere Spins gilt, steht noch aus. Allerdings zeigt eine große Anzahl von numerischen und experimentellen Arbeiten deutlich die erwarteten Eigenschaften, so dass die Vermutung heute allgemein akzeptiert wird.

3 Die Spin-1-Kette

Das durch die HALDANE-Vermutung postulierte besondere Verhalten ganzzahliger Spins und die hohe Bedeutung von Quantenfluktuationen aufgrund der niedrigen Spingröße machen die Spin-1-Kette zu einem reizvollen Forschungsgebiet für den Theoretiker. Sofern nicht anders erwähnt, konzentriert sich diese Arbeit auf antiferromagnetische Systeme.

Ein allgemeiner Hamiltonoperator der Spin-1-Kette ist in Abschnitt 3.1 formuliert. Inzwischen gibt es eine ganze Reihe experimentell gut untersuchter Substanzen, deren Valenzelektronen zu lokalisierten Spins der Größe 1 koppeln. In Abschnitt 3.2 wird dieser experimentelle Hintergrund beleuchtet. Abschnitt 3.3 behandelt das Phasendiagramm des anisotropen, bilinearen Hamiltonians, der zur Beschreibung vieler Substanzen ausreicht. In der Theorie ist ebenfalls der isotrope Fall mit zusätzlichen biquadratischen Termen gut untersucht, der in Abschnitt 3.4 präsentiert wird. In Abschnitt 3.5 wird die mikroskopische Erklärung einer signifikanten biquadratischen Kopplung vorgestellt. Abschnitt 3.6 erläutert die Spektraldarstellung des allgemeinen Hamiltonians, während Abschnitt 3.7 Symmetrien der Modellklasse behandelt.

3.1 Der Hamiltonoperator

Der Hamiltonian, der den in diesem Kapitel beschriebenen Modellen zugrunde liegt, besteht aus einer Summe von lokalen Wechselwirkungen $h_{j,j+1}$ nächster Nachbarn auf einer unendlichen Kette. Während beim Spin-1/2-Heisenberg-Modell die Spinoperatoren ausschließlich in bilinearer Kopplung auftreten[1], ist in Spin-1-Systemen auch biquadratische Wechselwirkung möglich. Lässt man auch Anisotropie zu, eröffnet dies Raum für eine ganze Klasse von Modellen mit unterschiedlichen Eigenschaften.

Ein allgemeiner Ansatz für den Hamiltonian einer Spin-1-Kette berücksichtigt folgende Symmetrien:

- *Translationsinvarianz*
  Die lokalen Wechselwirkungen $h_{j,j+1}$ seien überall von gleicher Art und die Kette periodisch geschlossen.

- *Paritätsinvarianz*
  Gegenüber dem Austausch zweier benachbarter Spins soll das System invariant bleiben, d.h. $h_{j,j+1} = h_{j+1,j}$.

[1] Für die Spingröße 1/2 lassen sich beliebige quadratische Ausdrücke auf eine Linearkombination von Spinoperatoren zurückführen. So ist z.B. $S^x S^y = \frac{i}{2} S^z$.

- *Rotationsinvarianz in der xy-Ebene*
  Die häufigste Abweichung von voller Rotationssymmetrie im Spin-Raum ist die Anisotropie in eine ausgezeichnete Richtung. Sie wird mit der Richtung der Kette identifiziert und in der Regel als z-Achse bezeichnet.

- *Spin-Flip-Symmetrie*
  Das System sei invariant unter dem Übergang von S^z nach $-S^z$. Eine mögliche Symmetriebrechung durch ein äußeres Magnetfeld soll hier nicht berücksichtigt werden.

Unter Berücksichtigung dieser Symmetrien und der Wechselwirkung zwischen nächsten Nachbarn erhält man auf der periodisch geschlossenen Kette den Hamilton-Operator

$$H = \sum_j h_{j,j+1}, \tag{3.1}$$

mit dem lokalen Hamiltonian

$$\begin{aligned} h_{j,j+1} = \alpha_0 A^2 + \alpha_1 (AB + BA) + \alpha_2 B^2 + \alpha_3 A + \alpha_4 B \\ + \alpha_5 ({S_j^z}^2 + {S_{j+1}^z}^2) + c \end{aligned} \tag{3.2}$$

und den Abkürzungen

$$A = S_j^+ S_{j+1}^- + S_j^- S_{j+1}^+ \text{ und } B = S_j^z S_{j+1}^z. \tag{3.3}$$

Die sieben Konstanten $\alpha_0, \alpha_1, \dots, \alpha_5$ und c können beliebig gewählt werden. Die weiter unten behandelten Sonderfälle werden durch die Bedingungen $\alpha_0 = \alpha_1 = \alpha_2 = 0$ (bilinear anisotrop) bzw. $\alpha_0 = \alpha_1 = \alpha_2, \alpha_3 = \alpha_4, \alpha_5 = 0$ (bilinear, biquadratisch, isotrop) eingeschlossen.

3.2 Experimenteller Hintergrund

Nach Formulierung der HALDANE-Vermutung sind seit Mitte der 1980er antiferromagnetische Spin-1-Ketten auch in den Fokus der Experimentalphysiker gerückt. In diesem Abschnitt soll eine kurze Übersicht über die verwendeten Messverfahren und untersuchten Substanzen gegeben werden.

3.2.1 Messverfahren

Im Gegensatz zur makroskopisch beobachtbaren Magnetisierung ferromagnetischer Systeme bedarf es bei antiferromagnetischen Substanzen zum Nachweis magnetischer Ordnung und Eigenschaften feinerer Verfahren. Den Charakter von Grundzustand und ersten Anregungen liefert oft erst die Gesamtheit verschiedenartiger Messungen.

Die Messung der magnetischen *Suszeptibiltät* $\chi(T)$ in Abhängigkeit von der Temperatur T z.B. per SQUID-Magnetometer erlaubt eine Bestimmung der unterschiedlichen magnetischen Phasen. Eine exponentiell abfallende magnetische Suszeptibiltät bei tiefen Temperaturen weist auf eine Anregungslücke hin. Messungen der *Magnetisierung* $M(H)$ in Abhängigkeit eines *äußeren Magnetfeldes* H erlauben eine Charakterisierung des Phasenverhaltens anisotroper Substanzen. Aufgrund solcher Experimente konnte man bespielsweise die Substanz NENP der Haldane-Phase zuordnen [6], die sich in ihrem Verhalten unter äußerem Magnetfeld von der Groß-D-Phase signifikant unterscheidet.

Niederenergetische Neutronen koppeln mit ihrem magnetischen Moment an den Elektronenspin im Festkörper und eignen sich daher exzellent zur Untersuchung lokaler magnetischer Momente. *Inelastische Neutronenstreuung* erlaubt die Bestimmung des dynamischen Strukturfaktors in kondensierter Materie. Positive Myonen werden bei der *Myonen-Spin-Relaxation (μSR)* als Sonden eingesetzt, die im Gegensatz zur elastischen Neutronenstreuung kurzreichweitige magnetische Ordnungen registrieren können. Damit werden kleine und/oder verdünnt auftretende magnetische Momente beobachtbar.

Auf die Spins der Atomkerne im Festkörper wirkt das magnetische Feld naher Elektronen. Auch ohne äußere Magnetfelder kann deshalb *Kernspinresonanz (NMR)* beobachtet werden, wobei die Resonanzfrequenz auf die magnetische Ordnung rückschließen lässt. Auf dem Zeeman-Effekt bei Atomen mit nicht abgeschlossenen Elektronenschalen in einem homogenen Magnetfeld basiert die *Elektronenspinresonanz (ESR)*. Die Absorption von Mikrowellenstrahlung wird in einer paramagnetischen Probe in Abhängigkeit eines äußeren Magnetfelds gemessen. Messungen der Elektronenspinresonanz erlauben eine Charakterisierung der Temperatur- und Magnetfeldabhängigkeit von statischen und dynamischen Spinkorrelationen.

3.2.2 Substanzen

Eine Reihe prominenter Substanzen, die Spin-1-Ketten mit einer Haldane-Anregungslücke zeigen, sind:

- $CsNiCl_3$
  Die ersten Experimente zur HALDANE-Vermutung untersuchten den quasi-eindimensionalen Antiferromagneten $CsNiCl_3$ [7]. Inelastische Neutronenstreuung zeigte klar die Existenz einer Lücke im Anregungsspektrum. Allerdings musste zur Erklärung das Haldane-Szenario leicht modifiziert werden, da bei diesem Halogenid die Wechselwirkung zwischen den Ketten nicht vernachlässigbar ist.

- $AgVP_2S_6$
  Keine signifikante Wechselwirkung zwischen den Ketten zeigt die Substanz $AgVP_2S_6$ [8]. Die experimentellen Resultate von inelastischer Neutronenstreuung an polykristallinen Proben entsprechen quantitativ den theoretischen Vorhersagen zum idealen eindimensionalen Haldane-Antiferromagneten. Die sehr starke Kopplung innerhalb der Kette schränkt weitere Untersuchungen wie z.B. inelastische Neutronenstreuung oder ESR unter äußerem Feld allerdings erheblich ein.

- *NENP*
  Eine ganze Reihe von Messverfahren wurden an der Substanz

$Ni(C_2H_8N_8)_2NO(ClO_4)$ (NENP) [9] angewandt. Von besonderem Interesse ist die Tatsache, dass äußere Magnetfelder die Eigenschaften dieses Systems stark verändern.

- Y_2BaNiO_5
  Die anorganische Haldane-Substanz Y_2BaNiO_5 [10, 11] ist charakterisiert durch Ketten von NiO_6-Oktaedern, die durch nichtmagnetische Y^{3+}- und Ba^{2+}-Ionen voneinander getrennt sind. Im Gegensatz zu NENP ist bei diesem Nickelat Ladungsdotierung möglich.

Mittlerweile ist eine ganze Reihe weiterer organischer und anorganischer Substanzen bekannt, die ebenfalls durch antiferromagnetische Spin-1-Ketten beschrieben werden können. Eine umfangreiche Auflistung von Haldane-Substanzen findet sich in [12].

3.3 Anisotrope bilineare Kette

Beschränkt man sich auf bilineare Wechselwirkung und erlaubt gleichzeitig Anisotropie in einer Richtung, erhält man den rein bilinearen Hamiltonian

$$h_{j,j+1} = S_j^x S_{j+1}^x + S_j^y S_{j+1}^y + \lambda S_j^z S_{j+1}^z + D(S_j^z)^2 \tag{3.4}$$

mit der Austausch-Anisotropie λ und der uniaxialen Anisotropie D als Parameter. Die Eigenschaften der oben vorgestellten Substanzen lassen sich durch diese Modellklasse darstellen. Die biquadratischen Kopplungen werden als klein angenommen und hier vernachlässigt. Das Phasendiagramm (Abb. 3.1) des Hamiltonians (3.4) ist bereits gut untersucht (Übersicht in [13]).

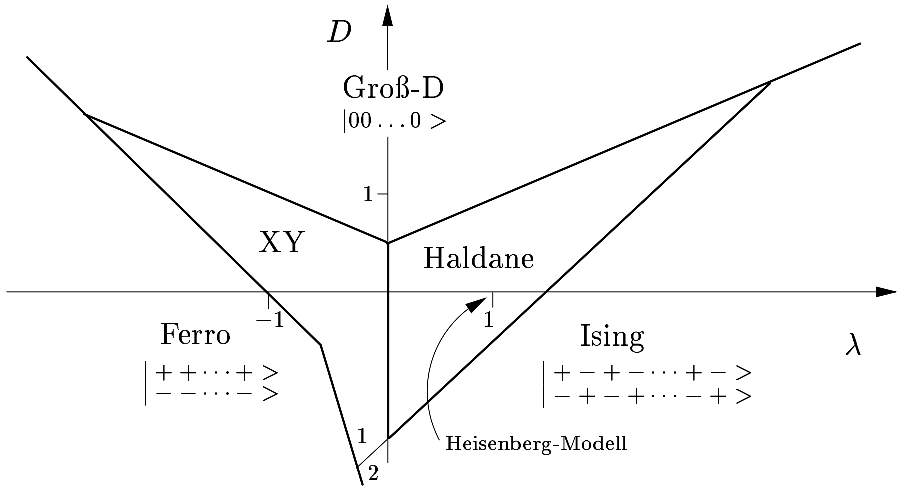


Abbildung 3.1: Schematisches Phasendiagramm der anisotropen bilinearen Spin-1-Kette nach [13].

Regionen mit geordnetem Verhalten findet man bei starker Austausch-Anisotropie λ verbunden mit hinreichend kleiner Single-Ion-Anisotropie D. Bei positivem Vorzeichen von λ befindet sich die Spin-Kette in der Ising-Phase. Hier gibt es zwei Grundzustände mit Neél-Ordnung und eine Anregungslücke. Ferromagnetische Ordnung tritt für stark negatives λ auf.

Alle anderen Phasen sind ungeordnet, aber ansonsten physikalisch sehr verschieden: Für großes D verschwinden im eindeutigen Grundzustand Beiträge mit $S_j^z \neq 0$. Eine Anregungslücke proportional zu D entsteht, da die Lücke im Wesentlichen die Energie ist, um einen Spin nach $S_j^z = \pm 1$ anzuheben. Für kleinere D existieren zwei Phasen, die strikt bei $\lambda = 0$ voneinander getrennt sind [14, 15, 16, 17]. Ist λ positiv, liegt eine Quantenflüssigkeit mit Anregungslücke, die Haldane-Phase, vor. Der isotrope Punkt bei $\lambda = 1$ und $D = 0$ entspricht dem Heisenberg-Modell. Negatives λ führt zu einer XY-Region bestehend aus zwei Phasen mit verschiedenen Korrelationsfunktionen, verbunden durch einen Ising-artigen Übergang [14, 18]. Phasenübergänge aus der ferromagnetischen Phase sowie zwischen Ising- und Groß-D-Phase sind von erster Ordnung. Von Haldane- zu XY-Phase und von XY- zu Groß-D-Phase existieren Kosterlitz-Thouless-artige Phasenübergänge.

3.4 Isotrope Kette

Ebenfalls schon gut untersucht ist der allgemeine isotrope Heisenberg-Hamiltonian mit der lokalen Wechselwirkung

$$h_{j,j+1} = J_1 \; \mathbf{S}_j \mathbf{S}_{j+1} + J_2 \; (\mathbf{S}_j \mathbf{S}_{j+1})^2 \tag{3.5}$$

und den Kopplungskonstanten J_1 und J_2. Eine alternative Darstellung

$$h_{j,j+1} = J \left[\cos\theta \; \mathbf{S}_j \mathbf{S}_{j+1} + \sin\theta \; (\mathbf{S}_j \mathbf{S}_{j+1})^2 \right] \tag{3.6}$$

führt das Modell auf den entscheidenden Parameter θ zurück, da die Konstante J lediglich eine Reskalierung des Spektrums bewirkt.

Das reichhaltige Phasendiagramm (Abb. 3.2) der bilinear-biquadratischen Spin-1-Kette teilt sich in eine ferromagnetische Phase mit verschwindender Anregungslücke und einen antiferromagnetischen Bereich mit Trimer-, Haldane- und Dimer-Phase auf. In der Haldane-Phase zwischen $\theta = -\pi/4$ und $\pi/4$ erwartet man Systeme mit eindeutigem Grundzustand und endlicher Anregungslücke. Prominente Punkte sind hier der Valence-Bond-Solid-Punkt bei $\tan\theta = 1/3$, wo der Grundzustand exakt angegeben werden kann [19], und das gewöhnliche Heisenberg-Modell bei $\theta = 0$. Begrenzt wird die Haldane-Phase bei $\pi/4$, wo das System nach Uimin, Lai und Sutherland Bethe-Ansatz-integrabel ist und die Anregungslücke verschwindet [20, 21, 22]. Ein Gebiet mit Trimerisierung der Grundzustände und geschlossener Anregungslücke schließt an. Im Bereich $\theta = \pi/2$ bis $5\pi/2$ beobachtet man ferromagnetisches Verhalten. Zwischen ferromagnetischer und Haldane-Phase findet man ein Gebiet mit Dimerisierung der Grundzustände und nichtverschwindender Anregungslücke. Exakt lösten Klümper [23, 24, 25] und – unabhängig – Barber und Batchelor [26] den rein biquadratischen Hamiltonian bei $\theta = -\pi/2$. Man fand eine SU(3)-Symmetrie, einen zweifach entarteten Grundzustand und exponentiellen

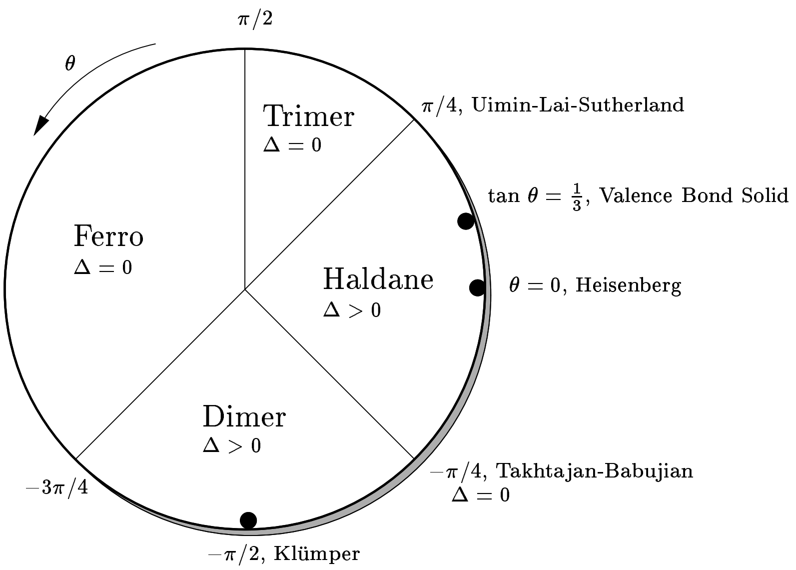


Abbildung 3.2: Phasendiagramm der isotropen bilinear-biquadratischen Spin-1-Kette

Zerfall der Korrelationen. Am Takhtajan-Babujian-Punkt $\theta = -\pi/4$ ist das System wieder Bethe-Ansatz-integrabel und der Grundzustand bei verschwindender Anregungslücke eindeutig [27, 28].

3.5 Mikroskopischer Ursprung der biquadratischen Wechselwirkung

Während dieses vielfältige Phasendiagramm in der Theorie schon seit Jahren studiert wird, ließ der experimentelle Nachweis von signifikanter biquadratischer Wechselwirkung länger auf sich warten. Bei den meisten untersuchten physikalischen Systemen ist der biquadratische Austausch im Verhältnis zum bilinearen zu klein, so dass die Haldane-Phase bei antiferromagnetischen Substanzen bisher nicht verlassen wurde. Mittlerweile wurde jedoch bei der Substanz $LiVGe_2O_2$ [29] eine verschwindende Anregungslücke entdeckt, die von den Autoren durch die Anwesenheit einer signifikanten biquadratischen Austauschwechselwirkung erklärt wird. Mila und Zhang untersuchten in [30] einen mikroskopischen Mechanismus, der zu einem biquadratischen Austausch führt. Dieser Mechanismus soll im Folgenden skizziert werden.

Gegeben sei ein Gitter von Atomen, die jeweils zwei Elektronen in ihrer äußeren Schale besitzen. Je Atom betrachte man drei Orbitale. Die elektronischen Wechselwirkungen an einem Atom liefern die bevorzugte Spin-Konfiguration.

- Die zwei energetisch niedrigsten Orbitale seien fast entartet. In einem Abstand Δ befinde sich das nächsthöhere Energielevel (s. auch Abb. 3.3). Energetisch günstiger sind die *niedrigen Orbitale*.

- Zwischen zwei Elektronen im selben (verschiedenen) Orbitalen wirke die Coulombabstoßung U ($U' < U$). Die beiden Elektronen halten sich also bevorzugt in *unterschiedlichen Orbitalen* auf.
- Die Austauschwechselwirkung $J_H = \frac{1}{2}(E_s - E_t) > 0$ gibt den energetischen Unterschied zwischen Singlett- und Triplettkopplung zweier Elektronen an. Die Elektronen koppeln im Grundzustand zu einem *Triplett* mit Gesamtspin 1.

Resultierend ist ein Spin-1-Zustand gegeben, in dem beide Elektronen in den zwei niedrigen Orbitalen zu einem Gesamtspin 1 koppeln. Das dritte Orbital ist hier leer.

Eine effektive Spin-Spin-Kopplung tritt nun auf, wenn virtuelle Übergänge zu den Nachbaratomen einbezogen werden. Dabei sei t_{lm} die Übergangswahrscheinlichkeit von Orbital l am Gitterplatz i zu Orbital m am Platz j. Seien die Hüpfterme nun im Vergleich zu U', J_H und Δ schwach, bleiben die Elektronen lokalisiert, und angeregte Zustände (Doppelbesetzung eines Orbitals, Besetzung des anregten Orbitals) können nicht angenommen werden. Eine Störungsrechnung, die nur einen Hüpfprozess berücksichtigt, liefert also keinen Beitrag. Möglich ist aber der so genannte *Superaustausch*, bei dem zwischen zwei erlaubten Konfigurationen virtuell ein angeregter Zustand angenommen wird. Da hierfür zwei (virtuelle) Hüpfprozesse erforderlich sind, spricht man von Prozessen zweiter Ordnung. Diese Hüpfprozesse zweiter (und höherer, gerader Ordnung) sorgen für eine effektive Spin-Spin-Kopplung wie sie z.B. dem Spin-1-Heisenberg-Modell zugrunde liegt. Die Vorgehensweise ist analog zur Ableitung des Spin-1/2-Heisenberg-Modells aus dem Hubbard-Modell (siehe auch [31]).

Die Energie-Eigenwerte E_S des effektiven Spin-Hamiltonians $h_{j,j+1}$ aus (3.5) sind wegen seiner Isotropie durch den Gesamtspin zweier benachbarter Plätze j und $j+1$ eindeutig bestimmt. Ist die Energie E_S des Systems aus zwei Gitterpunkten mit Gesamtspin $S = 0, 1, 2$ bekannt, lassen sind die Modellparameter durch

$$J_1 = \frac{1}{2}(E_2 - E_1) \quad \text{und} \tag{3.7}$$

$$J_2 = \frac{1}{3}E_0 + \frac{1}{6}E_2 - \frac{1}{2}E_1 \tag{3.8}$$

bestimmen. Die Energien E_S wiederum lassen sich störungstheoretisch ermitteln, wenn man die Hüpfterme als kleine Parameter betrachtet. Im einfachen Fall mit $t_{11} = t_{12} = t_{13} = 0$ und $t_{22} = t_{33}$ erhält man die Kopplungskonstanten

$$J_1^{(2)} = \frac{1}{2}\frac{t_{22}^2}{U'}(a_2 + a_3) - \frac{2}{3}\frac{t_{23}^2}{U'}(a_1 - a_2) \quad \text{und} \tag{3.9}$$

$$J_2^{(2)} = 0 \tag{3.10}$$

mit $a_1 = (1 - \frac{J_H}{U'})^{-1}$, $a_2 = (1 + 2\frac{J_H}{U'})^{-1}$ sowie $a_3 = (1 + 4\frac{J_H}{U'})^{-1}$ in zweiter Ordnung der Störungsrechnung. Mit $J_2^{(2)}$ verschwindet die biquadratische Wechselwirkung. Dies erklärt, warum die biquadratische Kopplung in den meisten Systemen klein ist. Die bilineare Kopplung $J_1^{(2)}$ setzt sich hingegen aus

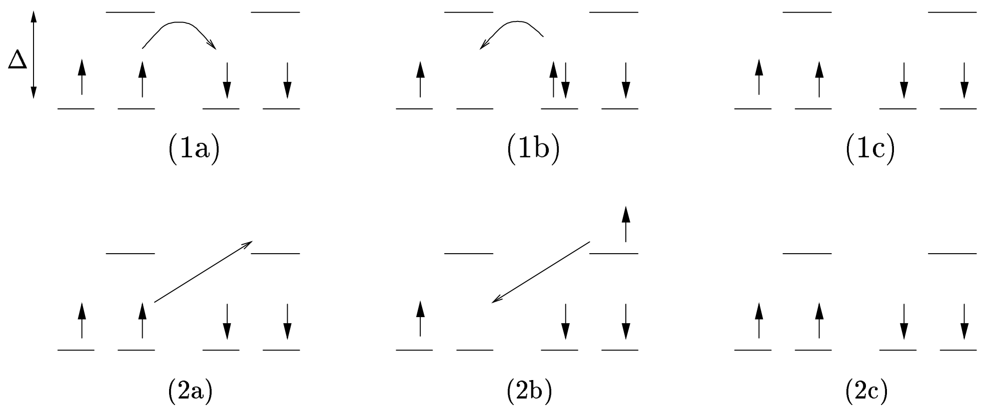


Abbildung 3.3: Typische Austauschprozesse zweiter Ordnung: (1a) – (1c) Antiferromagnetischer bilinearer Austausch, (2a) – (2c) Ferromagnetischer bilinearer Austausch.

zwei konkurrierenden Effekten zusammen. Der erste Effekt (Abb. 3.3 (1a)–(1c)) entspricht einer antiferromagnetischen Superaustausch-Wechselwirkung und beschreibt das virtuelle Hüpfen auf ein besetztes Orbital des Nachbarplatzes. Der zweite Effekt (Abb. 3.3 (2a)–(2c)) stellt ein virtuelles Hüpfen auf das energetisch höher liegende Orbital des Nachbarplatzes dar. Wegen $a_1 > a_2$ begünstig er ferromagnetisches Verhalten. Heben sich jedoch die zwei Effekte gegenseitig auf, verschwindet J_1 in zweiter Ordnung. In diesem Fall muss die Störungstheorie in vierter Ordnung betrieben werden.

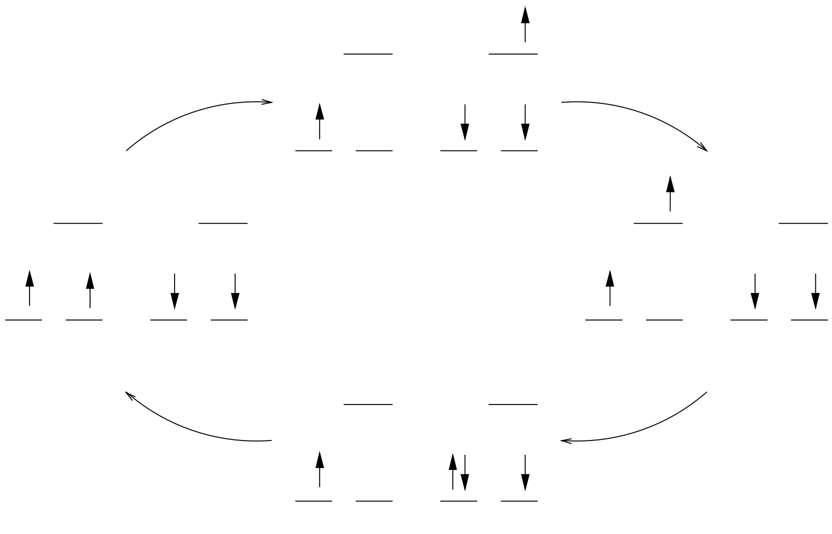


Abbildung 3.4: Typischer Austauschprozess vierter Ordnung, der zu biquadratischer Wechselwirkung führt.

Da Δ viel kleiner als U' und J_H angenommen wird, rühren die stärksten

Beiträge in vierter Ordnung von solchen Prozessen her, bei denen ein virtueller Zustand angenommen wird, wo an beiden Gitterplätzen ein resultierender Spin der Größe 1 vorliegt und sich ein Elektron im angeregten Orbital befindet. Ein Prozess dieser Art ist in Abb. 3.4 skizziert. Solche Wechselwirkungen liefern eine Korrektur zur zweiten Ordnung in der Größenordnung $\delta = t^2/(U'\Delta)$, wobei $t \approx t_{22} \approx t_{23}$. Alle anderen Prozesse vierter Ordnung sind um einen Faktor Δ/J_H oder Δ/U' kleiner und sollen daher vernachlässigt werden.

Schließlich erhält man für die bilineare Kopplung J_1 als Korrektur zum Term zweiter Ordnung lediglich eine geringe Energieverschiebung, die den Übergang zwischen ferromagnetischer und antiferromagnetischer Wechselwirkung leicht verrückt. Die biquadratische Wechselwirkung J_2 taucht erstmalig in vierter Ordnung Störungstheorie auf. Man stellt fest, dass sie negativ ist. Dies bedeutet, dass sich ein so beschriebenes System immer in der unteren Hälfte des Phasendiagramms aus Abb. 3.2 befindet. Zusätzlich erfährt man, dass die relative Größe der biquadratischen Wechselwirkung vom Verhältnis der Hüpfterme t_{lm} zueinander abhängt, und nicht von ihrer absoluten Größe.

3.6 Spektrale Darstellung des allgemeinen Hamiltonians

Alternativ zu der Darstellung in Spinoperatoren lässt sich der lokale Hamiltonian (3.2) auch in spektraler Schreibweise durch Projektionsoperatoren ausdrücken.

Die Tensorielle Multiplikation zweier dreidimensionaler Spin-1-Hilberträume liefert für zwei Gitterplätze einen neundimensionalen Hilbertraum. Der lokale Hamiltonian soll in einer spektralen Darstellung Diagonalgestalt annehmen. Die Basisvektoren der Spektraldarstellung sind also auch Eigenvektoren des lokalen Hamiltonoperators. In Abschnitt 3.1 ist Rotationssymmetrie in der xy-Ebene und Paritätsinvarianz gefordert worden. Die Rotationssymmetrie führt zur Erhaltung von $S_T^z = S_1^z + S_2^z$ benachbarter Spins. Symmetrische und antisymmetrische Zuständen erhalten die Parität $P = \pm 1$. Parität und S_T^z sind also gute Quantenzahlen, wenn man die lokale Basis geeignet wählt.

Mit diesen Symmetrien lassen sich schon sieben Basisvektoren eindeutig identifizieren. Für eine z-Komponente des Gesamtspins von $2, -2$ sind die Vektoren

$$\begin{aligned} |\phi_2\rangle &= |++\rangle \\ |\phi_{-2}\rangle &= |--\rangle \end{aligned} \tag{3.11}$$

als Element der Basis gegeben. Bei $S_T^z = \pm 1$ muss zur Identifizierung der Basiszustände

$$\begin{aligned} |\phi_1^+\rangle &= \tfrac{1}{\sqrt{2}}\left(|+0\rangle + |0+\rangle\right) \\ |\phi_{-1}^+\rangle &= \tfrac{1}{\sqrt{2}}\left(|-0\rangle + |0-\rangle\right) \\ |\phi_1^-\rangle &= \tfrac{1}{\sqrt{2}}\left(|+0\rangle - |0+\rangle\right) \\ |\phi_{-1}^-\rangle &= \tfrac{1}{\sqrt{2}}\left(|-0\rangle - |0-\rangle\right) \end{aligned} \tag{3.12}$$

zusätzlich die Parität als Quantenzahl angegeben werden. Der verbleibende Unterraum der Zustände mit verschwindendem Gesamt-S^z ist dreidimensional. Die Erfüllung der Paritätsinvarianz identifiziert einen antisymmetrischen Zustand

$$\left|\phi_0^-\right\rangle \quad = \tfrac{1}{\sqrt{2}}\left(\left|+-\right\rangle - \left|-+\right\rangle\right) \tag{3.13}$$

eindeutig. Die beiden verbleibenden symmetrischen Zustände

$$\begin{aligned} \left|\phi_{01}^+\right\rangle \quad &= \tfrac{1}{\sqrt{2+a^2}}\left(\left|+-\right\rangle + \left|-+\right\rangle + a\left|00\right\rangle\right) \\ \left|\phi_{02}^+\right\rangle \quad &= \tfrac{1}{\sqrt{2a^2+4}}\left(a\left[\left|+-\right\rangle + \left|-+\right\rangle\right] - 2\left|00\right\rangle\right) \end{aligned} \tag{3.14}$$

gestatten noch einen Freiheitsgrad, der durch den Superpositionsparameter a ausgedrückt wird. Mit diesen Zuständen ist somit eine Basis des neundimensionalen Hilbertraums zweier Spins angeben, die den lokalen Hamiltonian diagonalisiert. Die Größe des Parameters a ist nicht durch die angegebenen Symmetrien festgelegt, sondern richtet sich nach dem speziellen lokalen Hamiltonian.

Aus den neun Basiszuständen lassen sich neun Projektionsoperatoren

$$\mathcal{P}_n^\sigma := \left|\phi_n^\sigma\right\rangle\left\langle\phi_n^\sigma\right| \tag{3.15}$$

bilden. Der lokale Hamiltonian (3.2) lässt sich nun spektral, d.h. als Summe dieser Projektionsoperatoren, darstellen. Unter Annahme der Spin-Flip-Symmetrie bezüglich der z-Achse ist

$$\begin{aligned} h_{j,j+1} = {} & \lambda_2\left(\mathcal{P}_2 + \mathcal{P}_{-2}\right) \\ & + \lambda_1^+\left(\mathcal{P}_1^+ + \mathcal{P}_{-1}^+\right) + \lambda_1^-\left(\mathcal{P}_1^- + \mathcal{P}_{-1}^-\right) \\ & + \lambda_{01}^+\mathcal{P}_{01}^+ + \lambda_{02}^+\mathcal{P}_{02}^+ + \lambda_0^-\mathcal{P}_0^- \end{aligned} \tag{3.16}$$

abhängig von sechs Spektralparametern $\lambda_2, \lambda_1^+, \lambda_1^-, \lambda_{01}^+, \lambda_{02}^+, \lambda_0^-$ und dem Superpositionsparameter a.

Der lokale Hamiltonian lässt sich nun spektral (3.16) oder als Summe von Spinoperatoren darstellen (3.2). Stellt man den den Spin-Hamiltonian in der oben angegebenen Eigenbasis dar, d.h. als 9×9-Matrix, nimmt er Diagonalgestalt an. Diese Diagonalelemente kann man den Spektralparametern zuordnen und erhält zusätzlich eine Bedingung an a (Abbildung 3.5). Umgekehrt kann man die Zuordnung auch nach den Spinparametern auflösen (Abbildung 3.6).

3.7 Symmetrien

Zum Modell der Spin-1-Kette $H(\alpha_0, \alpha_1, \ldots, \alpha_5)$ mit der allgemeinen Nächste-Nachbarn-Wechselwirkung (3.2) gibt es eine Reihe von unitären Transformationen

$$\mathcal{D}^{(i)} = \prod_{j=1}^{N} \mathcal{D}_j, \tag{3.17}$$

$$
\begin{aligned}
\lambda_2 &= \alpha_2 + \alpha_4 + 2\alpha_5 + c \\
\lambda_1^+ &= \alpha_0 + \alpha_3 + \alpha_5 + c \\
\lambda_1^- &= \alpha_0 - \alpha_3 + \alpha_5 + c \\
\lambda_0^- &= \alpha_2 - \alpha_4 + \alpha_5 + c \\
\lambda_{01}^+ &= 2\alpha_0 - \frac{4a}{2+a^2}(\alpha_1 - \alpha_3) + \frac{2}{2+a^2}(\alpha_2 - \alpha_4) + \frac{4}{2+a^2}\alpha_5 + c \\
\lambda_{02}^+ &= 2\alpha_0 + \frac{4a}{2+a^2}(\alpha_1 - \alpha_3) + \frac{a^2}{2+a^2}(\alpha_2 - \alpha_4) + \frac{2a^2}{2+a^2}\alpha_5 + c
\end{aligned}
$$

... und folgende Bedingung an a:

$$
0 = (\alpha_3 - \alpha_1)\, a^2 + (\alpha_2 - \alpha_4 + 2\,\alpha_5)\, a + 2\,(\alpha_1 - \alpha_3)
$$

Abbildung 3.5: Zuordnung zwischen Spin- und Spektralparametern.

mit

$$
\begin{aligned}
\mathcal{D}_j^{(1)} &= e^{\mathrm{i}\gamma S_j^z}, \quad \gamma \text{ reell} && (3.18) \\
\mathcal{D}_j^{(2)} &= e^{\mathrm{i}\frac{\pi}{\sqrt{2}}(S_j^x + S_j^y)} && (3.19) \\
\mathcal{D}_j^{(3)} &= e^{\mathrm{i}\frac{\pi}{2}(S_j^z)^2} && (3.20) \\
\mathcal{D}_j^{(4)} &= \begin{cases} 1 & \text{für } j \text{ gerade} \\ e^{\mathrm{i}\pi S_j^z} & \text{für } j \text{ ungerade} \end{cases} && (3.21)
\end{aligned}
$$

die den Parameterraum $\alpha_{0,\ldots,5}$ auf sich selbst abbilden [32]. Da korrespondierende Parameterkonfigurationen das gleiche Energiespektrum aufweisen, reduziert die Kenntnis der Symmetrien den zu untersuchenden Parameterraum.

Bereits in Abschnitt 3.1 wurde Invarianz gegenüber Rotationen um die xy-Achse und der Spiegelung an der xy-Ebene gefordert. Die unitären Transformationen $\mathcal{D}^{(1)}$ und $\mathcal{D}^{(2)}$ repräsentieren Abbildungen dieser Art. Demgemäß lassen sie sowohl die Parameter α_i als auch – in anderer Darstellung – die Spektralparameter invariant.

Die unitäre Transformation $\mathcal{D}^{(3)}$ beeinflusst lediglich die Parameter α_1 und α_3, so dass

$$
\begin{aligned}
&H(\alpha_1, \alpha_3) \to \\
&\quad \mathcal{D}^{(3)}\, H(\alpha_1, \alpha_3)\, \mathcal{D}^{(3)\dagger} = H(2\alpha_3 - \alpha_1, \alpha_3).
\end{aligned} \tag{3.22}
$$

$$
\begin{aligned}
\alpha_0 &= \frac{1}{2+a^2}\left(\lambda_{01}^{+} + \frac{a^2}{2}\lambda_{02}^{+}\right) - \frac{1}{2}\lambda_0^{-} \\
\alpha_1 &= \frac{a}{2+a^2}\left(\lambda_{02}^{+} - \lambda_{01}^{+}\right) + \frac{1}{2}\left(\lambda_1^{+} - \lambda_1^{-}\right) \\
\alpha_2 &= \frac{1}{2+a^2}\left(a^2\lambda_{01}^{+} + 2\lambda_{02}^{+}\right) + \frac{1}{2}\lambda_0^{-} - \left(\lambda_1^{+} + \lambda_1^{-}\right) + \frac{1}{2}\lambda_2 \\
\alpha_3 &= \frac{1}{2}\left(\lambda_1^{+} - \lambda_1^{-}\right) \\
\alpha_4 &= \frac{1}{2}\left(\lambda_2 - \lambda_0^{-}\right) \\
\alpha_5 &= \frac{1}{2+a^2}\left(\left[1-a^2\right]\lambda_{01}^{+} + \left[\frac{a^2}{2} - 2\right]\lambda_{02}^{+}\right) - \frac{1}{2}\lambda_0^{-} + \frac{1}{2}\left(\lambda_1^{+} + \lambda_1^{-}\right)
\end{aligned}
$$

Abbildung 3.6: Zuordnung zwischen Spin- und Spektralparametern.

Betrachtet man α_3 und $\alpha_3 - \alpha_1$ als Variablen, entspricht $\mathcal{D}^{(3)}$ dem Übergang von $\alpha_1 - \alpha_3$ nach $\alpha_3 - \alpha_1$. Da das Spektrum für beide Modelle gleich ist, reicht es aus, H für $\alpha_3 - \alpha_1 \geq 0$ zu untersuchen. Jeder Punkt auf der Linie $\alpha_3 = \alpha_1$ ist ein Fixpunkt der Symmetrietransformation $\mathcal{D}^{(3)}$. Der Hamiltonian H erreicht also hier höhere Symmetrie. Für gerade Kettenlängen N bildet $\mathcal{D}^{(4)}$ als Rotation auf dem Untergitter den Hamiltonian H gemäß

$$
\begin{aligned}
&H(\alpha_1, \alpha_3) \to \\
&\quad \mathcal{D}^{(4)}\, H(\alpha_1, \alpha_3)\, \mathcal{D}^{(4)\dagger} = H(-\alpha_1, -\alpha_3)
\end{aligned}
\tag{3.23}
$$

in den eigenen Parameterraum ab. Das Spektrum zeigt sich also invariant gegenüber dem simultanen Übergang $(\alpha_1, \alpha_3) \to (-\alpha_1, -\alpha_3)$.

In der spektralen Darstellung des Hamiltonoperators nach (3.16) erreicht die Transformation $\mathcal{D}^{(3)}$ einen Darstellungswechsel von a nach $-a$ (Herleitung in Anhang A.1). Der Punkt höherer Symmetrie entspricht dem Sonderfall $a = 0$. Durch $\mathcal{D}^{(4)}$ wird der Superpositionsparameter a auf $-a$ und die Eigenzustände gemäß

$$
\begin{aligned}
|\phi_1^{+}\rangle &\longleftrightarrow |\phi_1^{-}\rangle \\
|\phi_{-1}^{+}\rangle &\longleftrightarrow |\phi_{-1}^{-}\rangle
\end{aligned}
\tag{3.24}
$$

aufeinander abgebildet (s. Anhang A.2). Im nächsten Kapitel wird ein realer Parameter σ, mit $\sigma^2 = 1$, eingeführt, der die Parität eines ausgezeichneten Zustands im Unterraum mit $S_T^z = \pm 1$ ausdrückt. In diesem Fall vermittelt die unitäre Transformation $\mathcal{D}^{(4)}$ zusätzlich den Übergang von $\sigma \to -\sigma$.

Für eine große Klasse der durch (3.2) oder (3.16) beschriebenen Spin-1-Ketten ist der Grundzustand exakt bekannt. KLÜMPER, SCHADSCHNEIDER und ZITTARTZ [33] gelang es 1993, diesen Grundzustand und seine Eigenschaften mithilfe des *Matrixprodukt-Ansatzes* zu berechnen.

4 Matrixprodukt-Grundzustände

Analytische und numerische Untersuchungen von Vielteilchensystemen haben häufig zum Ziel, Grundzustands- und niedrigliegende Energien zu bestimmen, um auf das Tieftemperaturverhalten dieser Systeme schließen zu können. Eine besondere Rolle für das Verständnis von Grundzustandseigenschaften spielen analytisch exakt lösbare Systeme. Das klare Konzept des Optimum-Grundzustands-Ansatz, dargestellt in Abschnitt 4.1, führt für eine Reihe von quantenmechanischen und stochastischen Systemen zu unterschiedlichen Lösungsverfahren. Der Matrixprodukt-Grundzustand ist eine wichtige Realisation des Optimum-Grundzustands für Spinketten und wird in Abschnitt 4.2 vorgestellt. Der Matrixprodukt-Ansatz beinhaltet den wichtigen Fall des VBS-Modells (Abschnitt 4.3). In Abschnitt 4.4 wird angegeben, wie sich Eigenschaften, wie z.B. Erwartungswerte und Korrelationen, von Matrixprodukt-Grundzuständen mittels der Transfermatrix-Methode berechnen lassen.

4.1 Optimum-Grundzustand

Optimum-Grundzustände besitzen die besondere Eigenschaft, gleichzeitig alle lokalen Wechselwirkungsoperatoren zu minimieren.

Ist das zu untersuchende System auf einem beliebigen Gitter definiert und die Wechselwirkungen auf nächste Nachbarn beschränkt, so setzt sich der globale Hamiltonian

$$H = \sum_{<i,j>} h_{i,j} \tag{4.1}$$

aus lokalen Wechselwirkungstermen zusammen. Diagonalisierung des lokalen Hamiltonians $h_{i,j}$ liefert die lokale Grundzustandsenergie e. Damit bildet

$$E_{\min} = \sum_{<i,j>} e \tag{4.2}$$

eine untere Schranke für das globale Spektrum von H. Im Allgemeinen enthält der globale Grundzustand $|\psi_0\rangle$ auch lokal angeregte Zustände und seine Energie $E = \langle\psi_0|H|\psi_0\rangle$ ist echt größer als $E_{\min}$.

In manchen Fällen jedoch entspricht die globale Grundzustandsenergie exakt der Summe der lokalen Grundzustandsenergien. Einen solchen Grundzustand nennt man *optimal*, weil seine Energie die untere Grenzenergie $E_{\min}$ bestmöglich annimmt. Da sich dieser *Optimum-Grundzustand* ausschließlich aus lokalen Eigenzuständen zusammensetzt, müssen zu seiner Bestimmung zunächst die lokalen Grundzustände ermittelt werden. Anschließend muss geprüft werden, ob sie sich zu einem globalen Grundzustand kombinieren lassen.

Neben dem wichtigen Konzept des Matrixprodukt-Grundzustands für Spin-Ketten lassen sich auch in anderen Systemen Optimum-Grundzustände finden. Für verallgemeinerte Hubbard-Modelle in beliebigen Dimensionen ermittelten DE BOER und SCHADSCHNEIDER im Jahr 1995 Optimum-Grundzustände [34] und konnten so exakte Stabilitätskriterien für verschiedene Grundzustandstypen, darunter der η-pairing-Zustand, angeben.

4.2 Matrixprodukt-Grundzustand

Für eindimensionale Systeme ist der Matrixprodukt-Grundzustand die natürliche Realisierung des Optimum-Grundzustands.

Ein einfaches Beispiel ist der Ferromagneten mit leichter magnetischer Anisotropie. Hier entspricht der Grundzustand

$$\big|\uparrow\uparrow\ldots\uparrow\big\rangle = |\uparrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle \otimes \cdots \otimes |\uparrow\rangle = \prod_j^{\otimes} |\uparrow\rangle_j \tag{4.3}$$

einer maximalen Ausrichtung aller Spins in die Vorzugsrichtung. Auch die lokale Wechselwirkung wird durch eine maximale Spinausrichtung minimiert. Es liegt also ein Optimum-Grundzustand vor, der sich durch ein einfaches Tensorprodukt der lokalen Grundzustände ausdrücken lässt.

Im antiferromagnetischen Fall, wo alternierendes Verhalten erwartet wird, versagt jedoch diese naive Idee. KLÜMPER, SCHADSCHNEIDER und ZITTARTZ gaben im Jahr 1993 explizite Optimum-Grundzustände von antiferromagnetischen Spin-1-Ketten an. Die zugehörige Modellklasse zeigt das von Haldane postulierte Verhalten – eindeutiger Grundzustand, endliche Anregungslücke und exponentieller Zerfall der Korrelationen –, das als generisch für die Spin-1-Kette betrachtet werden kann. Ihnen gelang es, in Verallgemeinerung des einfachen Tensorprodukts die gesuchten Grundzustände als Produkt von Matrizen darzustellen. Diese Eigenschaft etablierte den Namen *Matrixprodukt-Grundzustand (MPG)*.

Übliche analytische und numerische Verfahren beabsichtigen, Grundzustandseigenschaften ausgehend von einem gegebenen Hamiltonian zu berechnen. Im Gegensatz zur dieser konventionellen Vorgehensweise wird beim Matrixprodukt-Ansatz zunächst eine Schar von exakten Grundzuständen mit ihren Eigenschaften konstruiert. Aus den zugehörigen Hamilton-Operatoren in spektraler Darstellung wird dann die entsprechende Klasse von Spin-Hamiltonians benannt. Von Interesse sind dabei Grundzustände zu je einem Modell, die eindeutig oder nur gering entartet sind. Exemplarisch soll die Konstruktion des Matrixprodukt-Grundzustands für Spin-1-Ketten nach [33] dargestellt werden.

Sei eine lokale Matrix aus Zuständen der Dimension 2×2 durch

$$m = \begin{pmatrix} \big|0\big\rangle & -\sqrt{a}\big|+\big\rangle \\ \sqrt{a}\big|-\big\rangle & -\sigma\big|0\big\rangle \end{pmatrix} \tag{4.4}$$

mit

$$a \neq 0, \quad \sigma \neq 0 \tag{4.5}$$

gegeben[1]. Auf einer solchen Matrix sei ein Matrixprodukt $\otimes$ definiert, das die Einträge der Zustandsmatrizen gemäß der üblichen Matrixmultiplikation über

$$(m \otimes m')_{ik} = \sum_j (m)_{ij} \otimes (m')_{jk} \tag{4.6}$$

tensoriell miteinander verknüpft. Der mit dieser Operation konstruierte globale Zustand

$$\begin{aligned} \big|\psi_0(a,\sigma)\big\rangle &= \mathrm{tr}\,(m \otimes m \otimes \cdots \otimes m) \\ &= \sum_k \,(m \otimes \cdots \otimes m)_{kk} \end{aligned} \tag{4.7}$$

ist eindeutig und durch die Spurbildung translationsinvariant. Aufgrund seiner Konstruktion aus Tensorprodukten von Zustandsmatrizen bezeichnet man ihn als *Matrixprodukt-Zustand.*

Dieser Zustand soll einen Optimum-Grundzustand einer Parameterkonfiguration von (3.2) bilden. Ein Operator wirkt komponentenweise auf die Zustandsmatrix. Damit reduziert die offensichtliche Implikation

$$H\big|\psi_0(a,\sigma)\big\rangle = 0, \qquad \text{wenn } h_{j,j+1}\big|\psi_0(a,\sigma)\big\rangle = 0 \quad \text{für alle } j \tag{4.8}$$

das Problem auf die Untersuchung von

$$h\ \,(m \otimes m) = 0 \tag{4.9}$$

im Hilbertraum zweier Gitterplätze, da der lokale Hamiltonian h auf alle anderen Plätzen lediglich trival wirkt. Es reicht hier aus, zwei beliebige benachbarte Gitterplätze zu untersuchen, da die Zustandsmatrizen m für alle Gitterplätze j die gleiche Struktur besitzen. Die vier Einträge in

$$m \otimes m = \begin{pmatrix} \big|00\big\rangle - a\big|+-\big\rangle & \sqrt{a}\,\big(-\big|0+\big\rangle + \sigma\big|+0\big\rangle\big) \\ \sqrt{a}\,\big(\big|-0\big\rangle - \sigma\big|0-\big\rangle\big) & \big|00\big\rangle - a\big|-+\big\rangle \end{pmatrix} \tag{4.10}$$

sind linear unabhängig. Dem Postulat aus (4.9) entsprechend, spannen sie genau dann einen vierdimensionalen lokalen Grundzustandsraum zur Energie $e = 0$ auf, wenn die Parameter der Projektionsoperatoren aus Abschnitt 3.6

$$\lambda_1^{-\sigma} = \lambda_{02}^{+} = \lambda_0^{-} = 0, \tag{4.11}$$

verschwinden. Dies hat zur Konsequenz, dass die sechs Spektralparameter aus (3.16) auf

$$\lambda_2 > 0, \quad \lambda_1 = \lambda_1^{\sigma} > 0 \quad \text{und} \quad \lambda_0 = \lambda_{01}^{+} > 0 \tag{4.12}$$

mit $|\sigma| = 1$ reduziert werden.

Der durch (4.7) gebildete Zustand ist also tatsächlich ein Optimum-Grundzustand. Aufgrund seiner Konstruktionsweise spricht man vom *Matrixprodukt-Grundzustand* (MPG). Der zugehörige Spinketten-Hamiltonian $H = \sum_j h_{j,j+1}$ mit

$$h_{j,j+1}\,(\lambda_0,\lambda_1,\lambda_2,a,\sigma) = \lambda_2\,(\mathcal{P}_2 + \mathcal{P}_{-2}) + \lambda_1\,\big(\mathcal{P}_1^{\sigma} + \mathcal{P}_{-1}^{\sigma}\big) + \lambda_0\mathcal{P}_{01}^{+}. \tag{4.13}$$

[1]Eine alternative, äquivalente Definition ist über $m = \begin{pmatrix} \big|0\big\rangle & \sqrt{a}\big|+\big\rangle \\ \sqrt{a}\big|-\big\rangle & \sigma\big|0\big\rangle \end{pmatrix}$ möglich.

hängt von vier kontinuierlichen und einem diskreten Parameter ab, während der Grundzustand selber nur von dem Parameter a abhängt.

Matrixprodukt-Grundzustände lassen sich auch für höhere Spingrößen und andere Topologien konstruieren. Eine natürliche Erweiterung auf höhere Gitterdimensionen ist das Vertex-Zustands-Modell. Niggemann untersuchte in [35] Grundzustände von Spin-3/2-Systemen. Dazu gehörten Ketten, Leitern und das Hexagonalgitter. Eine umfassende Untersuchung für Spin-2-Ketten findet man bei Ahrens [36].

4.3 Das VBS-Modell

Ein prominentes Beispiel eines Matrixprodukt-Grundzustands stellt das isotrope Valence-Bond-Solid-Modell (VBS-Modell) dar. Im Jahr 1987 fanden Affleck, Kennedy, Lieb und Tasaki [19] exakt angebbare Grundzustände für Heisenberg-Modelle verschiedener Spingrößen und Koordinationszahlen. Bedeutung erlangte das von ihnen gefundene VBS-Modell für Spin-1-Ketten als repräsentativer Punkt für die Haldane-Phase. Als Matrixprodukt-Grundzustand lässt sich dieses mit den Parameterwerten

$$a = 2, \quad \sigma = 1, \quad \lambda_0 = \lambda_1 = \lambda_2 \tag{4.14}$$

darstellen. Die Grundidee hinter dem VBS-Modell sei zunächst an diesem Beispiel der Spin-1-Kette erläutert.

Man stelle sich einen lokalen Spin-1-Zustand als zwei zu einem Triplett gekoppelte Spins der Größe 1/2 vor.

$$|+\rangle \quad \rightarrow \quad |\uparrow\uparrow\rangle \tag{4.15}$$

$$|\,0\,\rangle \quad \rightarrow \quad \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle\right) \tag{4.16}$$

$$|-\rangle \quad \rightarrow \quad |\downarrow\downarrow\rangle \tag{4.17}$$

Diese Spins seien jeweils mit den Spins benachbarter Gitterplätze in einem Singlett verbunden (siehe Abb. 4.1). Der Hilbertraum zweier Gitterplätze setzt

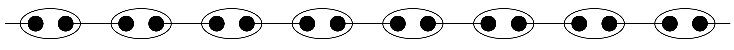


Abbildung 4.1: Der VBS-Zustand entspricht einer Triplettkopplung zweier Spins der Größe 1/2 auf jedem Gitterplatz und eine Singlettkopplung auf den Verbindungslinien.

sich nun zusammen aus vier Spins der Größe 1/2. Zwei davon sind zu einem Singlett mit dem Gesamtspin 0 über die Verbindung gekoppelt. Die restlichen zwei Spins sind abgesehen von der Symmetrisierung durch die Triplettbildung in ihrer Ausrichtung frei und können zu einem Gesamtspin von 1 oder 0 koppeln.

Zustände mit einem Gesamtspin von 2 können also lokal nicht auftreten. Damit wird der ursprüngliche lokale Hilbertraum von neun Zuständen um das Spin-2-Quintett auf vier Zustände reduziert. Der zugehörige Hamiltonoperator

$$H_{\mathrm{VBS}} = \sum_j \mathcal{P}_2(j, j+1) = \sum_j \left[\mathbf{S}_j \mathbf{S}_{j+1} + \frac{1}{3} \left(\mathbf{S}_j \mathbf{S}_{j+1} \right)^2 + \frac{2}{3} \right] \tag{4.18}$$

entspricht einer lokalen Projektion auf Zustände mit $S_{\mathrm{ges}} = 2$ und kann als eine Kombination aus bilinearen und biquadratischen Kopplungen von Spinoperatoren geschrieben werden.

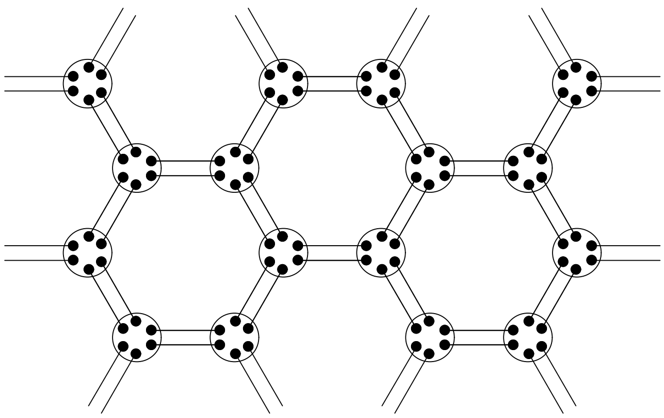


Abbildung 4.2: VBS-Zustand auf dem Spin-3-Hexagonalgitter. Jeder Gitterplatz enthält sechs Spins der Größe 1/2, die jeweils mit benachbarten Spins zu einem Singlett koppeln.

Sowohl Matrixprodukt-Grundzustands- als auch VBS-Modelle lassen sich ebenfalls für höhere Spingrößen und andere Topologien entdecken. Während in dieser Arbeit das VBS-Modell für die Spin-1-Kette die meiste Relevanz besitzt, wurden in der Originalarbeit die Ergebnisse bereits allgemeiner angegeben. Neben einer wählbaren Spingröße $S > 1/2$ ist die Koordinationszahl z der Gittertopologie mit der Einschränkung

$$M = \frac{2S}{z}, \quad M \in \mathbb{N} \tag{4.19}$$

ein weiterer Parameter. Ein Beispiel dafür ist der VBS-Zustand auf dem Spin-3-Hexagonalgitter (Abb. 4.2). Der allgemeine Hamiltonian des VBS-Modells

$$H_{\mathrm{VBS}} = \sum_j \sum_{J=2S-M+1}^{2S} K_J \mathcal{P}_J(j, j+1), \quad K_J \geq 0 \tag{4.20}$$

besteht aus einer Summe von Projektoren $\mathcal{P}_J$ auf den Unterraum zum lokalen Gesamtspin J.

4.4 Transfermatrix-Methode

Die Berechnung von Grundzustandseigenschaften nutzt den besonderen Charakter des Matrixprodukt-Grundzustands. Soll beispielsweise der Erwartungswert

$$\langle A_n \rangle = \frac{\langle \psi_0 | A_n | \psi_0 \rangle}{\langle \psi_0 | \psi_0 \rangle} \tag{4.21}$$

der räumlich lokalisierten Observablen A_n im Matrixprodukt-Grundzustand $|\psi_0\rangle$ berechnet werden, kann die Rechnung auf die gewöhnliche Matrixmultiplikation von Transfermatrizen zurückgeführt werden. Das im Nenner stehende Quadrat der Norm

$$\begin{aligned} Z &= \|\psi_0\|^2 = \langle \psi_0 | \psi_0 \rangle \\ &= \sum_{i_\nu, j_\nu} \langle (m)_{i_1 i_2} | (m)_{j_1 j_2} \rangle \cdot \langle (m)_{i_2 i_3} | (m)_{j_2 j_3} \rangle \cdot \ldots \cdot \langle (m)_{i_L i_1} | (m)_{j_L j_1} \rangle \end{aligned} \tag{4.22}$$

und der Zähler aus (4.21)

$$\begin{aligned} \langle \psi_0 | A_n | \psi_0 \rangle = \sum_{i_\nu, j_\nu} & \langle (m)_{i_1 i_2} | (m)_{j_1 j_2} \rangle \cdot \ldots \cdot \langle (m)_{i_n i_{n+1}} | A_n | (m)_{j_n j_{n+1}} \rangle \cdot \ldots \\ & \cdot \langle (m)_{i_L i_1} | (m)_{j_L j_1} \rangle \end{aligned} \tag{4.23}$$

sind dann durch eine Spurbildung über entsprechend definierte Transfermatrizen darstellbar.

Im Gegensatz zu den Zustandsmatrizen enthalten die Transfermatrizen als Einträge Skalare. Die Einträge der lokalen Transfermatrix

$$(T)_{l_n l_{n+1}} := \langle (m)_{i_n i_{n+1}} | (m)_{j_n j_{n+1}} \rangle \tag{4.24}$$

bestehen aus Skalarprodukten von lokalen Zuständen. Zur einfacheren Handhabung wird eine eindeutige Zuordnung $(i_n j_n) \to l_n$ eingeführt, die aus dem zunächst vierparametrigen Tensor eine Transfermatrix der Dimension 4×4 bildet. Analog definiert man zu einem bestimmten Operator A die assoziierte Transfermatrix $T[A]$, mit den Einträgen

$$(T[A])_{l_n l_{n+1}} := \langle (m)_{i_n i_{n+1}} | A | (m)_{j_n j_{n+1}} \rangle. \tag{4.25}$$

Da hier homogene Systeme betrachtet werden, sind die lokalen Zustandsmatrizen m und damit die Transfermatrizen T unabhängig vom Gitterplatz. Auf den Ortsindex wird deshalb hier verzichtet. Mit den so definierten Zustandsmatrizen können das Normquadrat

$$\begin{aligned} Z &= \|\psi_0\|^2 = \langle \psi_0 | \psi_0 \rangle \\ &= \sum_{l_\nu} (T)_{l_1 l_2} \, (T)_{l_2 l_3} \ldots (T)_{l_L l_1} \\ &= \mathrm{tr} \left\{ (T)^L \right\} \end{aligned} \tag{4.26}$$

und der Zähler

$$\begin{aligned} \langle\psi_0|A_n|\psi_0\rangle &= \sum_{l_\nu}(T)_{l_1 l_2}\ldots(T[A])_{l_n l_{n+1}}\ldots(T)_{l_L l_1} \\ &= \mathrm{tr}\ \left\{T[A]\ \ T^{L-1}\right\} \end{aligned} \tag{4.27}$$

vereinfacht ausgedrückt und damit der Erwartungswert für die endliche Kette analytisch exakt berechnet werden. In der Regel ist die Grenzwertbildung für unendliche Ketten und damit der Schluß auf den thermodynamischen Limes möglich.

Als Beispiel soll die Norm des Matrixprodukt-Grundzustands (4.7) für die Spin-1-Kette berechnet werden. Zunächst wird eine Zuordnung $(i_n j_n) \to l_n$ mit

$$(11) \to 1, \quad (22) \to 2, \quad (12) \to 3, \quad (21) \to 4 \tag{4.28}$$

eingeführt. Sie kann beliebige Form annehmen. Für den vorliegenden Fall erweist sie sich wie hier definiert als zweckmäßig. Damit wird dann die Transfermatrix

$$T = \begin{bmatrix} 1 & |a| & 0 & 0 \\ |a| & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\sigma & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\sigma \end{bmatrix} \tag{4.29}$$

aus (4.24) gebildet. Ihre Eigenwerte und zugehörigen Eigenvektoren

$$\begin{aligned} \chi_0 &= 1+|a|\,, & |u_0\rangle &= \tfrac{1}{\sqrt{2}}(1,1,0,0)^t \\ \chi_1 &= 1-|a|\,, & |u_1\rangle &= \tfrac{1}{\sqrt{2}}(1,-1,0,0)^t \\ \chi_2 &= -\sigma, & |u_2\rangle &= (0,0,1,0)^t \\ \chi_3 &= -\sigma, & |u_3\rangle &= (0,0,0,1)^t \end{aligned} \tag{4.30}$$

werden für die Spurbildung benötigt. Damit erhält man das Normquadrat

$$\begin{aligned} Z &= \mathrm{tr}\, T^L \\ &= \chi_0^L + \chi_1^L + \chi_2^L + \chi_3^L \\ &= (1+|a|)^L + (1-|a|)^L - 2(\sigma)^L \end{aligned} \tag{4.31}$$

für eine Kette der Länge L. In Anhang B wird die Transfermatrix-Methode angewandt, um die Energie eines zum MPG orthogonalen Variationszustands zu berechnen.

Bereits in [33] gaben KLÜMPER, SCHADSCHNEIDER und ZITTARTZ die Erwartungswerte

$$\left\langle S_j^{x,y,z}\right\rangle = 0, \quad \langle S_j^z S_j^z\rangle = \frac{|a|}{1+|a|} \tag{4.32}$$

und die Zwei-Punkt-Korrelationen

$$\langle S_1^z S_r^z\rangle = -\frac{a^2}{(1-|a|)^2}\left(\frac{1-|a|}{1+|a|}\right)^r \tag{4.33}$$

$$\text{und}\ \ \langle S_1^x S_r^x\rangle = -|a|\,[\sigma + \mathrm{sgn}\,a]\left(\frac{-\sigma}{1+|a|}\right)^r, \quad r \geq 2 \tag{4.34}$$

sowohl für den S^z-Operator als auch für den S^x-Operator an den Gitterplätzen 1 und r an. Damit ergeben sich die longitudinale Korrelationslänge

$$\xi_l^{-1} = \ln \left| \frac{1+|a|}{1-|a|} \right| \tag{4.35}$$

und die transversale Korrelationslänge

$$\xi_t^{-1} = \ln(1+|a|). \tag{4.36}$$

Die beiden Größen sind in Abbildung 4.3 skizziert.

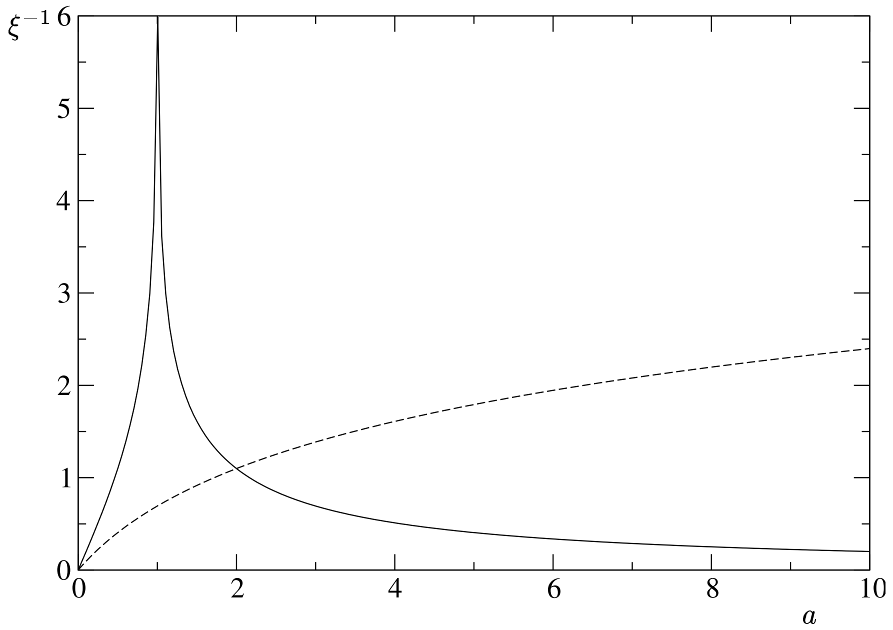


Abbildung 4.3: Inverse Korrelationslängen beim Matrixprodukt-Grundzustand. Die durchgezogene Linie stellt die longitudinale, die gestrichelte Linie die transversale inverse Korrelationslänge dar.

5 Dichtematrix-Renormierungsgruppe

In diesem Kapitel soll die leistungsfähige numerische Methode der Dichtematrix-Renormierungsgruppe (DMRG) vorgestellt werden. Abschnitt 5.1 gibt einen kurzen Abriss über verschiedene numerische Verfahren. In Abschnitt 5.2 wird das Prinzip der Renormierungsgruppe vorgestellt. Die entscheidende Idee der Dichtematrix-Projektion wird in Abschnitt 5.3 erläutert. Abschnitt 5.4 führt den in dieser Arbeit verwendeten DMRG-Algorithmus vor. Im Anschluss daran werden Varianten des Verfahrens präsentiert.

Inzwischen gibt es Reihe von Fortentwicklungen der DMRG-Methode. Hallberg präsentierte in [37] einen Algorithmus zur Berechnung von dynamischen Eigenschaften niedrigdimensionaler Spinsysteme. Die Transfermatrix-Dichtematrix-Renormierungsgruppe (TMRG) wurde von Wang und Xiang entwickelt [38], Sie erlaubt die Bestimmung von thermodynamischen Eigenschaften eindimensionaler Quantenmodelle. Auch für zweidimensionale klassische Spin-Modelle und stochastische Prozesse kann die DMRG eingesetzt werden [31].

Zur Untersuchung von Spin-Systemen ist im Rahmen dieser Diplomarbeit ein DMRG-Programm entstanden. Im Anhang C werden die entsprechenden Spezifikationen angegeben.

5.1 Numerische Verfahren

Die Festkörperphysik beschäftigt sich im Allgemeinen mit Systemen, deren beobachtbares makroskopische Verhalten auf bekannte oder angenommene mikroskopische Wechselwirkungen zurückgeführt werden soll. Man strebt dazu an, das Energiespektrum des zugehörigen Hamiltonoperators möglichst umfassend zu bestimmen. Ziel ist also, einen vorgegebenen Hamiltonian vollständig zu diagonalisieren oder die relevanten Energie-Eigenwerte hinreichend genau anzunähern. Das Problem schöpft seine Komplexität aus der hohen Anzahl (typischerweise in der Größenordnung 10^{23}) wechselwirkender Teilchen, da der Hilbertraum exponentiell mit der Teilchenzahl wächst. Zur Untersuchung der in dieser Arbeit behandelten Spinketten werden in der Praxis verschiedene numerische Methoden angewandt, um Grundzustand und Anregungen dieser eindimensionalen Systeme zu bestimmen. Zu den bekanntesten numerischen Verfahren auf diesem Gebiet zählen die exakte Diagonalisierung, Quanten-Monte-Carlo-Verfahren und die Dichtematrix-Renormierungsgruppe.

In Systemen mit geringer Korrelationslänge kann man unter geschickter Ausnutzung von Symmetrien bereits gute Ergebnisse mit Hilfe Computer-gestützter *exakter Diagonalisierung* erzielen. Im Bereich von Spinketten stößt man hier allerdings momentan schon bei etwa 30 Gitterplätzen an die von der

Rechenleistung vorgegebenen Grenzen. Unter Berücksichtigung von Finite-size-Korrekturen lassen sich bei geeigneten Problemen Rückschlüsse auf das gewünschte Verhalten im thermodynamischen Limes ziehen. Freilich reichen in vielen Fällen die behandelten Systemgrößen nicht aus, um makroskopisches Verhalten richtig zu modellieren.

Die Grundidee hinter *Quanten-Monte-Carlo-Simulationen* (QMC) ist, die Schrödinger-Gleichung für den Grundzustand zu lösen, indem die Gesamtenergie des Systems als Erwartungswert des Hamiltonoperators durch Integration über hunderte von Spinkonfigurationen berechnet wird. Jede Monte-Carlo-Simulation eines d-dimensionalen quantenmechanischen Problems verwendet eine Abbildung auf ein $d+1$-dimensionales klassisches Problem. Diese Abbildung wird von der Trotter-Suzuki-Zerlegung geleistet. Allen QMC-Methoden gemeinsam ist die Verwendung von Zufallszahlen: Energien oder andere Eigenschaften werden daher als statistische Mittelwerte erhalten, die mit einem statistischen Fehler versehen sind. Dieser wird meist als Standardabweichung angegeben. Hier liegt der Grund für den oft großen Rechenzeitbedarf, denn die Standardabweichung ist zwar unabhängig von der Dimension, verringert sich aber nur langsam mit der Größe der Stichprobe.

Eine effiziente und sehr genaue Methode zur Behandlung von größeren Systemen stellt die 1992 von White entwickelte *Dichtematrix-Renormierungsgruppe* (DMRG) [39] dar.

5.2 Prinzip der Renormierungsgruppe

Die DMRG-Methode beruht auf der numerischen Renormierungsgruppe-Methode (RG) von Wilson [40], bei der ein eindimensionales System sukzessiv vergrößert wird. Der mit der Kettenlänge exponentiell anwachsende Hilbertraum wird dabei nach jedem Schritt durch Auswahl der relevanten Zustände auf eine feste Größe gestutzt, so dass benötigte Rechenzeit und Speicherplatz konstant gehalten können. Das Kriterium für die Selektion der wichtigsten Zustände erweist sich dabei als nicht triviales Problem.

Am Anfang des RG-Algorithmus steht eine hinreichend kleine Quantenkette der Länge L mit einem Hilbertraum der Größe m. Ihr Hamiltonian H_L kann exakt diagonalisiert werden. Im weiteren Verlauf wird die Kettenlänge durch Hinzufügen eines neuen Gitterplatzes von L auf $L+1$ Plätze erhöht. Wenn n die Anzahl der Zustände pro Gitterplatz ist, umfasst der Hilbertraum des Hamiltonians H_{L+1} insgesamt $m \times n$ Zustände. Im Renormierungsschritt wird der Hilbertraum auf eine Größe m verkleinert und der Hamiltonian auf diesen Unterraum projiziert:

$$\bar{H}_{L+1} = \mathcal{P}^{\dagger} H_{L+1} \mathcal{P} \tag{5.1}$$

Das neue System wird nun wiederholt um einen Platz verlängert und die renormiert, bis man schließlich den effektiven Hamiltonian eines sehr großen Systems erhält. Die Abbildung 5.1 stellt die RG-Methode grafisch dar.

Entscheidend für den Erfolg der RG-Methode ist die richtige Wahl der Projektion $\mathcal{P}$, d.h. die Auswahl der „wichtigen" Zustände. Wilson konnte im Fall des eindimensionalen Kondo-Problems gute Ergebnisse erzielen, indem er im

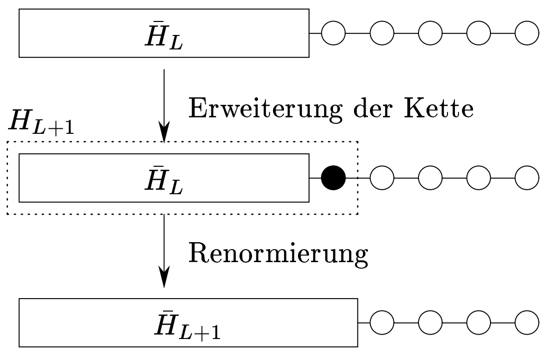


Abbildung 5.1: Schematische Darstellung des RG-Algorithmus. (Abb. aus [41])

Renormierungsschritt den Hilbertraum auf einen Unterraum reduzierte, der von den niedrigsten Energie-Eigenwerten aufgespannt wird. Es ist zunächst naheliegend, dass nur die energetisch tiefliegenden Zustände des Systems der Größe L zu den niederenergetischen Zuständen der $L+1$-Kette beitragen. Das einfache Beispiel einer schwingenden Saite illustriert jedoch wirkungsvoll, warum der RG-Algorithmus oft scheitert.

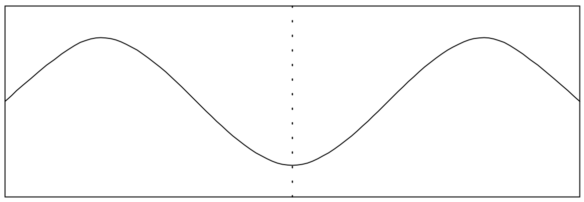


Abbildung 5.2: Schwingende Saite. (Abb. aus [41])

Eine bestimmte Eigenschwingung der Saite (Abbildung 5.2) soll durch Zustände der eingezeichneten Subsysteme angenähert werden. Abbildung 5.3 ist

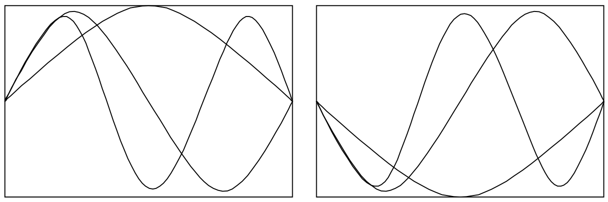


Abbildung 5.3: Eigenschwingungen der Subsysteme. (Abb. aus [41])

zu entnehmen, dass dies durch willkürliche Wahl von Eigenzuständen der Subsysteme nicht gelingt. Die Randbedingungen der Blöcke zerstören eine gute Approximation. Die DMRG bettet hingegen das betrachtete System in eine Umgebung ein und schafft es damit, das Problem der Randbedingungen zu umgehen.

5.3 Die Dichtematrix-Projektion

Bei bisherigen RG-Verfahren wurde ein Kettenabschnitt (Block) fortlaufend am Rand um einen weiteren Gitterplatz ergänzt. Nach WHITE betrachtet man zu dem ursprünglich betrachteten *Systemblock* einen benachbarten *Umgebungsblock* und fügt neue Gitterplätze in der Mitte ein. Beide Blöcke zusammen bilden den *Superblock*. Diese Anordnung ist in Abbildung 5.4 zu sehen. Je nach verwendetem Algorithmus kann der Umgebungsblock eine Spiegelung des Systemblocks darstellen oder auch eine andere Zahl an Gitterplätzen aufweisen.

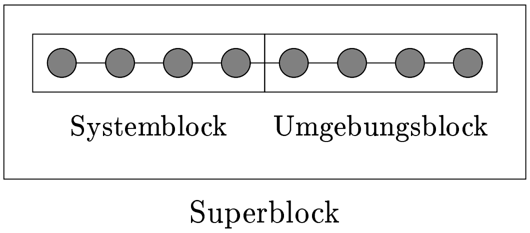


Abbildung 5.4: Schematische Darstellung einer Quantenkette mit System-, Umgebungs- und Superblock. (Abb. aus [41])

Zwei neue Spins pro Iterationsschritt werden nun nicht am Rand, sondern in der Mitte eingefügt. Das Tensorprodukt von System- und Umgebungsblock mit jeweils einem Gitterplatz bildet den neuen System- bzw. Umgebungsblock. Mittels des Diagonalisierungs-Verfahrens nach Lanczos [42] werden für den neu entstandenen Superblock nur der Grundzustand und niedrigliegende Energie-Eigenwerte und -Eigenzustände ermittelt. Gegenüber einer vollständigen Diagonalisierung benötigt das Lanczos-Verfahren erheblich weniger Ressourcen. Die Kenntnis des Grundzustands $|\psi\rangle$ ermöglicht die Berechnung der gewünschten Erwartungswerte und Korrelationen. Anschließend muss der neue Systemblock renormiert werden. Im Gegensatz zur RG-Methode von WILSON entwickelte WHITE die neue Idee der Dichtematrix-Projektion, die im Folgenden erläutert wird.

Seien $|i\rangle$ eine Basis des Systemblocks und $|j\rangle$ eine Basis des Umgebungsblocks, dann lässt sich der Grundzustand des Superblocks als

$$|\psi\rangle = \sum_{ij} \psi_{ij} |i\rangle |j\rangle \tag{5.2}$$

ausdrücken. Die reduzierte Dichtematrix des Systemblocks

$$\rho_{ii'} = \sum_{j} \psi^*_{ij} \psi_{i'j} = \mathrm{tr}' \, |\psi\rangle\langle\psi|. \tag{5.3}$$

erhält man aus der partiellen Spurbildung der Dichtematrix bezüglich des Umgebungsblocks. Aus der Normierung von $|\psi\rangle$ folgt $\mathrm{tr}\,\rho = 1$, ferner sind die Eigenwerte positiv semidefinit. Die Dichtematrix $\rho_{ii'}$ kann also als statistischer Dichteoperator des Systemblocks angesehen werden. Insbesondere enthält sie die volle Information des Zustands $|\psi\rangle$ zur Berechnung von Eigenschaften, die auf den Systemblock beschränkt sind. Der Erwartungswert eines auf den Systemblock wirkenden Operators A

$$\langle\psi|A|\psi\rangle = \sum_{ii'} A_{ii'}\rho_{i'i} = \operatorname{tr}\rho A. \tag{5.4}$$

kann statistisch als Spurbildung über Dichtematrix und Operator ausgedrückt werden. Die vollständige Diagonalisierung von $\rho_{ii'}$ liefert ihre Eigenwerte $w_\alpha \geq 0$ und dazugehörige Eigenvektoren $|u_\alpha\rangle$. Damit lässt sich der Erwartungswert aus (5.4) als

$$\langle\psi|A|\psi\rangle = \sum_{\alpha} w_\alpha \langle u_\alpha|A|u_\alpha\rangle \tag{5.5}$$

schreiben. In Analogie zur statistischen Mechanik interpretiert man die w_α als Gewichte.

Ziel der Renormierung ist es, durch einen reduzierten Zustandsraum im Systemblock den Grundzustand des Superblock möglichst optimal anzunähern. Tatsächlich gelingt dies, wenn die Eigenzustände zu den niedrigsten Eigenwerten der Dichtematrix verworfen werden. Man behält nur die Zustände mit den m höchsten Gewichten. Diese Approximation führt zu einer optimalen Annäherung des Superblock-Grundzustands. Der Beweis basiert auf dem *Singular-value-decomposition-Theorem* und ist in [43] ausführlich dargestellt. Während m ein charakteristischer Parameter eines DMRG-Algorithmus ist, schätzt die Summe der verworfenen Gewichte

$$1 - P_m = 1 - \sum_{\alpha=1}^{m} w_\alpha, \quad \text{mit } w_1 \geq w_2 \geq \dots \tag{5.6}$$

die Höhe des Approximationsfehlers gut ab.

In diesem Abschnitt ist angenommen worden, dass der Grundzustand $|\psi\rangle$ eindeutig ist und sich der Superblock damit in einem *reinen* Zustand befindet. Bei endlichen Temperaturen oder entartetem Grundzustand ergeben sich jedoch gemischte Zustände. Berücksichtigt man diese nach ihrer Wahrscheinlichkeit gewichtet bei Konstruktion der Dichtematrix, führt nach [43] die oben skizzierte Renormierung auch hier zu einer optimalen Approximation.

5.4 Der DMRG-Algorithmus

Am Beispiel einer Spinkette mit Wechselwirkung von nächsten Nachbarn und einem Single-Ion-Term soll der *Infinite-system-Algorithmus* dargestellt werden. Exemplarisch soll ein einfacher Hamiltonian

$$H_{\text{Ising}} = \sum_{j=1}^{L} J S_j^z S_{j+1}^z + D(S_j^x)^2 \tag{5.7}$$

mit Single-Ion-Anisotropie untersucht werden.

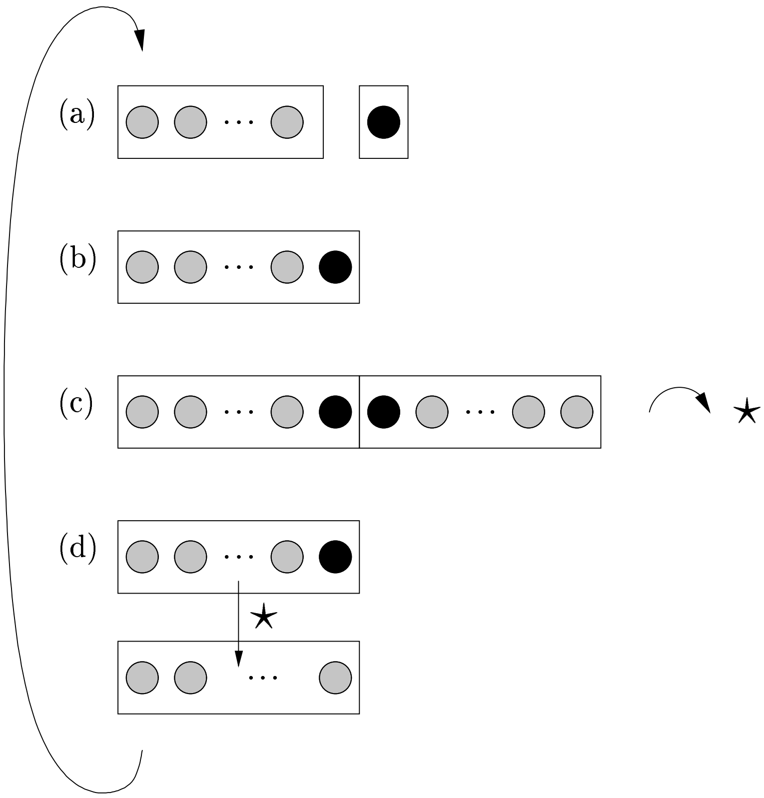


Abbildung 5.5: Schematischer Ablauf des Infinite-size-Algorithmus: Aus Systemblock und Single-site-Block (a) wird durch einfaches Tensorprodukt ein neuer Systemblock (b) konstruiert. Aus dem Systemblock und seinem Spiegelbild setzt sich der Superblock (c) zusammen, mit dessen Grundzustand die reduzierte Dichtematrix gebildet wird. Schließlich wird der Systemblock (d) auf die neue Basis reduziert.

1. *Initialisierung (Abb. 5.5a)*
   Zunächst werden zwei Blöcke konstruiert. Der erste Block umfasst den ersten Gitterplatz: Er stellt den ersten *Systemblock* dar. In einer geeigneten Basis (hier: Eigenbasis zu S^z) wird der Spinoperator S^z und der Single-Ion-Term $D(S_j^x)^2$ als Bulk-Hamiltonian H^B in Matrixschreibweise gespeichert. Das gleiche gilt für einen zweiten Block, den *Single-site-Block*. Er repräsentiert den zugefügten Gitterplatz.

2. *Tensorprodukt (Abb. 5.5a,b)*
   Aus dem alten Systemblock und dem Single-site-Block wird der neue Systemblock tensoriell gebildet. Mit den Spinoperatoren der beiden Blöcke kann der neue Bulk-Hamiltonian

$$\mathrm{H}^B_{\text{neu}} = H^B_{\text{alt}} \otimes \mathrm{id} + J S^z_{\text{alt}} \otimes S^z_{\text{Single-site}} + \mathrm{id} \otimes H^B_{\text{Single-site}} \tag{5.8}$$

und der neue Rand-Spinoperator

$$S^z_{\text{neu}} = \text{id} \otimes S^z_{\text{Single-site}} \tag{5.9}$$

erstellt werden.

3. *Superblock (Abb. 5.5c)*
   Aus dem aktuellen Systemblock wird der *Superblock* gebildet. Der Superblock besteht aus dem Systemblock und seiner Spiegelung an der Mitte. Es wird eine Superblock-Basis konstruiert, die die Erhaltung der Quantenzahlen (hier: Erhaltung von S^z_T) gewährleistet und deren Dimension daher im Allgemeinen deutlich kleiner als der Hilbertraum eines Tensorprodukts ist. Die Matrix des Hamiltonoperators H^{Super} wird im Rechner aufgrund ihrer Größe nicht berechnet und gespeichert. Stattdessen wird eine Funktion zur Verfügung gestellt, die nach Angabe von Zeile und Spalte das entsprechende Matrixelement erst auf Anforderung berechnet. Dieses Verfahren geht zwar zu Lasten der Rechenzeit, spart aber erheblichen Speicherplatz.

4. *Diagonalisierung*
   Der Hamiltonian des Superblocks H^{Super} wird numerisch mit Hilfe des Lanczos- oder Davidson-Algorithmus [42, 44] diagonalisiert. Berechnet werden lediglich Eigenwert E und Eigenvektor $\left|\psi\right\rangle$ des Grundzustands.

5. *Erwartungswerte und Korrelationen*
   Mithilfe des Grundzustandsvektors können Erwartungswerte von Operatoren

$$\langle A \rangle = \left\langle \psi \middle| A \middle| \psi \right\rangle \tag{5.10}$$

   und Korrelationen

$$\left\langle C_j C_{j'} \right\rangle = \left\langle \psi \middle| C_j C_{j'} \middle| \psi \right\rangle \tag{5.11}$$

   berechnet werden. Voraussetzung ist allerdings, dass die Operatoren A und C in der aktuellen Systemblock-Basis vorliegen, d.h. genauso den DMRG-Algorithmus durchlaufen.

6. *Dichtematrix*
   Mit dem Grundzustandsvektor wird gemäß (5.3) die reduzierte Dichtematrix $\rho_{ii'}$ gebildet und vollständig diagonalisiert.

7. *Transformationsmatrix*
   Die m niedrigsten Eigenvektoren der Dichtematrix bilden die Spalten einer Transformationsmatrix O.

8. *Basiswechsel (Abb. 5.5d)*
   Mit der Transformation O wird die Basis des Systemblocks reduziert. Die

Operatormatrizen werden in der reduzierten Basis dargestellt:

$$\bar{H}^B = O^\dagger H^B O, \tag{5.12}$$
$$\bar{S}_j^z = O^\dagger S_j^z O, \tag{5.13}$$
$$\bar{A} = O^\dagger A O, \tag{5.14}$$
$$\bar{C} = O^\dagger C O, \tag{5.15}$$
$$\ldots$$

9. *Zyklus*
   Bis die gewünschte Länge des Superblocks erreicht ist, fährt man wieder mit Punkt 2 fort.

5.5 Varianten

5.5.1 Der Finite-system-Algorithmus

Neben dem oben dargestellten Infinite-system-Algorithmus stellte White schon in seiner Originalarbeit [43] den *Finite-system-Algorithmus* vor, der sich auf die Untersuchung einer räumlich begrenzten Kette mit L Gitterplätzen beschränkt. Hinter dem Finite-system-Algorithmus steckt der Gedanke, durch mehrere Iterationen über dieselbe Systemgröße, jedoch unterschiedliche Größen des System- und Umgebungsblocks, Energien und Korrelationen optimal anzunähern. Sein Ablauf sei kurz skizziert.

1. Man beginnt mit dem Infinite-system-Algorithmus bis der Superblock eine Kettenlänge von L Plätzen erreicht hat. Während jedes Schrittes wird der jeweilige Systemblock B_l für alle $l \leq L/2$ mit seinem Block-Hamiltonian und den Operator-Matrizen abgespeichert.

2. Es sei B_l der Systemblock und der gespiegelte Block B_{L-l-2} der Umgebungsblock. Wie im Infinite-system-Algorithmus werden zwei neue Gitterplätze in der Mitte hinzugefügt, die Erwartungswerte bestimmt, die Dichtematrix gebildet und die Renormierung vorgenommen. Der so erhaltene neue Systemblock B_{l+1} wird ebenfalls gesichert.

3. Mit $l+1 \rightarrow l$ verwende man den neu erhaltenen Systemblock mit dem entsprechenden Umgebungsblock B_{L-l-2} und verfahre wie in Punkt 2 bis $l = L-3$. Damit sind die neuen Blöcke $B_{L/2}$ bis B_{L-3} entstanden.

4. Man starte nun wieder mit einem Systemblock aus einem Gitterplatz und einem Umgebungsblock aus der Spiegelung von B_{L-3}. Wie in Schritt 2 wird nun der Systemblock kontinuierlich vergrößert, wobei als Umgebungsblock wieder der vorher gespeicherte Block der Größe $L-l-2$ dient. Diese Prozedur wird ausgeführt, bis der Systemblock die Größe $L-3$ erreicht hat.

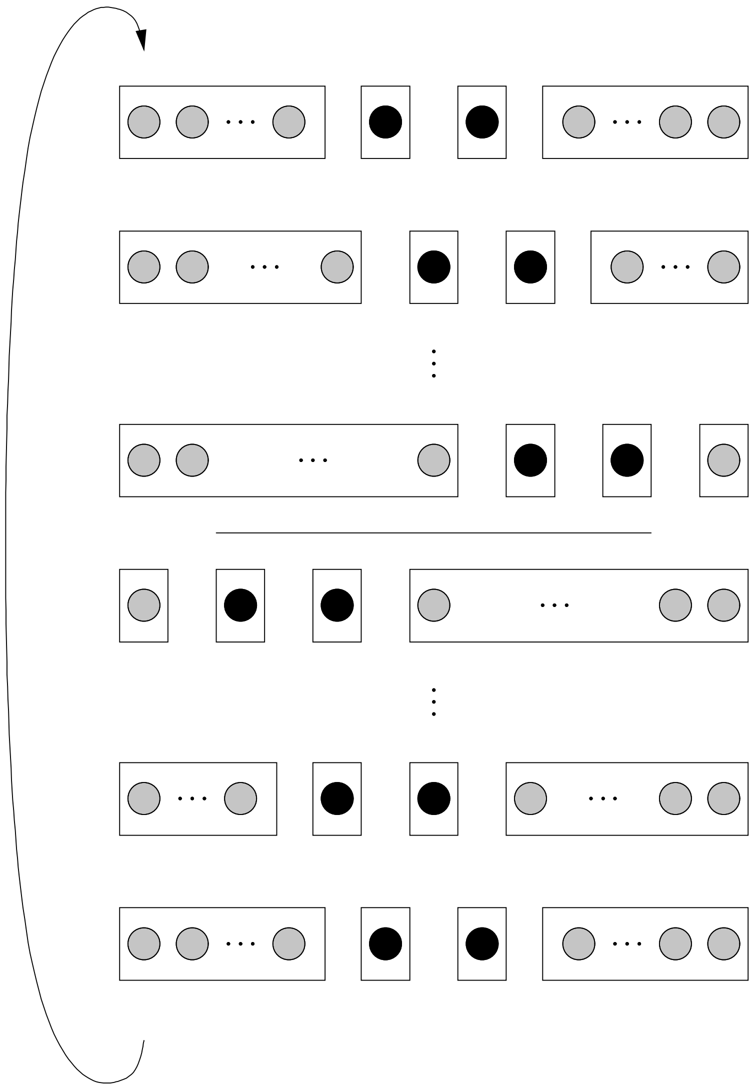


Abbildung 5.6: Schematischer Ablauf des Finite-size-Algorithmus.

Die Iteration in Punkt 4 wird nun zwei- bis dreimal wiederholt, bis man die gewünschte Konvergenz erhält. In Abbildung 5.6 ist der Finite-system-Algorithmus grafisch dargestellt. Um Erwartungswerte und Energien auf der unendlichen Kette zu berechnen, müssen mehrere Durchläufe des Finite-system-Algorithmus zu verschiedenen Kettenlängen durchgeführt werden. Über eine Finite-size-Betrachtung kann dann auf den thermodynamischen Limes geschlossen werden.

Gegenüber dem Infinite-system-Algorithmus benötigt der Finite-system-Algorithmus durch seine hohe Zahl an Iterationen erheblich mehr Rechenzeit. Auch der Speicherbedarf ist durch das Sichern der Blöcke größer. Für Systeme mit schlechter Konvergenz oder Daten mit hoher Präzisionsanforderung ist letzterer allerdings die bessere Wahl.

5.5.2 Randbedingungen

Ohne weiteres lassen sich anstelle der für den DMRG-Algorithmus generischen offenen Randbedingungen auch periodische Randbedingungen realisieren. Dazu müssen lediglich im Systemblock zu den Operatoren am rechten Blockrand auch die Operatoren am linken Rand gespeichert und bei der Diagonalisierung des Superblocks berücksichtigt werden. Ansonsten bleiben sowohl der Infinite-system-Algorithmus als auch der Finite-system-Algorithmus unverändert. Meist werden offene Randbedingungen bevorzugt, da sie oft ein schnelleres Konvergenzverhalten als periodische Randbedingungen zeigen.

Bei offenen Randbedigungen bietet es sich bei einigen Modellen an, Felder an den Randspins anzulegen oder zusätzliche Spins hinzuzufügen, um Finite-size-Effekte gering zu halten. Beispielsweise besitzt die offene VBS-Kette an den Rändern gedachte freie Spins der Größe 1/2, die zu einer vierfachen Entartung des Grundzustands führen. Durch Anfügen von zwei zusätzlichen Spins mit $S = 1/2$ an den Enden, können sie mit den freien Randspins zu Singlett-Zuständen koppeln und somit die Entartung aufheben.

6 Resultate zur BLBQ-Kette

In diesem Kapitel soll der Charakter des Grundzustands und niedriger Anregungen der isotropen bilinear-biquadratischen Spin-1-Kette (BLBQ-Kette) mittels DMRG betrachtet werden. Das äußerst reichhaltige Phasendiagramm ist bereits in Abschnitt 3.4 vorgestellt worden.

6.1 Abweichung vom Optimum-Grundzustand

Besonders leicht sind die Grundzustandseigenschaften von Systemen berechenbar, deren Grundzustand im Sinne von Abschnitt 4.1 optimal ist. Ein Vergleich mit der lokalen Grundzustandsenergie soll verdeutlichen, inwieweit Optimum-Grundzustände auf der BLBQ-Kette zu erwarten sind.

In Abhängigkeit von θ wurden per DMRG die drei niedrigsten Eigenenergien

$$E_0^{(0)},\ E_1^{(0)},\ E_2^{(0)} \qquad \text{für } S_T^z = 0 \tag{6.1}$$

$$E_0^{(1)},\ E_1^{(1)},\ E_2^{(1)} \qquad \text{für } S_T^z = 1 \tag{6.2}$$

für die erhaltene z-Komponente des Gesamtspins $S_T^z = 0$ und $S_T^z = 1$ bestimmt. Die numerischen Berechnungen beschränken sich dabei auf den interessanten antiferromagnetischen Bereich $\theta \in (-135°, 90°)$. Dort erwartet man den Grundzustand bei verschwindendem S_T^z. Man erhält die Grundzustandsenergie $E_0^{(0)}$ in Abhängigkeit von der Kettenlänge L.

Zunächst soll die Güte der numerischen Approximation veranschaulicht werden. In Abbildung 6.1 ist die Summe der verworfenen Gewichte (*Truncation-error*) eines DMRG-Laufs gegen den Parameter θ aufgetragen. Es ist deutlich zu erkennen, dass außerhalb der Haldane-Phase diese charakteristische Fehlergröße in die Höhe schnellt und die Genauigkeit der DMRG-Berechnungen stark abnimmt. Am geringsten wird der Fehler in der Nähe des VBS-Punktes, dessen Grundzustand optimal ist.

Für die Grundzustandsenergie als extensive Größe erwartet man in erster Näherung ein in der Systemlänge L lineares Verhalten. Die Messwerte wurden deshalb durch eine Gerade

$$E_0^{(0)}(L) \cong (e_0 + \delta)\, L \tag{6.3}$$

angenähert, wobei e_0 die Grundzustandsenergie des lokalen Hamiltonians $h_{j,j+1}$ und δ die Abweichung von dieser Optimum-Grundzustandsenergie ist. Steigung und Abszissen-Schnittpunkt der Geraden wurden über eine lineare Regression

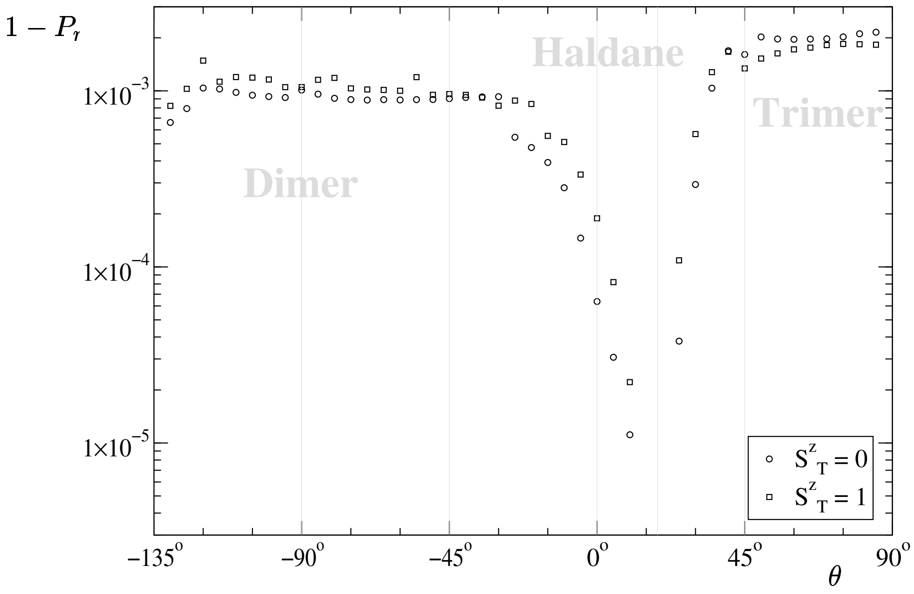


Abbildung 6.1: Truncation-error gegenüber Systemparameter θ ($m = 90$, $L = 100$, periodische Randbedingungen)

für den Bereich $50 \leq L \leq 100$ bestimmt. In (6.3) setzt sich die Geradensteigung aus der optimalen Grundzustandsenergie e_0, die über exakte Diagonalisierung ermittelt wird, und einer zusätzlichen Energie δ, die per DMRG ermittelt wird, zusammen. Die numerisch bestimmte Grundzustandsenergie pro Gitterplatz $e_0 + \delta$ und die optimale Grundzustandsenergie e_0 sind in Abbildung 6.2 dargestellt. Zusätzlich sind dort die fünf analytisch exakt bekannten Werte eingetragen. Schadschneider und Zittartz verwendeten in [45] den Matrixprodukt-Grundzustand als Variationszustand für die BLBQ-Kette und gaben obere Schranken für die Grundzustandsenergie an. Diese Variationsenergien sind als gepunktete Linie in Abb. 6.2 angegeben.

Die besten numerischen Werte erwartet man in der Haldane-Phase. Am VBS-Punkt treffen die Graphen aufeinander, dort wird die Grundzustandsenergie optimal. Hier ist der Grundzustand durch ein Matrixprodukt darstellbar. Tatsächlich gibt es nach Östlund und Rommer, wenn der Truncation-error verschwindet, im thermodynamischen Limes eine asymptotische Verwandtschaft zwischen DMRG und Matrixprodukt-Grundzustand [46]. Die per DMRG errechnete Grundzustandsenergie ist dann exakt und als Matrixprodukt darstellbar. Man kann also schon an Abbildung 6.1 erkennen, dass für die BLBQ-Kette keine weiteren Matrixprodukt-Grundzustände im antiferromagnetischen Bereich zu erwarten sind.

Zur Dimer- und Trimerphase öffnet sich die Spanne zwischen tatsächlicher und optimaler Grundzustandsenergie, um sich in der Nähe der ferromagnetischen Region wieder zu schließen. An den Grenzen der Haldane-Phase liegen exakt lösbare Modelle. Während am Takhtajan-Babujian-Punkt bei $\theta = -45°$

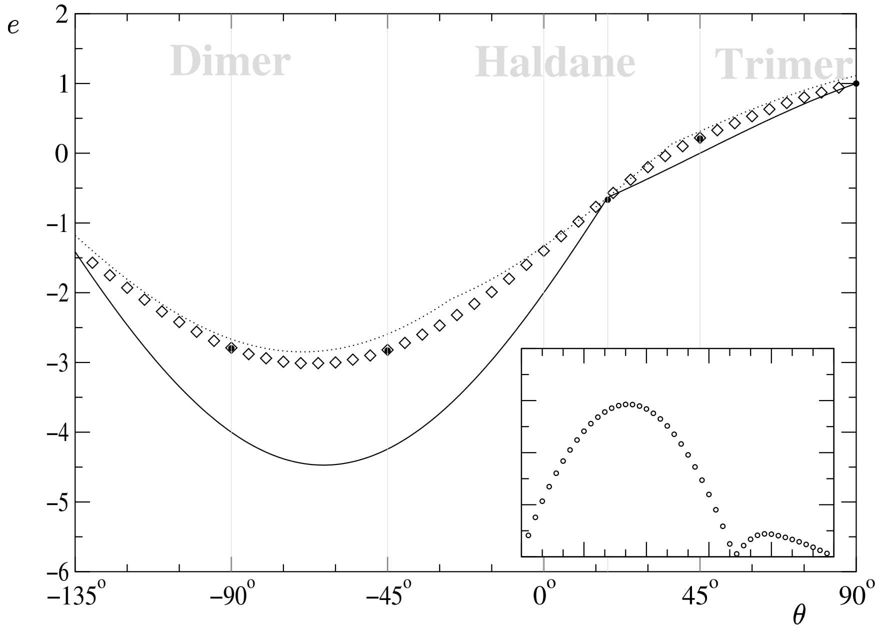


Abbildung 6.2: Grundzustandsenergie pro Gitterplatz. DMRG-Messwerte $e_0 + \delta$ (Rauten), exakte obere (gepunktete Linie) und untere Schranke e_0 (durchgezogene Linie) und analytisch exakte Werte (Kreise). Im Inset ist die Abweichung vom Optimum-Grundzustand δ gegen den Parameter θ aufgetragen. ($m = 90$, periodische Randbedingungen)

die Abweichung vom exakten Wert unter einem Prozent liegt, beträgt sie an der Schwelle zur Trimer-Phase am Uimin-Lai-Sutherland-Punkt bei 45° fast 3%. Der Klümper-Punkt ($\theta = -90°$) in der Dimer-Phase wird durch die DMRG-Routine und anschließende lineare Regression auf 0.22% angenähert.

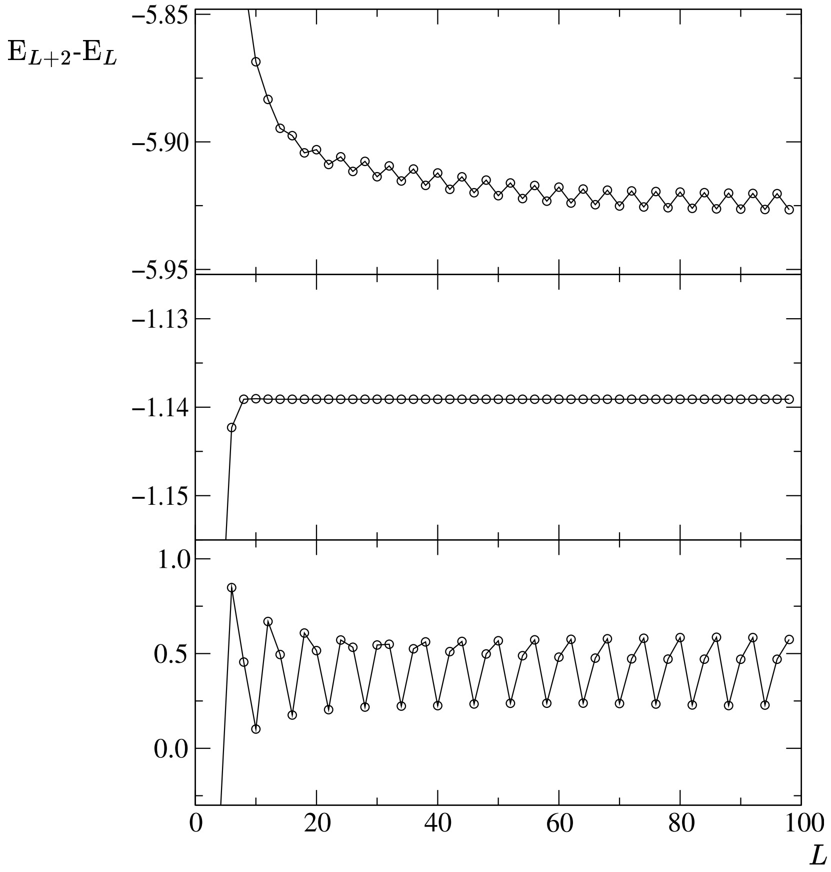


Abbildung 6.3: Zuwachs an Energie benachbarter DMRG-Iterationen für die Punkte $\theta = -55°$ (Dimer-Phase, oben), $\theta = 20°$ (Haldane-Phase, Mitte) und $\theta = 45°$ (Trimer-Phase, unten) ($m = 90$, periodische Randbedingungen)

In Abbildung 6.3 ist die Differenz der Grundzustandsenergien benachbarter DMRG-Iterationen gegen die Kettenlänge für drei ausgewählte Punkte aufgetragen.

Im oberen Bild befindet sich das System mit $\theta = -55°$ in der Dimer-Phase. Ab hinreichender Kettenlänge alterniert die gemessene Grundzustandsenergiedifferenz zwischen benachbarten Systemgrößen. Während die Kettenlänge pro DMRG-Iterationsschritt um zwei Gitterplätze wächst, wird der renormierte Systemblock nur um jeweils einen Gitterplatz vergrößert. Dies führt offensichtlich dazu, dass in der hier betrachteten Phase die relevanten, nicht verworfenen Zustände der Renormierung alternierend mit Systemgröße einen völlig unterschiedlichen Charakter besitzen und die Grundzustände nicht mehr ausreichend genau approximiert werden.

Im mittleren Bild befindet sich das System mit $\theta = 20°$ in der Haldane-Phase in unmittelbarer Nähe des VBS-Modells (18.43°). Die Schwankung zwischen benachbarten Messpunkten verschwindet vollkommen. Die Grundzustandsenergie liegt in der Nähe des Optimums und konvergiert schnell bei kleinen Kettenlängen ($L = 10$). Die gute Konvergenzeigenschaft in der Haldane-Phase wurde in einer Reihe von DMRG-Berechnungen beobachtet [47, 48, 46]. Der für diese Phase repräsentative VBS-Punkt besitzt einen exakt angebbaren Matrixprodukt-Grundzustand, der keine Dimerisierung oder andere Periodenverdopplung aufweist.

Das untere Bild stellt die Konvergenzeigenschaften am Uimin-Lai-Sutherland-Punkt bei $\theta = 45°$ dar. Hier schwankt die Grundzustandsenergie mit einer Periode von sechs Gitterplätzen. Fáth und Sólyom beobachteten in [49] für endliche Ketten ein von der Kettenlänge abhängiges Grundzustandsverhalten. Grundzustände von Ketten, deren Längen ein Vielfaches von drei betragen, haben einen verschwindenden Impuls, während für Kettenlängen mit $(L \mod 3) = 1, 2$ der Impuls in der Nähe von $2\pi/3$ liegt. Da mit dem hier verwendeten DMRG-Programm nur gerade Kettenlängen untersucht werden können, beobachtet man eine Periode von sechs Gitterplätzen. Die DMRG-Konvergenz wird schlechter, da die Grundzustandseigenschaften von Iteration zu Iteration wechseln.

Schließend kann man feststellen, dass das Konvergenzverhalten der Grundzustandsenergie den Charakter des Grundzustands widerspiegelt. Schwankungen in der Dimer-Phase mit einer Periode von zwei Gitterplätzen, mit einer Periode von drei Plätzen in der Trimer-Phase traten auf, wobei eine Verdopplung der Periode durch den Algorithmus beobachtet wurde. In der Haldane-Phase konvergiert die Grundzustandsenergie ohne solche Schwankungen.

6.2 Anregungen

Über Anregungen wurden schon bei der Diskussion des Phasendiagramms in Abschnitt 3.4 Aussagen gemacht. Die Schwankungen, die in Dimer- und Trimer-Phase schon bei der Grundzustandsenergie auftraten, werden bei DMRG-Untersuchungen der Anregungen ebenfalls erwartet. Hier soll das Konvergenzverhalten der ersten Anregung mit verschwindender z-Komponente des Gesamtspins betrachtet werden.

Der Abstand zwischen den ersten beiden Eigenenergien im Unterraum mit $S_T^z = 0$ wurde mit DMRG in Abhängigkeit von θ bei $m = 120$ Zuständen und einer Kettenlänge von $L = 100$ gemessen. In den Abbildungen 6.4 bis 6.8 ist die Energiedifferenz gegen das inverse Quadrat der Kettenlänge aufgetragen, um die Konvergenzeigenschaften der unterschiedlichen Modelle zu vergleichen.

In Abbildung 6.4 ist der Bereich $20° \leq \theta \leq 85°$ dargestellt. In der Trimer-

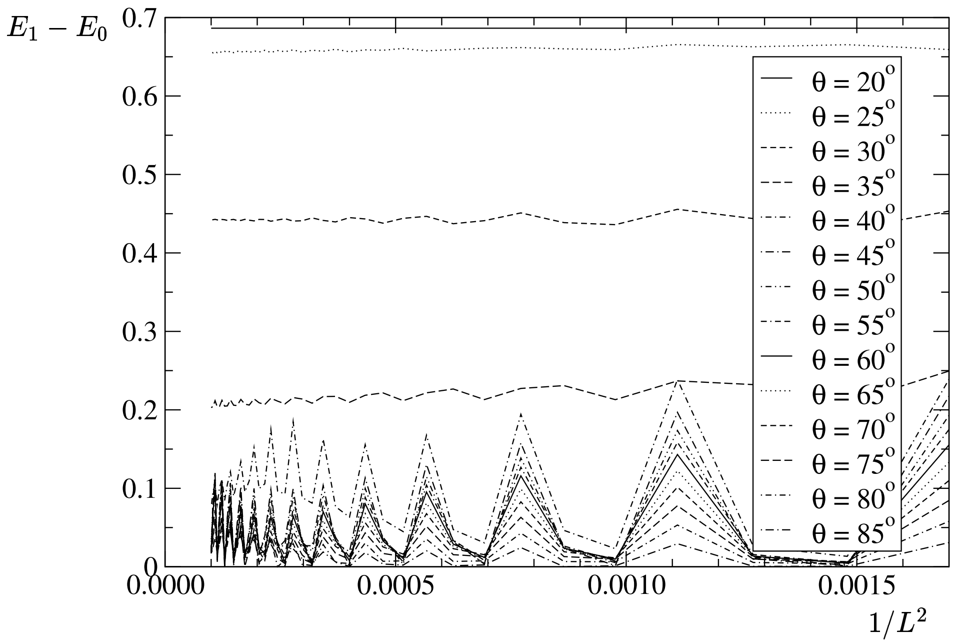


Abbildung 6.4: Lücke zwischen Grundzustand und zweitniedrigster Energie im Unterraum $S_T^z = 0$ aufgetragen gegen inverse Kettenlänge zum Quadrat.

Phase zwischen dem Uimin-Lai-Sutherland-Punkt bei $\theta = 45°$ und der ferromagnetischen Phase ab $\theta > 90°$ beobachtet man eine Schwankung mit einer Periode von sechs Gitterplätzen. Bei Kettenlängen mit $(L \mod 3) = 2$ verschwindet die Energiedifferenz oder wird sehr klein. Bei $(L \mod 3) = 0$ ist die Lücke maximal und nimmt mit endlicher, nicht zu großer Kettenlänge ab.

Kennzeichnend für die Haldane-Phase zwischen $-45° < \theta < 45°$ (Abb. 6.4 bis 6.6) ist ein glattes Konvergenzverhalten und eine deutlich zu Tage tretende Energiedifferenz. In der Nähe des VBS-Punktes wird die Anregungslücke maximal. Um den Takthajan-Babujian-Punkt bei $\theta = -45°$ (Abb. 6.6) fällt die Energiedifferenz für große Kettenlängen stärker als $1/L^2$ ab. Sie wird hier sehr klein oder verschwindet.

In Abbildung 6.7 ist die Konvergenz in der Dimer-Phase dargestellt. Hier beobachtet man ein besonders interessantes Verhalten. Zunächst scheint die Energielücke mit wachsender Kettenlänge linear gegen Null zu konvergieren. Ab Systemgrößen von $L \approx 40 - 70$ steigen die Kurven plötzlich an und alternatieren dabei leicht zwischen benachbarten Kettenlängen. Für $-135° < \theta < -45°$ erwartet man einen nicht-entarteten Grundzustand mit $S_T^z = 0$ und Impuls $k = 0$. Ein zweites Niveau mit Impuls $k = \pi$ sinkt für große Kettenlängen ab und entartet im thermodynamischen Limes mit dem Grundzustand [26, 50]. Der Kurvenverlauf der numerischen Untersuchung legt nahe, dass für Kettenlängen $L < 40$ tatsächlich der abfallende Ast mit $k = \pi$ beobachtet wird. Für größere Kettenlängen häufen sich die systematischen Fehler der Numerik und die Er-

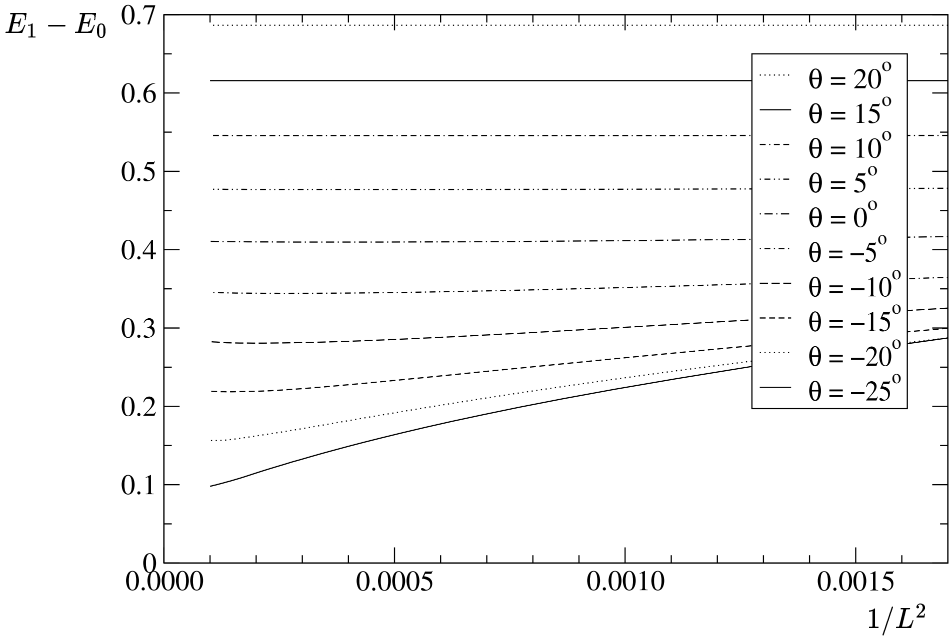


Abbildung 6.5: Lücke zwischen Grundzustand und zweitniedrigster Energie im Unterraum $S_T^z = 0$ aufgetragen gegen inverse Kettenlänge zum Quadrat.

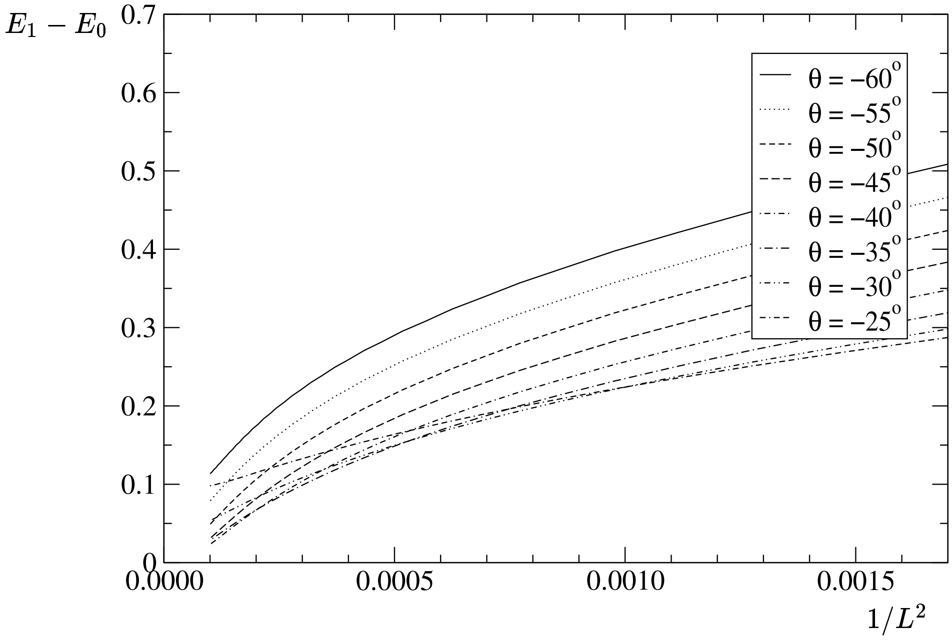


Abbildung 6.6: Lücke zwischen Grundzustand und zweitniedrigster Energie im Unterraum $S_T^z = 0$ aufgetragen gegen inverse Kettenlänge zum Quadrat.

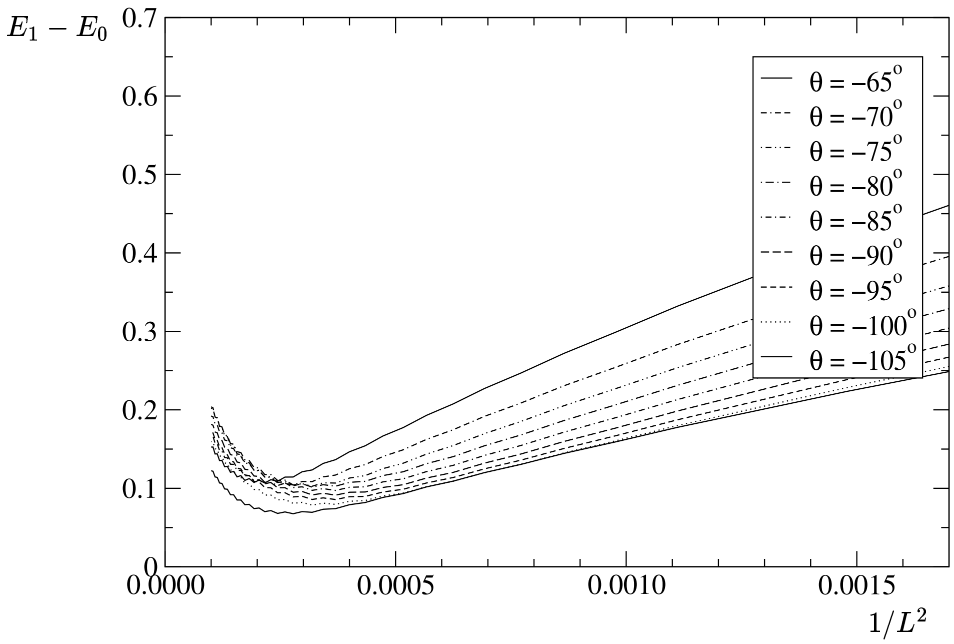


Abbildung 6.7: Lücke zwischen Grundzustand und zweitniedrigster Energie im Unterraum $S_T^z = 0$ aufgetragen gegen inverse Kettenlänge zum Quadrat.

gebnisse werden ungenau. Möglicherweise wird für große Kettenlängen auch das abfallende Niveau durch die Renormierung nicht mehr eingeschlossen, so dass nur angeregte Zustände mit endlicher Energielücke erreicht werden können.

Der Kurvenverlauf am Rand der Dimer-Phase (Abb. 6.8) ist uneinheitlich. Während die Energielücken für $\theta = -110°$ und $\theta = -115°$ für große Ketten gegen Null weisen, beobachtet man in der Nähe der ferromagnetischen Phase nach dem Absinken einen erneuten Anstieg der Energiedifferenz. Zuverlässige Vorhersagen für den thermodynamischen Limes sind auch hier nicht möglich.

Übereinstimmend mit bisherigen Untersuchungen kann die Energielücke in der Haldane-Phase gut reproduziert werden. In anderen Bereichen sind genaue Angaben mit dem hier verwendeten DMRG-Algorithmus nicht möglich, da starke Schwankungen in Dimer- und Trimerphase auftreten. Allerdings deuten die beobachteten Energiedifferenzen auf das in Abschnitt 3.4 besprochene Verhalten der Anregungslücke hin.

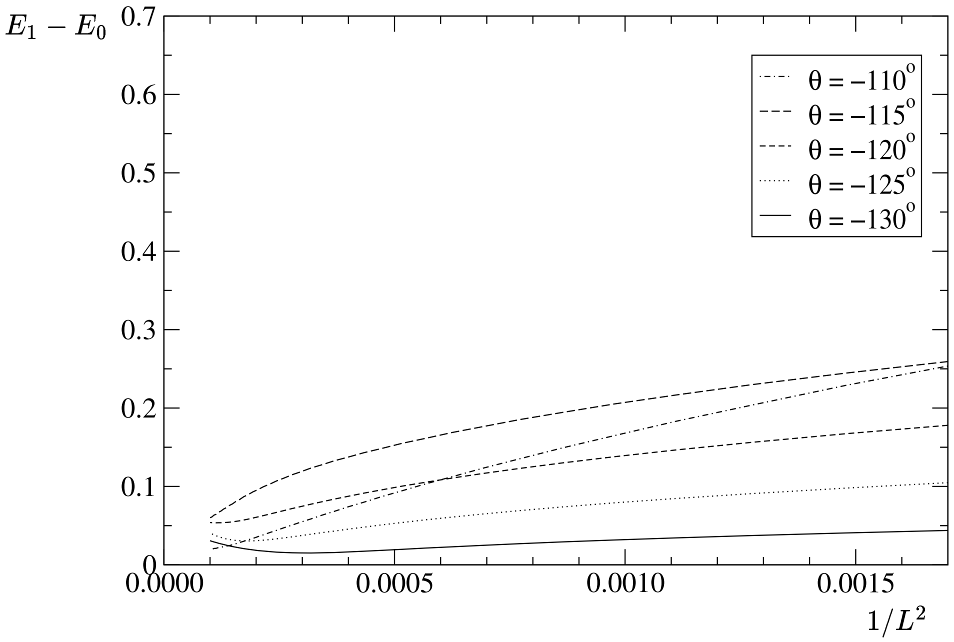


Abbildung 6.8: Lücke zwischen Grundzustand und zweitniedrigster Energie im Unterraum $S_T^z = 0$ aufgetragen gegen inverse Kettenlänge zum Quadrat.

7 Anregungen über dem Matrixprodukt-Grundzustand

In Kapitel 4 wurde der Matrixprodukt-Grundzustand vorgestellt und eine Klasse von Spin-1-Ketten

$$H = \sum_j \left[\lambda_2 \left(\mathcal{P}_2 + \mathcal{P}_{-2} \right) + \lambda_1 \left(\mathcal{P}_1^\sigma + \mathcal{P}_{-1}^\sigma \right) + \lambda_0 \mathcal{P}_{01}^+ \right] \tag{7.1}$$

angegeben, deren Grundzustand exakt bekannt ist. Wenn nicht anders angegeben, soll bei den folgenden numerischen Untersuchungen zunächst

$$\lambda_2 = \lambda_1 = \lambda_0 = 1 \tag{7.2}$$

gelten. Dieses Modell schließt den isotropen VBS-Punkt ein. Während der Grundzustand der Modellklasse exakt bekannt ist, weiß man noch sehr wenig über die Anregungen. Diese sollen in den folgenden Abschnitten untersucht werden.

In Abschnitt 7.1 wird die Auswirkung der schon in Kapitel 3 vorgestellten Symmetrien auf die Korrelationsfunktionen des MPG analysiert. Verfahren und Approximationsgenauigkeit der DMRG-Methode im MPG-Modell werden in Abschnitt 7.2 diskutiert. Der kritische Punkt bei $a = 0$ wird in Abschnitt 7.3 vorgestellt. In den weiteren Abschnitten 7.4 bis 7.8 werden die niedrigsten Anregungen zu verschiedenen z-Komponenten des Gesamtspins $S_T^z = 0, 1, 2$ abhängig vom Systemparameter a untersucht. Wegen Spin-Flip-Symmetrie entsprechen die Unterräume $S_T^z = -1$ und $S_T^z = -2$ ihren Pendants mit positiver Quantenzahl und werden daher nicht separat behandelt. Ein Variationszustand mit $S_T^z = 0$ wird in Abschnitt 7.5 angegeben und seine Energie mit den numerischen Daten verglichen. Schließlich wird in Abschnitt 7.9 das Verhalten der Anregungen bei Variation der λ-Parameter untersucht.

7.1 Symmetrien und Korrelationsfunktionen

Die Transfermatrix-Methode (Abschnitt 4.4) ermöglicht es, Eigenschaften des Matrixprodukt-Grundzustands exakt zu bestimmen. In Abschnitt 4.4 wurden Korrelationsfunktionen angegeben. Ihr Verhalten soll nun beim Übergang von

$$a \to -a \text{ und } \sigma \to -\sigma \tag{7.3}$$

analytisch und numerisch betrachtet werden. Aufgrund der Symmetrien aus Abschnitt 3.7 erwartet man ein Energiespektrum, das nur betragsmäßig von a

und σ abhängt. Es reicht wegen $|\sigma| = 1$ daher, bei Untersuchung des Anregungsspektrums den Parameter $\sigma = 1$ festzusetzen. Auch für die S^z-Korrelationen stellt man keine Abhängigkeit vom Vorzeichen der Parameter fest. Dies verwundert nicht, da die vermittelnden unitären Transformationen $\mathcal{D}^{(3)}$ und $\mathcal{D}^{(4)}$ lokal mit den S^z_j-Operatoren vertauschen. Im Fall der S^x-Korrelationen $\langle S^x_1 S^x_r \rangle$ verschwindet der Kommutator mit den vermittelnden Transformationen nicht. Insbesondere gibt es nach (4.34) bei unterschiedlichen Vorzeichen der Parameter keine Korrelation der S^x-Operatoren. Die unitäre Transformation $\mathcal{D}^{(3)}$ wirkt auf S^x gerade so, dass sie einen Übergang nach

$$\begin{aligned} \mathcal{D}^{(3)} S^x_j \mathcal{D}^{(3)\dagger} &= e^{\mathrm{i}\frac{\pi}{2}(S^z_j)^2} S^x_j e^{-\mathrm{i}\frac{\pi}{2}(S^z_j)^2} && (7.4) \\ &= \left(\mathrm{id} + [\mathrm{i} - 1]\,(S^z_j)^2\right) S^x_j \left(\mathrm{id} + [-\mathrm{i} - 1]\,(S^z_j)^2\right) && (7.5) \\ &= -\left(S^y_j S^z_j + S^z_j S^y_j\right) && (7.6) \\ &=: O^x_j && (7.7) \end{aligned}$$

vermittelt.

Das im Rahmen dieser Arbeit entstandene DMRG-Programm ist in der Lage, Korrelationen zwischen zwei Gitterpunkten in einem Abstand n zu berechnen. Aufgrund der spezifischen Eigenschaften des hier verwendeten Infinite-size-Algorithmus werden nur ungerade Abstände betrachtet.

In den Tabellen 7.1 und 7.2 sind die Zwei-Punkt-Korrelationen der Operatoren S^z, S^x und O^x für fünf verschiedene Abstände angegeben. Die DMRG-Berechnungen stimmten bis in die hier angegebene zehnte Nachkommastelle mit den exakten Werten überein.

7.2 Zum Verfahren

In den nächsten Abschnitten sollen niedrigliegende Anregungen über dem Matrixprodukt-Grundzustand untersucht werden. Die Berechnungen der Anregungsenergien wurden mit dem im Rahmen dieser Arbeit entwickelten DMRG-Programm durchgeführt. Zum besseren Vergleich mit den analytischen Ergebnis und zum Ausschalten von Randfreiheitsgraden, die bei offenen Randbedingungen für Entartungen sorgen können, wurden periodische Randbedingungen angenommen. Neben der Information über die Art des Hamiltonians sind die wichtigsten Parameter des DMRG-Programms die maximale Kettenlänge L, der zu untersuchende Unterraum zur z-Komponente des Gesamtspins S^z_T und die mitgeführten Zustände des DMRG-Systemblocks m. Ergebnis eines jeden DMRG-Durchlaufs ist eine Datenreihe der n niedrigsten Energieeigenwerte $E_0(l), E_1(l), \ldots, E_{n-1}(l)$ in Abhängigkeit von der Kettenlänge l. Der erste Superblock der DMRG-Methode umfasst hier vier Gitterplätze. Da die Kettenlänge pro Iterationsschritt um zwei Plätze anwächst, erhält man Daten zu den Systemgrößen

$$l = 4, 6, 8, \ldots, L \quad , \tag{7.8}$$

wobei L die maximal zu erzielende Kettenlänge darstellt. Daraus kann nun die Anregungslücke über dem Grundzustand, dessen Energie exakt bekannt ist, berechnet werden.

$a = 2 \quad \sigma = 1$

r	$\langle S_1^z S_r^z \rangle$	$\langle S_1^x S_r^x \rangle$	$\langle O_1^x O_r^x \rangle$
2	-0.4444444444	-0.4444444444	0
4	-0.0493827161	-0.0493827161	0
6	-0.0054869685	-0.0054869685	0
8	-0.0006096632	-0.0006096632	0
10	-0.0000677404	-0.0000677404	0

$a = 2 \quad \sigma = -1$

r	$\langle S_1^z S_r^z \rangle$	$\langle S_1^x S_r^x \rangle$	$\langle O_1^x O_r^x \rangle$
2	-0.4444444444	0	-0.4444444444
4	-0.0493827161	0	-0.0493827161
6	-0.0054869685	0	-0.0054869685
8	-0.0006096632	0	-0.0006096632
10	-0.0000677404	0	-0.0000677404

$a = -2 \quad \sigma = 1$

r	$\langle S_1^z S_r^z \rangle$	$\langle S_1^x S_r^x \rangle$	$\langle O_1^x O_r^x \rangle$
2	-0.4444444444	0	0.4444444444
4	-0.0493827161	0	0.0493827161
6	-0.0054869685	0	0.0054869685
8	-0.0006096632	0	0.0006096632
10	-0.0000677404	0	0.0000677404

$a = -2 \quad \sigma = -1$

r	$\langle S_1^z S_r^z \rangle$	$\langle S_1^x S_r^x \rangle$	$\langle O_1^x O_r^x \rangle$
2	-0.4444444444	0.4444444444	0
4	-0.0493827161	0.0493827161	0
6	-0.0054869685	0.0054869685	0
8	-0.0006096632	0.0006096632	0
10	-0.0000677404	0.0000677404	0

Tabelle 7.1: MPG-Korrelationen bei den Parameterübergängen $a \to -a$ und $\sigma \to -\sigma$ am Beispiel $|a| = 2$ (isotropes VBS-Modell für $a, \sigma > 0$).

$a = 0.5 \quad \sigma = 1$

r	$\langle S_1^z S_r^z \rangle$	$\langle S_1^x S_r^x \rangle$	$\langle O_1^x O_r^x \rangle$
2	-0.1111111111	−0.4444444444	0
4	-0.0123456790	-0.1975308642	0
6	-0.0013717421	-0.0877914952	0
8	-0.0001524158	-0.0390184423	0
10	-0.0000169351	-0.0173415299	0

$a = 0.5 \quad \sigma = -1$

r	$\langle S_1^z S_r^z \rangle$	$\langle S_1^x S_r^x \rangle$	$\langle O_1^x O_r^x \rangle$
2	-0.1111111111	0	-0.4444444444
4	-0.0123456790	0	-0.1975308642
6	-0.0013717421	0	-0.0877914952
8	-0.0001524158	0	-0.0390184423
10	-0.0000169351	0	-0.0173415299

$a = -0.5 \quad \sigma = 1$

r	$\langle S_1^z S_r^z \rangle$	$\langle S_1^x S_r^x \rangle$	$\langle O_1^x O_r^x \rangle$
2	-0.1111111111	0	0.4444444444
4	-0.0123456790	0	0.1975308642
6	-0.0013717421	0	0.0877914952
8	-0.0001524158	0	0.0390184423
10	-0.0000169351	0	0.0173415299

$a = -0.5 \quad \sigma = -1$

r	$\langle S_1^z S_r^z \rangle$	$\langle S_1^x S_r^x \rangle$	$\langle O_1^x O_r^x \rangle$
2	-0.1111111111	0.4444444444	0
4	-0.0123456790	0.1975308642	0
6	-0.0013717421	0.0877914952	0
8	-0.0001524158	0.0390184423	0
10	-0.0000169351	0.0173415299	0

Tabelle 7.2: MPG-Korrelationen bei den Parameterübergängen $a \to -a$ und $\sigma \to -\sigma$ am Beispiel $|a| = \frac{1}{2}$.

Bei den hier untersuchten Anregungen stellt man für hinreichende Systemgröße eine Proportionalität der Anregungslücke zu $1/L^2$ fest. Sørensen und Affleck deuten in [51] dieses Verhalten als Resultat einer massiven relativitischen Dispersion wechselwirkender Bosonen. In den Untersuchungen ist der thermodynamische Limes von Interesse. Aus den Messdaten muss deshalb der Grenzfall extrapoliert werden. Dazu wird die entsprechende Energielücke gegen das inverse Quadrat der Kettenlänge aufgetragen und eine lineare Geradenanpassung durchgeführt. Wie hoch ist nun die Genauigkeit der durchgeführten Rechnungen?

Exemplarisch soll für drei Punkte im Parameterraum des MPG-Modells eine Präzisionsabschätzung unternommen werden. Ausgewählt wurden die drei Punkte $a = 0.1, 1, 2$. Während bei $a = 2$ das Modell isotrop wird, bezeichnet $a = 1$ den *Unordnungspunkt*, an dem die Zwei-Punkt-Korrelationslänge der z-Komponente des Spins verschwindet. Besonders interessantes Verhalten erwarten man um $a = 0$. Als kleiner Parameter wurde deshalb zusätzlich $a = 0.1$ betrachtet. Für diese drei Parameter wurde nun der kleinste Eigenwert im Unterraum mit $S_T^z = 1$ für Kettenlängen bis $L = 300$ berechnet. Der DMRG-Parameter m wurde zwischen 45 und 120 variiert. Die Laufzeit des Algorithmus skaliert linear mit der Kettenlänge[1]. Eine Berechnung mit einer Kettenlänge von 300 Gitterplätzen benötigt deshalb die dreifache Zeit im Vergleich zu einer Untersuchung der kürzeren Kette von 100 Plätzen. Aus diesem Grund wurde die oben erwähnte Geradenanpassung einmal für den Bereich $50 \leq L \leq 100$ und im anderen Fall für Werte $100 \leq L \leq 300$ durchgeführt, um die Anregungslücke für unendliche Systeme zu extrapolieren.

Der Truncation-error der DMRG-Durchläufe ist mit 10^{-15} bis 10^{-8} bei Matrixprodukt-Ansätzen sehr gering. Der Fehler der Geradenanpassung liegt für die kleinen Systeme bei 10^{-6}, für die großen bei 10^{-9}.

Bei Verwendung des Parameters $m = 120$ erwartet man nach der Extrapolation der langen Kette die präzisesten Anregungsenergien

$$\begin{aligned} a = 0.1: &\quad \Delta = 0.0045212(1) \\ a = 1.0: &\quad \Delta = 0.18839282(8) \\ a = 2.0: &\quad \Delta = 0.35012437(2) \end{aligned}$$

für die betrachteten Modelle. Mit diesen Referenzwerten wurde die anderen Messwerte verglichen. Die relativen Fehler sind in den Tabellen 7.3 aufgeführt.

Generell erwartet man für kleine DMRG-Parameter m größere Ungenauigkeit. Außerdem vermutet man bei längeren Ketten die präzisere Extrapolation. Beide Vermutungen werden bestätigt. Allerdings sieht man am Fehler für $m = 90$ und $a = 0.1$, dass hier die Extrapolation in der kleineren Systemgröße ungenauer als bei niedrigerem Parameter m sind. Dies liegt daran, dass DMRG-Eigenwerte für eine höhere Anzahl von DMRG-Zuständen m langsamer

[1] Die Berechnungen wurden auf unterschiedlich schnellen SUN-Workstations im Netzwerk des Instituts für Theorischen Physik an der Universität Köln durchgeführt. Die Laufzeit für eine DMRG-Berechnung (100 Gitterplätze) schwankte dabei zwischen 45 Minuten ($m = 45$) und einem Tag ($m = 90$). Pro Parameterkonfiguration wurde in der Regel eine Laufzeit in der Größenordnung von einigen Stunden bis einem Tag benötigt.

Geradenanpassung im Bereich $50 \leq L \leq 100$:

	$a=0.1$	$a=1$	$a=2$
$m=45$	0.06823%	0.01470%	0.01297%
$m=60$	0.06587%	0.00271%	0.00148%
$m=90$	0.08889%	0.00012%	0.00006%

Geradenanpassung im Bereich $100 \leq L \leq 300$:

	$a=0.1$	$a=1$	$a=2$
$m=45$	0.00713%	0.01554%	0.01362%
$m=60$	0.00338%	0.00286%	0.00155%
$m=90$	0.00114%	0.00012%	0.00007%

Tabelle 7.3: Fehler gegenüber Referenzwert bei $m = 120$.

gegen das erwartete $1/L^2$-Verhalten konvergieren, wenn die Korrelationslänge des untersuchten Systems groß ist.

Für große Parameter m muss man also oft auch längere Ketten untersuchen, um eine höhere Genauigkeit zu erzielen, sonst erzielt man unter Umständen mit kleinerem m bei gleicher Kettenlänge bessere Ergebnisse. Für diesen Fall lässt sich festhalten, dass bereits bei kleinem m und einer Kettenlänge von 100 Gitterplätzen eine Genauigkeit erreicht wird, die für viele Untersuchungen gut ausreicht. Mit entsprechend höherem Ressourceneinsatz ist für das MPG-Modell eine sehr große Präzision möglich.

7.3 Modell bei $a = 0$

Wie in Abschnitt 3.7 erwähnt, nimmt das betrachtete Spin-1-Modell für $a = 0$ eine höhere Symmetrie an. Bei $a = 0$ unterbindet der Projektor

$$\begin{aligned}\mathcal{P}_0 =& \frac{1}{2+a^2}\Big(\big|+-\big\rangle_+ + a\big|00\big\rangle\Big)\Big(\big\langle+-\big|_+ + a\big\langle 00\big|\Big)\\ \longrightarrow& \frac{1}{2}\big|+-\big\rangle_+\big\langle+-\big|_+\end{aligned} \tag{7.9}$$

das spontane Erzeugen von $(+,-)$-„Teilchen-Paaren" aus dem lokalen S^z-Vakuum $\big|00\big\rangle$. Die Anzahl der jeweiligen Teilchen ist also erhalten. Damit wird zusätzlich zu S^z_T auch die Summe der Quadrate $\sum_j \left(S^z_j\right)^2$ zu einer guten Quantenzahl. Dies ist äquivalent zur Invarianz gegenüber der in Abschnitt 3.7 eingeführten Symmetrietransformation $\mathcal{D}^{(3)}$.

In [52] gibt ZITTARTZ exakte Eigenzustände des Systems an. Die Spinwellen

$$\big|\psi^0_1(k)\big\rangle = \frac{1}{\sqrt{L}}\sum_n \mathrm{e}^{\mathrm{i}kn} S^+_n \big|00\ldots0\big\rangle \quad \text{und} \tag{7.10}$$

$$\big|\psi^0_{-1}(k)\big\rangle = \frac{1}{\sqrt{L}}\sum_n \mathrm{e}^{\mathrm{i}kn} S^-_n \big|00\ldots0\big\rangle \tag{7.11}$$

bilden Eigenzustände des Systems mit zugehöriger Dispersion

$$e_1(k) = \lambda_1 \left(1 + \sigma \cos k\right). \tag{7.12}$$

Für einen Impuls $k_0 = \pi$ ($k_0 = 0$) und $\sigma = 1$ ($\sigma = -1$) sind die zugehörigen Spinwellen (7.10) und (7.11) neben dem durch das Matrixprodukt darstellbaren einfachen Zustand

$$\left|\psi_{\mathrm{MPG}}\right\rangle = \left|00\ldots0\right\rangle \tag{7.13}$$

ebenfalls Grundzustände für endliche Systeme. ZITTARTZ zeigte, dass für periodische Randbedingungen in diesem Fall keine weiteren Grundzustände existieren können. Für endliche, periodisch geschlossene Ketten sind also $\left|\psi_1^0(k_0)\right\rangle$, $\left|\psi_{-1}^0(k_0)\right\rangle$ und $\left|\psi_{\mathrm{MPG}}\right\rangle$ die drei einzigen Grundzustände. Im thermodynamischen Limes sind jedoch infinitesimal kleine Anregungen möglich. Die unendliche Kette weist hier sowohl im Raum $S_T^z = 0$ als auch in den Unterräumen $S_T^z = \pm 1$ ein Anregungskontinuum über dem dreifach entarteten Grundzustand auf.

Für Modelle mit $a \neq 0$ erwartet man im Gegensatz zu diesem Verhalten eine endliche (massive) Anregungslücke über einem eindeutigen Matrixprodukt-Grundzustand. Das Skalieren der Anregungslücke bei kleinem a ist von besonderem Interesse und ein Schwerpunkt der folgenden numerischen Untersuchungen.

7.4 Anregungen im Unterraum $S_T^z = 0$

In Abbildung 7.1 ist der Verlauf der niedrigsten Anregung im Unterraum $S_T^z = 0$ aufgetragen.

Eine Unstetigkeit um $a = 1.3$ ist auffälligstes Merkmal des Graphen. Wie weiter unten gezeigt wird, ist sie als Artefakt der numerischen Methode zu verstehen. Die Anregungslücke nimmt im Bereich des Sprungs ein Maximum an und fällt beiderseits des Sprungs zu sehr großen und zu sehr kleinen Werten von a monoton ab. Für $a \to 0$ verschwindet die Anregungslücke. Auch für große a beobachtet man ein kontinuierliches Absinken. Die Unstetigkeitsstelle ist starkes Signal für den unterschiedlichen Charakter der Anregungen für kleine bzw. große a.

In Abbildung 7.2 ist der Unstetigkeitsbereich aus Abbildung 7.1 vergrößert aufgetragen. Zusätzlich zu den Messungen mit DMRG-Parameter $m = 45$ wurden Messungen mit den höheren Genauigkeiten $m = 90, 120$ durchgeführt. Für größere m verschiebt sich die Unstetigkeitsstelle zu höheren a und die Sprunghöhe wird kleiner. Das Verhalten lässt sich für den abgebildeten Bereich mit der Existenz zweier Äste erklären, die sich an einem Punkt $a_c \approx 1.4$ schneiden. Für $a < a_c$ zeigt der gepunktet skizzierte Ast mit positiver Steigung die niedrigere Anregungsenergie. Ein zweiter Ast, gestrichelt eingezeichnet, weist negative Steigung auf und bildet für $a > a_c$ das niedrigere Energieniveau. Da dieses Niveau auch für $a < a_c$ beobachtet werden kann, lässt sich dies als ein Kreuzen der Energieniveaus, ein so genanntes *Level-crossing*, bei $a = a_c$ interpretieren.

Das Skalieren der Anregungslücke mit der betrachteten Kettenlänge im Bereich der Unstetigkeit ist in Abbildung 7.3 für $m = 90$ exemplarisch dargestellt.

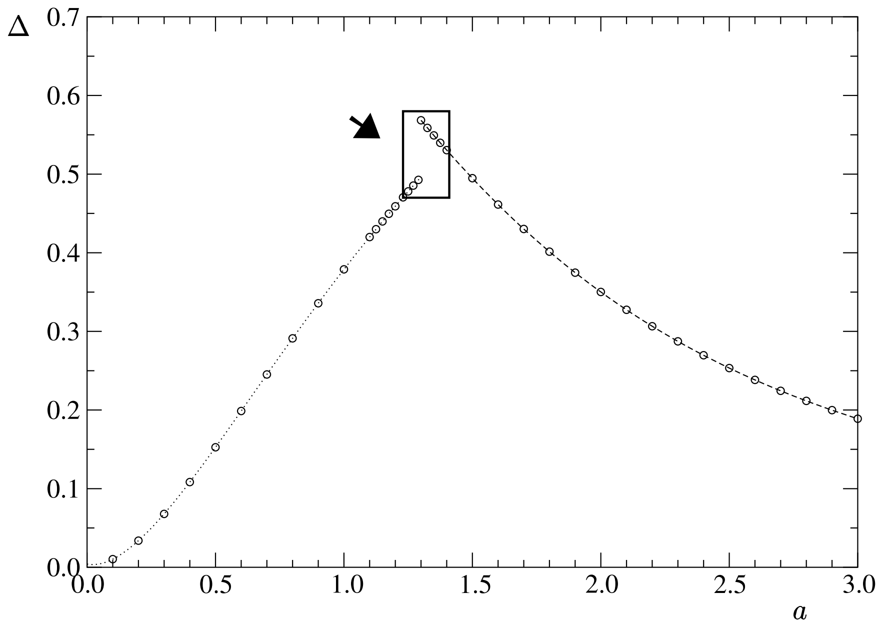


Abbildung 7.1: Per DMRG ermittelte Anregungslücke für $S_T^z = 0$ gegen Parameter a aufgetragen. Um $a = 1.3$ findet man eine Unstetigkeit in der niedrigsten Energie. ($m = 45, L = 100$, periodische Randbedingungen)

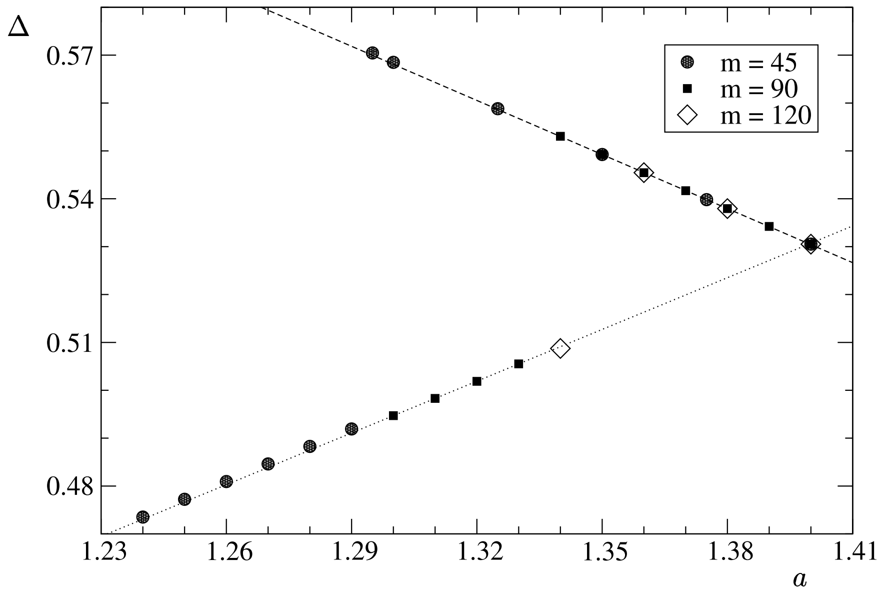


Abbildung 7.2: Verhalten der Anregungslücke für verschiedene DMRG-Parameter m.

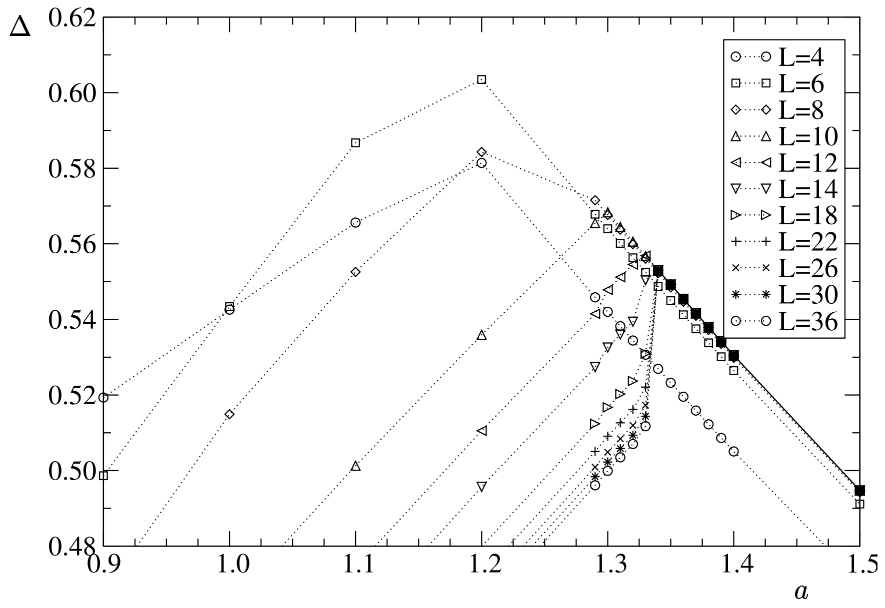


Abbildung 7.3: Skalieren der Anregungslücke mit Kettenlänge L ($m = 90$, periodische Randbedingungen)

Bei kleinen Kettenlängen ist der Verlauf im abgebildeten Bereich glatt. Für $L = 4, 6, 8$ wird das Maximum der Kurve um $a = 1.2$ herum angenommen. Dieses Maximum verschiebt sich für längere Ketten zum Punkt $a = 1.34$ und stabilisiert sich bei 0.553, während die Lücke für $a < 1.34$ absinkt. Hier sieht man deutlich, dass sich die Unstetigkeit schon bei relativ kleinen Kettenlängen $L \approx 20$ herausbildet. Diese Konvergenzeigenschaft lässt sich auch bei den anderen betrachteten Parameterwerten $m = 45, 120$ beobachten. Da die in dieser Arbeit untersuchten Ketten in der Regel mindestens eine Länge $L = 100$ aufweisen, kann der Sprung kein Resultat einer zu geringen Systemgröße sein. Stattdessen findet man eine signifikante Abhängigkeit vom Parameter m. Der hier angewandte Infinite-system-Algorithmus der DMRG-Methode ist in dem betrachteten Bereich $a \approx a_c$ nur bei sehr großen – d.h. rechenintensiven – Zustandsräumen genau.

Im unterschiedlichen Konvergenzverhalten, dargestellt in Abbildung 7.3, tritt auch der unterschiedliche Charakter der Anregungsniveaus hervor. Das steigende Niveau des Bereichs $a < a_c$ liegt für hohe Systemgrößen deutlich unter dem ersten Energieniveau für die kleine Kettenlänge $L = 4$. Es konvergiert langsam mit zunehmender Zahl von Gitterplätzen. Das abfallende Niveau in $a > a_c$ liegt dagegen über dem sehr kleinen System mit $L = 4$ und konvergiert schnell gegen den thermodynamischen Limes.

Für sehr kleine a gibt die Single-Mode-Approximation (nächster Abschnitt) ein quadratisches Verschwinden der Anregungslücke als obere Schranke. Im Inset von Abbildung 7.4 kann man die Parabelform der Anregung feststellen. Im großen Diagramm ist die Energielücke in Einheiten von a^2 dargestellt. Bei Ver-

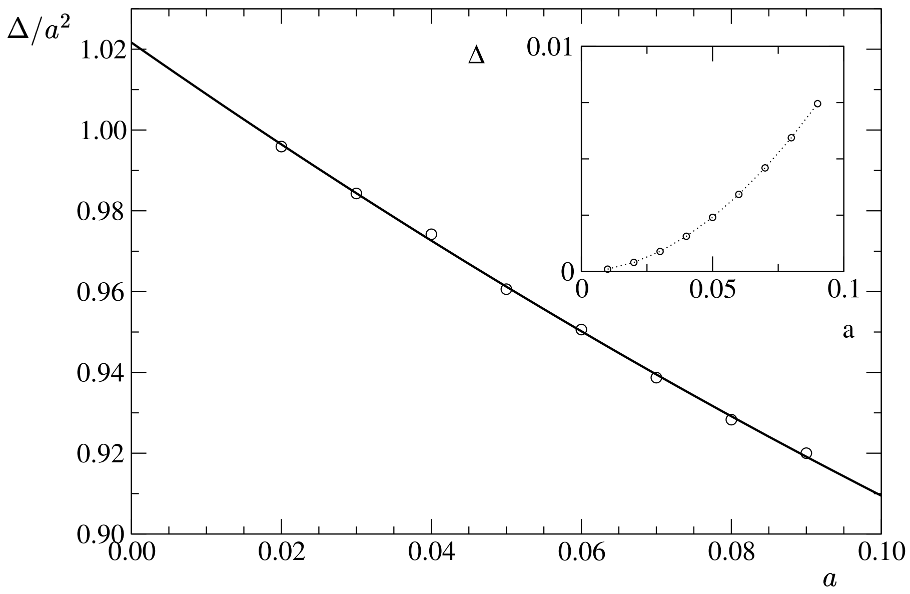


Abbildung 7.4: Messpunkte im Unterraum $S^z_T = 0$ für kleine a. Die Energielücke ist in Einheiten von a^2 aufgetragen, um die Koeffizienten der a-Entwicklung abschätzen zu können. Die DMRG-Messwerte sind als Kreise dargestellt. Die fett gezeichnete Linie entspricht einer angepassten Parabel. Im Inset Δ gegen a. ($m = 60, l = 300$, periodische Randbedingungen)

gleich mit Abb. 7.7 äußert sich eine etwas schlechtere Konvergenz der DMRG-Messwerte. Freilich bilden jedoch auch hier die Messpunkte in guter Näherung eine Gerade.

Tatsächlich ist es für die rechnerische Approximation sinnvoll, eine Ordnung mehr zu betrachten, da für $a \approx 0.1$ auch Terme der Größenordnung a^2 einen nicht zu vernachlässigenden Beitrag liefern können. Ein Fit liefert für kleine a eine Energielücke

$$\Delta \approx 1.02a^2 - 1.30a^3 + 1.74a^4. \tag{7.14}$$

Messungen mit größerem DMRG-Parameter m können eventuell das gemessene Niveau noch um ein oder zwei Prozent absenken, so dass ein glatter Koeffizient 1 für die erste nicht verschwindende Ordnung wahrscheinlich ist. Die Vorfaktoren der anderen beiden Ordnungen liefern einen Hinweis auf die zu erwartende Größenordnung für den exakten Wert.

7.5 Die Single-Mode-Approximation

Aus der Theorie des Linearen Responses ist bekannt, dass experimentell messbare dynamische Korrelationen von den angeregten Zuständen und ihren Energien abhängen. Basierend auf den Grundzustandskorrelationen lassen sich angeregte Zustände konstruieren. Dieser Ansatz nennt sich *Single-Mode-Approximation (SMA)*.

Die Single-Mode-Approximation ist ein Variationsverfahren über einem bekannten Grundzustand. Dazu wird eine lokal orthogonale Störung konstruiert, die zur Berücksichtigung der Translationsinvarianz wellenartig fortgesetzt wird. Der so erhaltene Zustand besitzt einen bestimmten Impuls und ist orthogonal zum Grundzustand, so dass er eine obere Schranke für die Anregungen angibt.

Mit Hilfe der SMA konnte in [53] die Anregungslücke des VBS-Modells bis auf 6% angenähert werden. In [12] wurde gezeigt, dass der bei der SMA berechnete Ein-Magnonen-Zustand den wesentlichen Beitrag für die niedrigste Anregung liefert. Die verwendeten Begriffe entsprechen den Bezeichnungen in [53].

Sei

$$\left|\psi_k\right\rangle = \lim_{L\to\infty} \frac{1}{\sqrt{L}} \frac{1}{\sqrt{Z}} \sum_{j=1}^{L} e^{ikj} S_j^z \left|\psi_0\right\rangle \tag{7.15}$$

der per SMA angeregte Zustand. Er steht senkrecht[2] auf dem eindeutigen Matrixprodukt-Grundzustand $\left|\psi_0\right\rangle$ und liefert somit eine obere Schranke für die Anregung. Sein Energie-Erwartungswert ist

$$\omega_k = \frac{F_k}{S_k}, \tag{7.16}$$

wobei

$$S_k = \left\langle \psi_k \middle| \psi_k \right\rangle \tag{7.17}$$

[2]Der Beweis lässt sich über die Transfermatrix-Methode führen.

als Norm des SMA-Zustands oder als statischer Strukturfaktor bezeichnet werden kann.

$$F_k = \langle \psi_k | H | \psi_k \rangle \tag{7.18}$$

ist die Oszillationsstärke.

Als Grundzustandseigenschaften kann man beide Größen

$$S_k = \frac{|a|\,(1-\cos k)}{1+a^2+(a^2-1)\cos k} \tag{7.19}$$

und

$$F_k = \frac{\lambda_0 \frac{2a^2}{2+a^2} + \lambda_1\,|a|}{(1+|a|)^2}\,(1-\cos k) \tag{7.20}$$

über die Transfermatrix-Methode berechnen. Die Herleitung ist im Anhang B skizziert. Damit stellt der Energie-Eigenwert des SMA-Zustands

$$\omega_k = \left(\frac{2\,|a|}{2+a^2}\lambda_0 + \lambda_1\right)\left[\frac{1+a^2}{(1+|a|)^2} + \frac{a^2-1}{(1+|a|)^2}\cos k\right] \tag{7.21}$$

eine obere Schranke für die Anregungslücke des MPG-Modells dar. Für $|a| > 1$ beobachtet man die geringste Energie bei $k = \pi$, der Erwartungswert vereinfacht sich zu

$$\omega_\pi = \frac{2}{(1+|a|)^2}\left(\frac{2\,|a|}{2+a^2}\lambda_0 + \lambda_1\right) \tag{7.22}$$

mit verschwindender Anregungslücke für unendliches a. Im Falle von $|a| < 1$ erhält man die geringste Lücke

$$\omega_0 = \frac{2a^2}{(1+|a|)^2}\left(\frac{2\,|a|}{2+a^2}\lambda_0 + \lambda_1\right) \tag{7.23}$$

bei $k = 0$. Eine Entwicklung für kleine $|a|$

$$|a| \to 0: \quad \omega_0 = 2\lambda_1 a^2 + (2\lambda_0 - 4\lambda_1)a^3 + \mathrm{O}(a^4) \tag{7.24}$$

prognostiziert ein Verschwinden der Anregungslücke proportional zu a^2.

In Abbildung 7.5 sind die SMA-Anregungen zu den Impulsen $k = 0$ (durchgezogene Linie) und $k = \pi$ (fettgezeichnete Linie) im Vergleich zu den numerischen Daten aufgetragen. Die Variationsenergie für $k = \pi$ liefert eine gute Übereinstimmung mit experimentellen Daten im Bereich $a > a_c$. Für den Bereich in der Nähe des Level-crossings liegt allerdings eine energetische Abweichung vor. Sie lässt sich, analog zu den Ergebnissen von Freitag für das VBS-Modell [12], durch eine kleine Beimischung von Zuständen mit höherer Magnonenzahl interpretieren. Für $a \to \infty$ werden die beiden Graphen asymptotisch gleich.

Für $a < a_c$ ist der SMA-Zustand als zum Grundzustand orthogonaler Zustand mit $k = 0$ eine obere Schranke. Allerdings gibt es hier möglicherweise noch energetisch tieferliegende Variationszustände, die das numerisch beobachtete Verhalten genauer beschreiben. Insbesondere scheint gerade die Hälfte der errechneten Variationsenergie ω_0 (im Diagramm gestrichelt) die Anregungen für $a < a_c$ genauer zu beschreiben. Dieser Faktor mag vielleicht darauf zurückzuführen sein, dass hier ein anisotropes Modell vorliegt. Für große a zeigt das System Easy-axis-Anisotropie und die Störungsrechnung mit dem Operator S^z liefert gute Ergebnisse. Für kleine a liegt Easy-plane-Anisotropie vor, möglicherweise ist hier die Wahl eines anderen Operators günstiger.

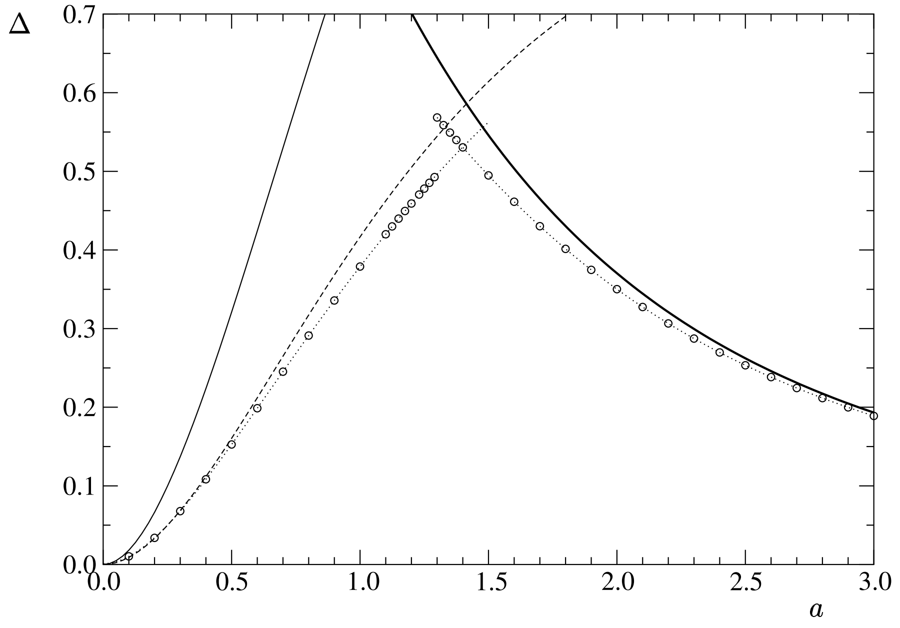


Abbildung 7.5: Per DMRG ermittelte Anregungslücke für $S_T^z = 0$ gegen Parameter a im Vergleich zu Single-Mode-Anregungen. Eingezeichnet sind die DMRG-Messwerte (Punkte), die Variationsenergien ω_0 (durchgezogene Linie) und ω_π (fettgedruckt) sowie $\omega_0/2$ (gestrichelt). ($m = 45, L = 100$, periodische Randbedingungen)

7.6 Anregungen im Unterraum $S^z_T = 1$

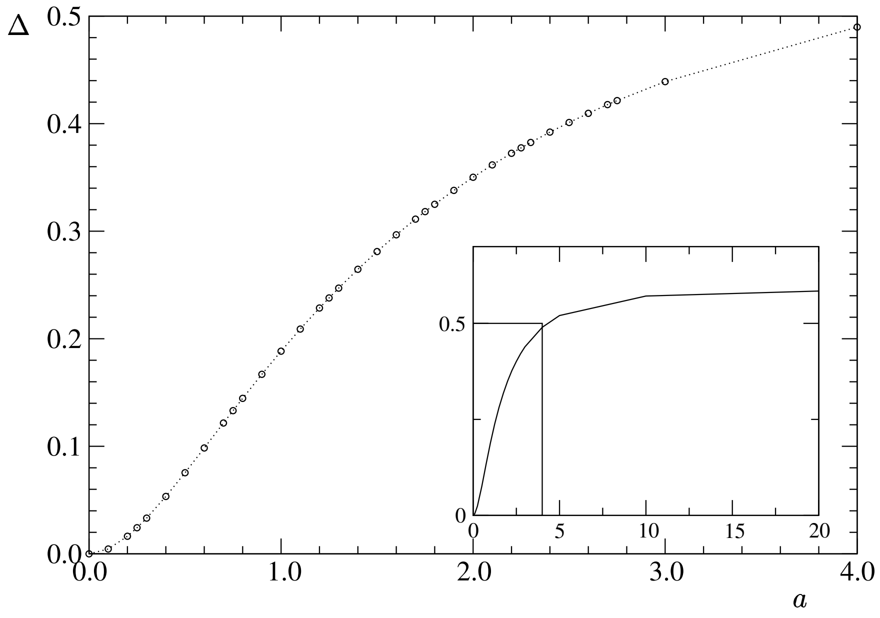


Abbildung 7.6: Anregungslücke im Unterraum $S^z_T = 1$ gegenüber MPG-Parameter a. $(m = 60, l = 100)$

Abbildung 7.6 zeigt die Anregungslücke im Unterraum $S^z_T = 1$. Auch hier verschwindet die Anregung am Punkt höherer Symmetrie $a = 0$. Für größere Parameterwerte steigt sie allerdings monoton an. Bis zum VBS-Punkt bei $a = a_T = 2$ liegt die tiefste Anregung hier unterhalb der ersten Anregung im Unterraum $S^z_T = 0$ [3]. Dies ist anschaulich dadurch zu verstehen, dass sich die antiferromagnetische Ordnung – messbar durch die oben angegebenen Korrelationslängen – für den Bereich $a < 2$ transversal zur Vorzugsrichtung z ausbildet. Man spricht hier von *Easy-plane-Anisotropie*. Eine Anregung in z-Richtung ist daher energetisch günstiger zu realisieren. Für $a > 2$ kippt die Ordnung in die Vorzugsrichtung z, bis der Grundzustand im Grenzfall $a \to \infty$ zu einer Überlagerung zweier Néel-Zustände geworden ist. Dieses Verhalten entspricht einer *Easy-axis-Anisotropie*. Hier sind Anregungen im Unterraum $S^z_T = 0$ energetisch von Vorteil.

Das Verhalten um $a = 0$ wird in Abbildung 7.7 untersucht. Für den Bereich $a > a_T$ liegt die niedrigste Anregung im Unterraum $S^z = 1$. Eine obere Schranke ist deshalb auch für a die SMA aus dem Unterraum $S^z_T = 0$.

Das erwartete maximal quadratische Verhalten für $a \to 0$ ist im Inset von Abbildung 7.7 zu erkennen. Im großen Diagramm ist die Energielücke in Ein-

[3] Der Index T zum Punkt a_T wurde gewählt, da beim VBS-Modell hier ein Anregungs-Triplett vorliegt.

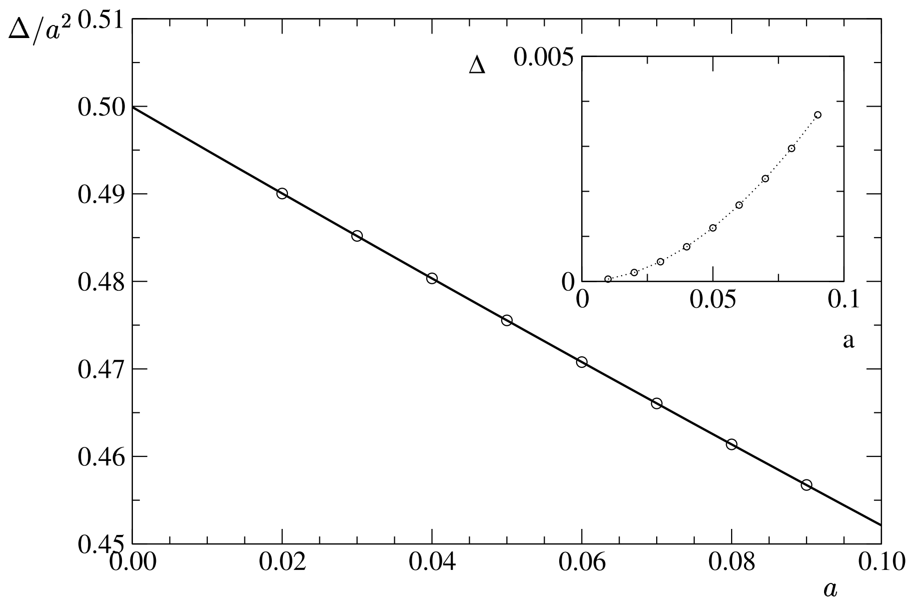


Abbildung 7.7: Messpunkte im Unterraum $S_T^z = 1$ für kleine a. Die Energielücke ist in Einheiten von a^2 aufgetragen, um die Koeffizienten der a-Entwicklung abschätzen zu können. Die DMRG-Messwerte sind als Kreise dargestellt. Die fett gezeichnete Linie entspricht einer angepassten Parabel. Im Inset ist Δ gegen a aufgetragen. ($m = 60, l = 300$, periodische Randbedingungen)

heiten von a^2 dargestellt. Die Messwerte zeigen optisch ein schönes Geradenverhalten.

Zur Approximation der Vorfaktoren soll auch hier eine weitere Ordnung einbezogen werden,

$$\Delta \approx 0.500a^2 - 0.497a^3 - 0.189a^4, \tag{7.25}$$

die auf den glatten Koeffizienten 1/2 für die quadratische als erste nicht verschwindende Ordnung hindeutet. Die Schwankungsbreite für die beiden nächsthöheren Vorfaktoren ist größer. Man kann jedoch davon ausgehen, dass Vorzeichen und Größenordnung gute Anhaltspunkte für die exakten Koeffizienten geben. Insbesondere ist der Koeffizient zum Faktor a^3 wahrscheinlich der rationale Wert $-1/2$.

7.7 Anregungen im Unterraum $S_T^z = 2$

In Abbildung 7.8 ist der niedrigste Energieeigenwert im Unterraum $S_T^z = 2$ gegen a aufgetragen. Zum Vergleich mit den oben beschriebenen Energielücken

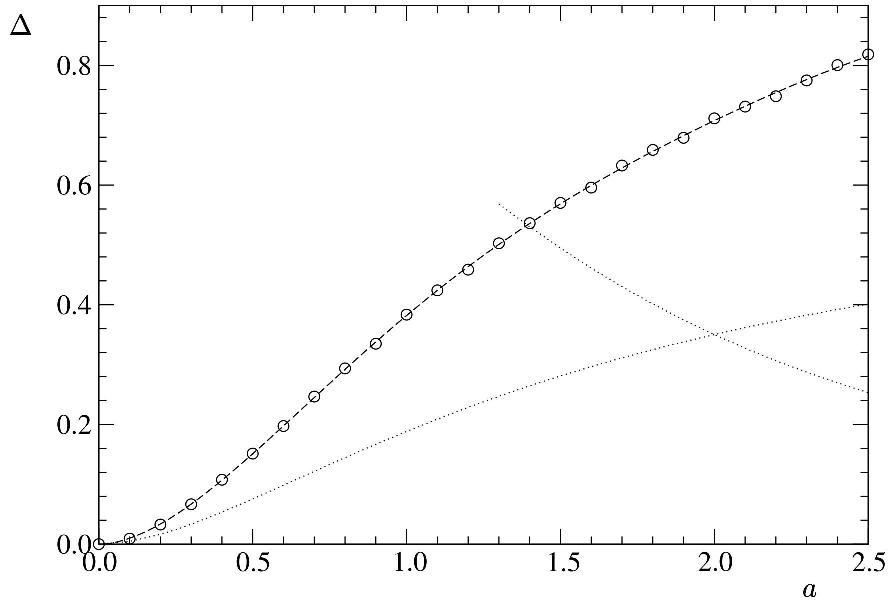


Abbildung 7.8: Anregungslücke im Unterraum $S_T^z = 2$. Die DMRG-Messpunkte sind als Kreise dargestellt. Zum Vergleich sind als gestrichelte Linien die untersten Anregungen in den Unterräumen $S_T^z = 0, 1$ dargestellt. ($m = 45, l = 100$, periodische Randbedingungen)

sind die tiefsten Äste für die beiden anderen Unterräume eingezeichnet. Für $a < a_c \approx 1.4$ fallen die tiefsten Anregungen in den Unterräumen $S_T^z = 0$ und $S_T^z = 2$ zusammen. Jenseits von a_c jedoch steigt der hier betrachtete Ast mit

$S_T^z = 2$ monoton weiter an und bleibt dabei deutlich über der tiefsten Energie für $S_T^z = 1$.

Im Bereich $a \approx 0$ skaliert die Anregung genau wie die Energiedifferenz im Unterraum $S_T^z = 0$. Das entsprechende Diagramm ist identisch mit Abbildung 7.4. Auch hier beobachtet man quadratisches Verhalten mit einem Vorfaktor nahe Eins.

7.8 Höhere Energien

Neben den tiefsten Anregungen wurden per DMRG die nächstniedrigen Energien in den Unterräumen mit $S_T^z = 0, 1$ gemessen. Da in beiden Fällen fünf Energien gemessen wurden, erhielt man für $S_T^z = 0$ den Grundzustand und vier Anregungen und für den anderen Fall fünf Anregungen.

In den Diagrammen 7.9 und 7.10 ist das Konvergenzverhalten für zwei Punkte exemplarisch dargestellt. Alle angeregten Niveaus konvergieren im thermodynamischen Limes gegen den gleichen Wert im jeweiligen Unterraum. Dieses Verhalten ist konsistent mit der Vorstellung, dass sich die Anregungen als Magnonen zu bestimmtem Impuls ausdrücken lassen. Für unendliche Systemgröße gestattet dann die Dispersion ein Energiekontinuum über der Anregungslücke. FÁTH und SÓLYOM zeigten in [50] für Spinketten mit S_T^z-Erhaltung, dass niedrigliegende Zustände in Unterräumen $S_T^z > 0$ notwendigerweise ein Kontinuum bilden. Auch hier stimmen die numerischen Ergebnisse mit der Theorie überein.

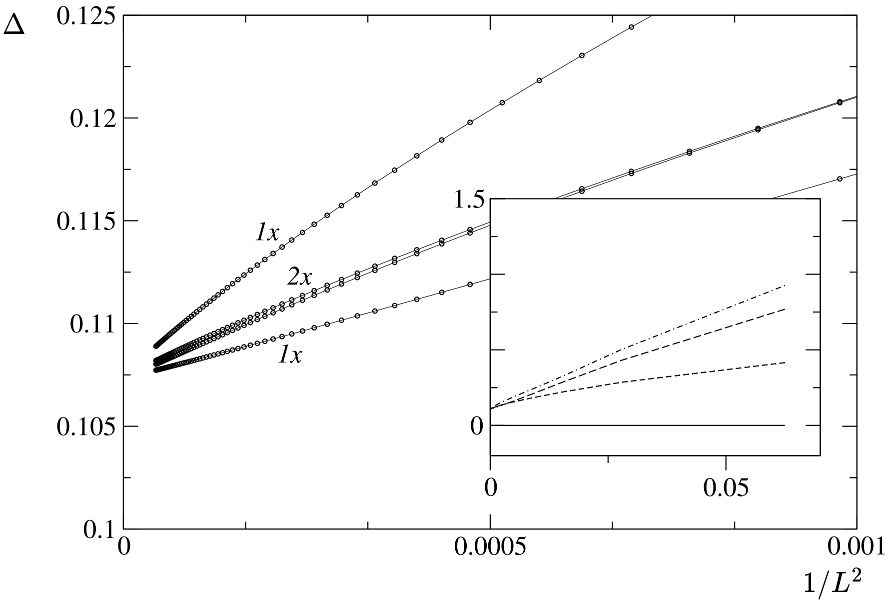
7.9 Variation der λ-Parameter

In den Abbildungen 7.11, 7.12 und 7.13 sind DMRG-Resultate aus Durchläufen mit modifizierten λ-Parametern aufgetragen. Zum Vergleich sind in jedem Diagramm die Äste aus dem bisher diskutierten Modell mit

$$\lambda_0 = \lambda_1 = \lambda_2 = 1 \tag{7.26}$$

gestrichelt eingetragen. Gemessen wurden für die drei Unterräume $S_T^z = 0, 1, 2$ die jeweils zwei niedrigsten Eigenenergien des Systems. Für $S_T^z = 0$ wurde damit die Grundzustandsenergie und die erste Anregung bestimmt. Die Grundzustandsenergie ist jedoch auf Null normiert und hier nicht eingetragen. In den Unterräumen $S_T^z \neq 0$ sind die beiden niedrigsten Energien asymptotisch entartet. Deshalb wurde hier nur eine Energie eingezeichnet.

Untersucht wurden Ketten der Länge $L = 100$ in dem DMRG-Zustandsraum mit $m = 45$ Zuständen. Die Resultate konvergieren, abgesehen von dem oben diskutierten Verhalten im Bereich des Level-crossings, gut. Für präzisere quantitative Aussagen wäre freilich eine rechenzeitintensivere Untersuchung notwendig. Um einen Eindruck des Einflusses der MPG-Modellparameter λ_0, λ_1 und λ_2 auf die Lage der Anregungsniveaus zu gewinnen, wurden abweichend vom Ausgangsmodell mit $\lambda_{0,1,2} = 1$ die Parameter jeweils einzeln auf den Wert 2 angehoben.



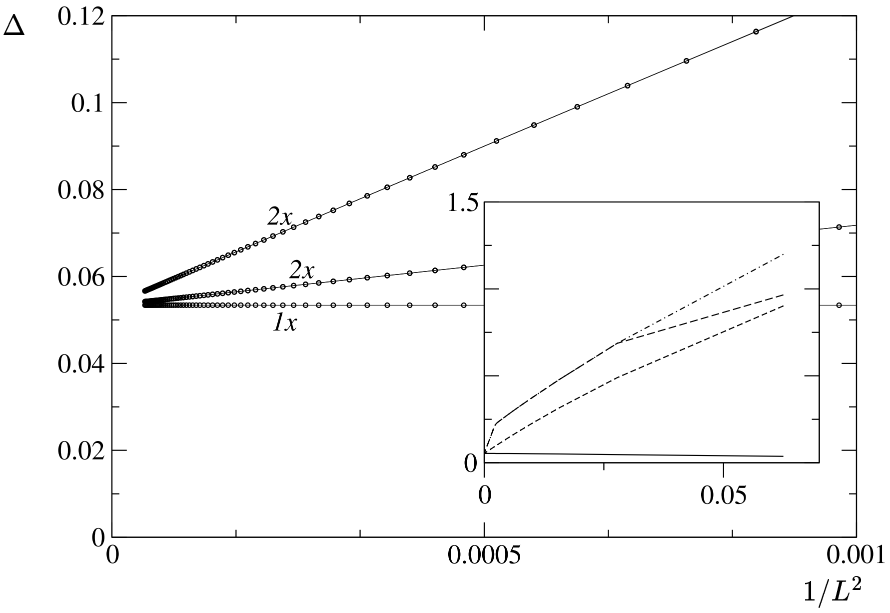
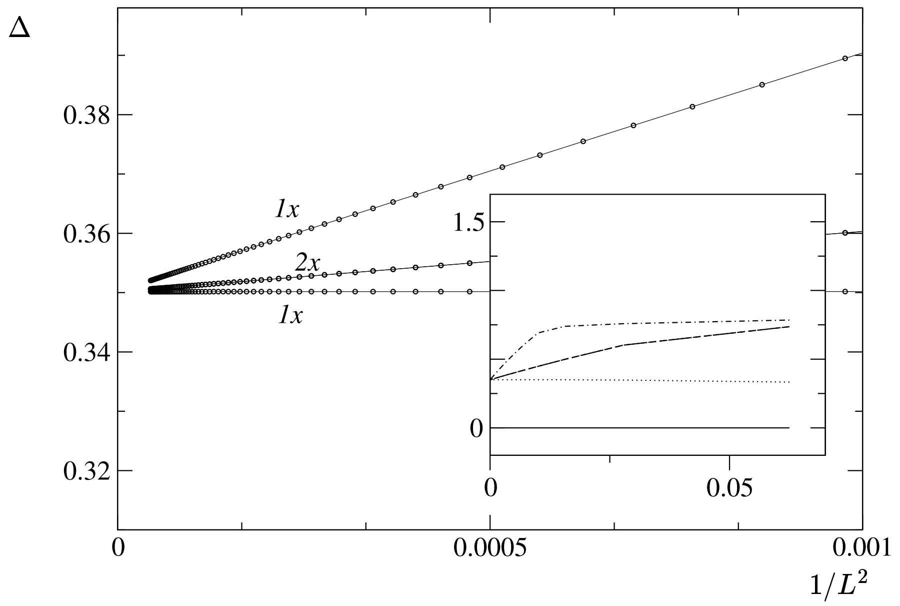


Abbildung 7.9: Konvergenzverhalten der DMRG-Messpunkte für $a = 0.4$ im Unterraum $S_T^z = 0$ (oben) und $S_T^z = 1$ (unten). Aufgetragen sind die tiefsten fünf Eigenenergien gegen das inverse Quadrat der Kettenlänge. Im Inset ist das volle Diagramm abgebildet. ($m = 45, l = 150$, periodische Randbedingungen)



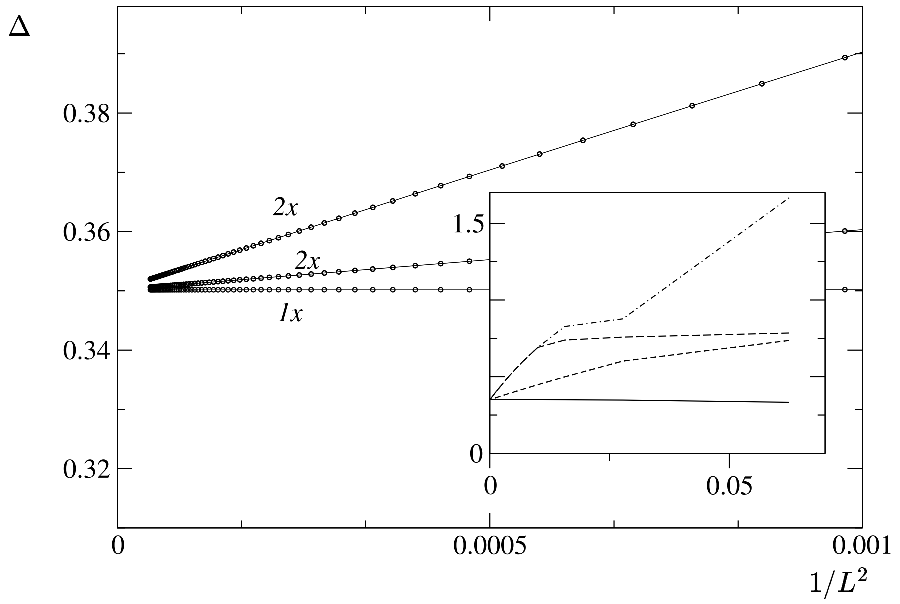


Abbildung 7.10: Konvergenzverhalten der DMRG-Messpunkte am isotropen Punkt $a = 2$ im Unterraum $S^z_T = 0$ (oben) und $S^z_T = 1$ (unten). Aufgetragen sind die tiefsten fünf Eigenenergien gegen das inverse Quadrat der Kettenlänge. Im Inset ist das volle Diagramm abgebildet. ($m = 45, l = 150$, periodische Randbedingungen)

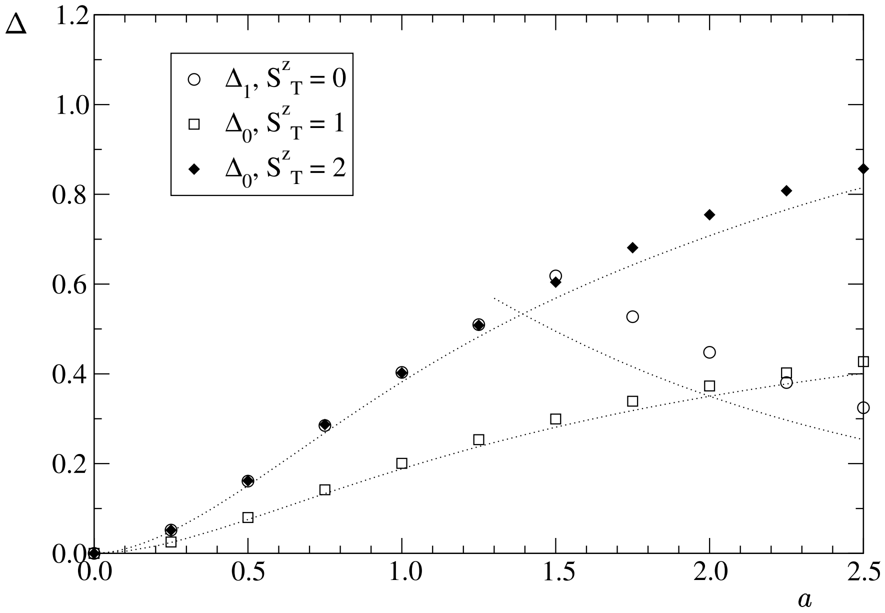


Abbildung 7.11: $\lambda_0 = 2, \lambda_1 = 1, \lambda_2 = 1$ $(m = 45, l = 300)$

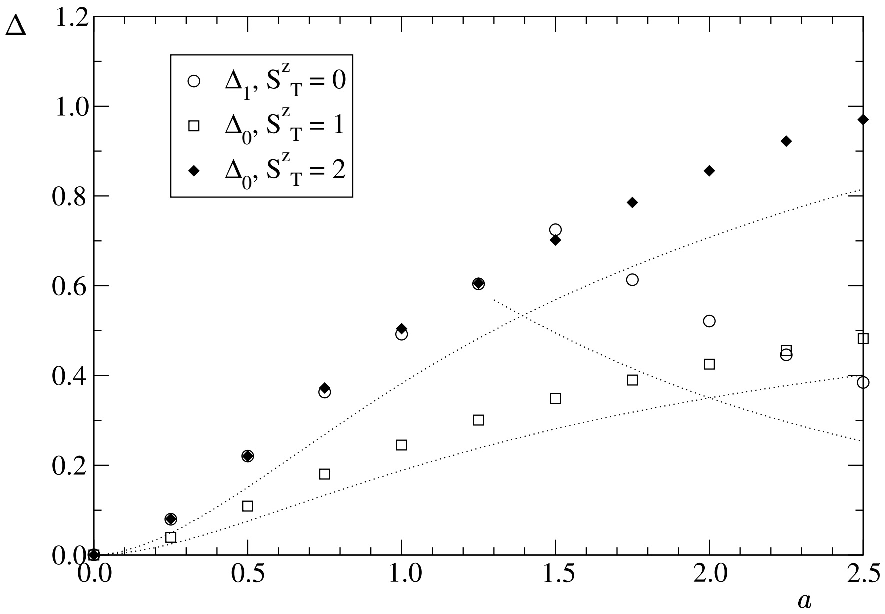


Abbildung 7.12: $\lambda_0 = 1, \lambda_1 = 2, \lambda_2 = 1$ $(m = 45, l = 300)$

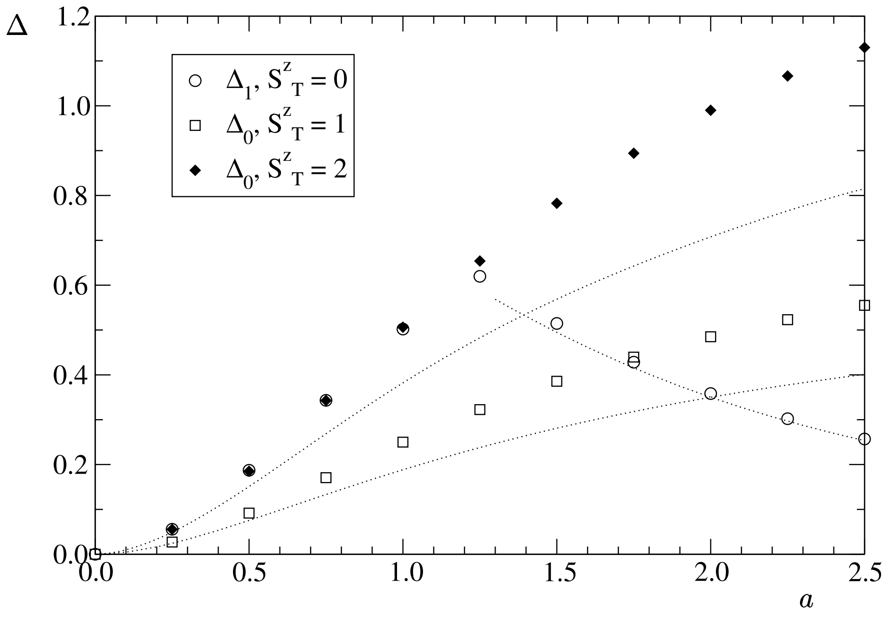


Abbildung 7.13: $\lambda_0 = 1, \lambda_1 = 1, \lambda_2 = 2$ ($m = 45, l = 300$)

Das qualitative Verhalten der Anregungsniveaus des oben diskutierten Ausgangsmodells findet sich ebenfalls bei allen untersuchten Varianten. Insbesondere ist auch hier das Level-crossing im Unterraum $S^z_T = 0$ bei a_c zu beobachten. Weiterhin gibt es ein zweites Level-crossing zwischen Niveaus in den Unterräumen $S^z_T = 0$ und $S^z_T = 1$ am Punkt a_T, der bei $a_T = 2$ im Ausgangsmodell das VBS-Modell repräsentiert.

Von besonderem Interesse ist der Vergleich der numerischen Daten mit der in Abschnitt 7.5 angegebenen analytisch berechenbaren Single-Mode-Approximation. Für den Ast im Unterraum $S^z_T = 0$ oberhalb von a_c tritt die in (7.22) postulierte Abhängigkeit von λ_1 (Abb. 7.12) und – etwas schwächer – von λ_0 (Abb. 7.11) deutlich hervor. Ein signifikanter Einfluss von λ_2 (Abb. 7.13) ist nicht auszumachen. Für $a < a_c$ sind die Anregungsniveaus in den Unterräumen $S^z_T = 0$ und $S^z_T = 2$ entartet. Diese Entartung bleibt auch für die verschiedenen λ-Konfigurationen bestehen. Für $a \to 0$ ist die durch die SMA in (7.23) angegebene λ_1-Abhängigkeit deutlich auszumachen. Eine sehr schwache Niveau-Anhebung findet sich entsprechend für die Variation von λ_0. Für sehr kleine a nimmt die Änderung von λ_2 keinen Einfluss. Dies ist konsistent mit der Darstellung des Verhaltens um $a = 0$ aus Abschnitt 7.3. Lokale Zustände mit nichtverschwindendem S^z können als $(+,-)$-Paare erzeugt werden und kosten ein hohes Maß an Energie. Zustände mit $(++)$- und $(--)$-Konfigurationen, auf die der Projektor $\mathcal{P}_{\pm 2}$ wirkt, sind also energetisch benachteiligt und leisten in tiefliegenden Anregungen höchstens einen schwachen Beitrag. Für große a verhält es sich umgekehrt. Hier sind die Spins parallel zur z-Achse ausgerichtet. In den angeregten Zuständen mit $S_T^z \neq 0$ werden $(++)$- und $(--)$-Konfigurationen wahrscheinlich, der Einfluss von λ_2 also entsprechend größer.

Im Unterraum $S_T^z = 1$ wird die erste Anregung durch Variation von λ_0 allenfalls geringfügig angehoben. Stärkeren Einfluss nehmen die Parameter λ_1 und – für größere a dominanter – λ_2.

Die Level-crossing-Punkte a_c und a_T variieren mit der Änderung der Anregungsäste. Der Schnittpunkt in Unterraum $S_T^z = 0$ verschiebt sich für erhöhte λ_0 und λ_1 zu größeren a, während er für erhöhtes λ_2 zu kleineren Werten von a rückt:

$(\lambda_0, \lambda_1, \lambda_2)$	a_c	$\Delta(a_c)$
$(1,1,1)$	1.40	0.53
$(2,1,1)$	1.50	0.60
$(1,2,1)$	1.55	0.70
$(1,1,2)$	1.20	0.65

(7.27)

Die Werte sind graphische Approximationen aus den Abbildungen 7.11 bis 7.13. Der im Originalmodell isotrope Punkt ist für andere Parameterkonfigurationen bei

$(\lambda_0, \lambda_1, \lambda_2)$	a_T	$\Delta(a_T)$
$(1,1,1)$	2.00	0.35
$(2,1,1)$	2.20	0.40
$(1,2,1)$	2.20	0.45
$(1,1,2)$	1.70	0.45

(7.28)

zu finden. Er verschiebt sich ähnlich wie das obere Level-crossing.

8 Zusammenfassung und Ausblick

In diesem Kapitel werden die Eigenschaften des in dieser Arbeit entstandenen DMRG-Programms und die Ergebnisse zur BLBQ-Kette und den Anregungen über dem Matrixprodukt-Grundzustand zusammengefasst. Am Ende steht ein Ausblick.

8.1 DMRG-Programm

In der vorliegenden Arbeit wurde der *DMRG-Algorithmus* für einen breiten Parameterbereich implementiert. Das Programm wurde in der Sprache C++ geschrieben und viele Programmbereiche objektorientiert gestaltet, die Abstraktionseinheiten des DMRG-Algorithmus, wie z.B. Operatormatrix oder Block, treffend widerspiegeln.

Der Programmcode wurde nicht für ein spezielles Modell entworfen, sondern erlaubt die Angabe einer Vielzahl von Parametern (Anhang C), wie Spingröße, Wechselwirkungsoperatoren, Single-Ion-Terme und Randbedingungen. Die jedoch bei allen Modellen eingeforderte Erhaltungsgröße S_T^z wird zur Verringerung des Hilbertraums und damit zur Einsparung von Computerressourcen genutzt. Die Systemparameter, die z. B. den Hamiltonian bestimmen, lassen sich durch eine einfache Initialisierungsdatei an das Programm übergeben. Eine Neu-Kompilierung ist hier nicht nötig. Dies erlaubt auch dem ungeübten Anwender eine Nutzung des Programms.

8.2 BLBQ-Kette

Genauigkeit und Grenzen des verwendeten Algorithmus wurden anhand der *bilinear-biquadratischen Kette* untersucht. Die Grundzustandsenergie pro Gitterplatz wurde für den antiferromagnetischen Bereich bestimmt. Eine erste Fehlerabschätzung über den DMRG Truncation-error ließ die besten Daten für die Haldane-Phase um den VBS-Punkt herum erwarten. Tatsächlich findet man, dass die besten numerischen Ergebnisse im Bereich des Optimum-Grundzustands erzielt werden. Allerdings konnte die Grundzustandsenergie auch für exakt bekannte Punkte außerhalb der Haldane-Phase auf ungefähr 1% approximiert werden. Ebenfalls für den antiferromagnetischen Bereich wurde die erste Anregung im Unterraum $S_T^z = 0$ numerisch bestimmt. Das Konvergenzverhalten mit der Kettenlänge unterscheidet sich in den einzelnen Phasen drastisch. Während man in der Haldane-Phase auch für die Anregung schnelle Konvergenz zur Anregungsenergie beobachtet, treten in Trimer- und Dimer-Phase die strukturellen Besonderheiten deutlich hervor. In der Trimer-Phase ist eine Schwankung mit einer Periode von drei Iterationsschritten (entspricht sechs Gitterplätzen) festzustellen. Das von der Literatur prognostizierte Verschwinden der Anregungslücke ist nicht präzise anzugeben. Für die Dimer-Phase gibt es einen für endliche Systeme eindeutigen Grundzustand, der im thermodynamischen Limes mit einem zweiten Anregungsniveau entartet. Darüber existiert eine endliche Anregungslücke. Hier zeigte sich zunächst das Absinken des Anregungsniveaus, allerdings stieg bei großen Systemen die Energie schließlich wieder abrupt an. Dieses Verhalten kann daher rühren, dass das tiefliegende zweite Niveau für große Systeme der Numerik nicht mehr zugänglich ist, d.h. der renormierte Hilbertraum nicht mehr die für den niedrigen Ast relevanten Zustände besitzt, und sich so die endliche Anregungslücke auswirkt.

8.3 Anregungen über dem MPG

Im Bereich des *Matrixprodukt-Grundzustands* wurde das bislang weitestgehend unbekannte Anregungsspektrum der Modellklasse untersucht. In einer Diskussion der vorliegenden Symmetrien wurde festgestellt, dass sich für den Parameterübergang $(a, \sigma) \to (-a, \sigma)$ weder Anregungsspektrum noch S^z-Korrelationen verändern. Die Oszillation in der S^x-Korrelation gehen in einen komplizierteren, quadratischen Operator über. Da die hier messbaren Anregungsenergien nicht vom Vorzeichen der Systemparameter a und σ abhängen, wurde bei den folgenden numerischen Berechnungen $\sigma = 1$ gesetzt und $a > 0$ variiert. Für die Spektralparameter $\lambda_0 = \lambda_1 = \lambda_2 = 1$ ergeben sich damit tiefliegende Anregungen, die in Abbildung 8.1 gegen den Modellparameter a aufgetragen sind.

Für Werte von $a > 0$ besitzt das System eine endliche Anregungslücke, die mit den exponentiell abfallenden Grundzustandskorrelationen korrespondiert, und erfüllt damit das Szenario von Haldane. Für die Grenzwerte $a = 0$ und $a \to \infty$ wird das System kritisch, die Anregungslücke verschwindet. Am VBS-Punkt $a = a_T = 2$ verlagert sich die niedrigste Anregungslücke aus dem Unterraum mit $S_T^z = 1$ (Ast b in Abb. 8.1) für kleine a in den Unterraum mit $S_T^z = 0$ für große a (Ast a_1). Ebenfalls im Unterraum $S_T^z = 0$ wurde das Kreuzen zweier Energieniveaus (a_0 und a_1) bei einem Parameterwert $a = a_c = 1.4$ festgestellt. Die tiefste Anregung mit $S_T^z = 2$ verläuft für $a < a_c$ wie der Anregungsast (Ast a_0) mit $S_T^z = 0$, steigt für $a > a_c$ aber weiter monoton an (Ast c).

Eine analytische Variationsrechnung (Single-Mode-Approximation) konnte analog zu bekannten Rechnungen zum VBS-Modell den Anregungsast a_1 bei einem Impuls von $k = \pi$ quantitativ gut modellieren. Für den Bereich $a < a_c$ (Ast a_0) scheint eine quantitativ genaue Anregung bei halber Energie des betrachteten Variationszustands mit Impuls $k = 0$ zu liegen. Dem Verschwinden der Anregungslücke am kritischen Punkt $a = 0$ konnte jedoch mit $E \leq 2a^2 + O(a^3)$ eine obere Schranke gesetzt werden. Da man für den Unterraum mit $S^z = 1$ eine geringere Anregungsenergie erwartet, kann man die quadratische Ordnung auch als Obergrenze für diesen Ast annehmen.

Eine rechnerische Anpassung der numerischen Daten liefert in der Nähe des kritischen Punktes in den Unterräumen mit $S_T^z = 0$ und $S_T^z = 2$ ein Verschwinden der Anregungsenergie wie $\Delta \approx a^2$ und für den Unterraum $S_T^z = 1$ in

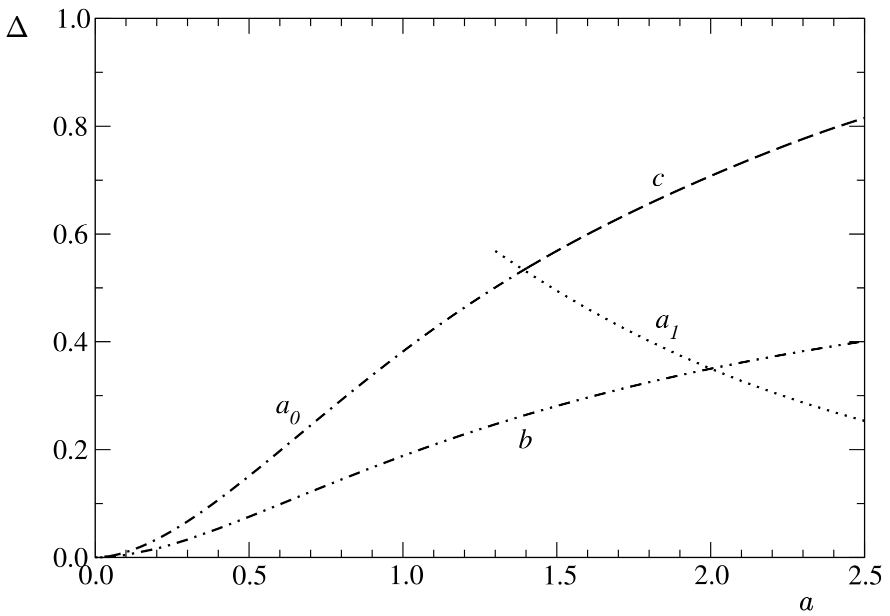


Abbildung 8.1: Tiefliegendes Anregungsspektrum aufgetragen gegen MPG-Parameter a. Dabei symbolisieren a_0 und a_1 niedrigste Anregungen mit $S_T^z = 0$, b die tiefste Anregung mit $S_T^z = 1$ und a_0 zusammen mit c die tiefste Anregung mit $S_T^z = 2$.

etwa den halben Wert $\Delta \approx \frac{1}{2}a^2$. Möglich ist hier, dass sich die Anregungen in $S_T^z = 0,2$ aus zwei Anregungen mit $S_T^z = 1$ zusammensetzen. Die numerischen Daten können einer analytischen Variationsrechnung als Anhaltspunkt dienen. Die recht glatten Vorfaktoren deuten daraufhin, dass sich Variationszustände finden lassen, die das numerisch gefundene Verhalten quantitativ bestätigen und den Charakter der jeweiligen Anregung illustrieren.

Über den Anregungsästen wurden mit den Mitteln der DMRG höher liegende Energieniveaus zu den Quantenzahlen $S_T^z = 0,1$ untersucht und eine asymptotische Entartung im thermodynamischen Limes beobachtet. Schließlich wurde der Einfluss einer Variation der Spektralparameter λ auf die Anregungsäste untersucht. Bei Konstanz der anderen λ-Parameter $(= 1)$ wurde jeweils ein Parameter auf $\lambda_i = 2$ angehoben. Die Parameter-Abhängigkeiten der Energieäste wurden qualitativ angegeben.

Die im Rahmen dieser Arbeit beobachteten Daten geben das Phasenverhalten der niedrigen Anregungen über dem Matrixprodukt-Grundzustand bei Variation der Systemparameter an. Während es teilweise gelungen ist, Anregungen durch Variationszustände gut zu approximieren, können die numerischen Resultate weiteren Variationsrechnungen als Motivation und Vergleichsmöglichkeit dienen.

8.4 Ausblick

Für die Dimer- und Trimerphase der BLBQ-Kette wurde eine Oszillation der gemessenen Energien in einer Periode von zwei bzw. drei Gitterplätzen beobachtet. Eine Variante des DMRG-Algorithmus könnte den Systemblock pro Iteration um zwei oder drei Plätze (statt um einen Platz) erhöhen, um ein besseres Nachbilden der Grundzustandsstruktur zu erreichen. Möglicherweise ist eine deutliche Verbesserung der Präzision in diesen beiden Phasen zu erzielen.

Das Spektrum der Spin-1-Ketten mit Matrixprodukt-Grundzustand bietet, wie bereits oben angedeutet, noch ein Feld für weitere Untersuchungen. Der exakte Grundzustand bietet die Möglichkeit, orthogonale Variationszustände zu konstruieren. Eine umfassende Untersuchung von Variationszuständen erscheint lohnenswert und steht für dieses Modell noch aus.

Numerisch lässt sich die Skalierung des Spektrums in Abhängigkeit der λ-Parameter detaillierter beschreiben. Außerdem besteht die Möglichkeit, die Randbedingungen zu variieren. Das isotrope VBS-Modell bei offenen Randbedingungen besitzt an den Rändern nach der gängigen Vorstellung zwei freie Spins mit $S = 1/2$, die für Entartungen und Rand-Anregungen verantwortlich sind. Für die isotrope Spin-1-Kette gibt es hierzu schon eine Reihe von Literatur. Wie sieht die Situation jedoch bei dem hier untersuchten – in der Regel anisotropen – MPG-Modell aus? Mit dem vorliegenden Programm können Randbedingungen variiert werden, um die Auswirkungen auf das Spektrum zu beobachten.

Von großem Interesse wäre eine Kenntnis der Impulsabhängigkeit des Anregungsspektrums. Die hier verwendete herkömmliche DMRG ist eine Methode im Ortsraum und ermöglicht keine Realisierung des Impulses als Quantenzahl.

Über Finite-size-Betrachtungen oder die numerische Methode der Impulsraum-DMRG, können eventuell Kenntnisse der Dispersion erzielt werden.

Thermodynamische Eigenschaften von Spinsystemen lassen sich mit der TMRG-Methode untersuchen. Hier iteriert man mit inverser Temperatur im thermodynamischen Limes. Statt Konvergenz in Abhängigkeit der Kettenlänge zu betrachten, nähert man sich dem Grenzwert $T = 0$. Lohnenswert könnte es hier sein, die Konvergenzeigenschaften beim Matrixprodukt-Grundzustand zu betrachten und zu untersuchen, ob auch hier die Matrixprodukt-Struktur gute Messwerte erlaubt.

Die vielfältigen Parameter des in dieser Arbeit entwickelten DMRG-Programms erlauben schließlich auch die Untersuchung einer Reihe weiterer Spin-Systeme – auch jenseits der Spin-1-Kette. Während große Bereiche der Spin-1-Kette bereits behandelt wurden, sind eine Reihe von Quantenspinsystemen noch nicht vollständig untersucht.

A Symmetrietransformationen der Spin-1-Kette

A.1 Spiegelsymmetrie um $a = 0$

Die unitäre Transformation $\mathcal{D}^{(3)}$ (3.20) bildet den Hamiltonian mit dem Superpositionsparameter a auf einen Hamiltonoperator mit dem Parameter $-a$ ab. Dieser Übergang soll im Folgenden gezeigt werden.

Die spektrale Darstellung des lokalen Hamiltonians basiert auf einer Basis aus Eigenzuständen $|\phi_n^\sigma>$ mit Superpositionsparameter a eines Systems aus zwei Gitterplätzen, wie in (3.11) bis (3.14) angegeben. Bezüglich seiner ausgewählten Eigenbasis ist der lokale Hamiltonian h aus (3.2)

$$\lambda_n^\sigma = \left\langle \phi_n^\sigma \middle| h \middle| \phi_n^\sigma \right\rangle \tag{A.1}$$

diagonal darstellbar. Wegen

$$\begin{aligned} \lambda_n^\sigma &= \left\langle \phi_n^\sigma \right| \underbrace{\mathcal{D}^{(3)\dagger} \mathcal{D}^{(3)}}_{\text{id}} h \underbrace{\mathcal{D}^{(3)\dagger} \mathcal{D}^{(3)}}_{\text{id}} \left| \phi_n^\sigma \right\rangle & \text{(A.2)} \\ &= \left\langle \tilde{\phi}_n^\sigma \middle| \tilde{h} \middle| \tilde{\phi}_n^\sigma \right\rangle & \text{(A.3)} \end{aligned}$$

besitzt der transformierte Hamiltonian $\tilde{h}$ das gleiche Spektrum wie h. Wie verhalten sich nun seine Basisvektoren $|\phi_n^\sigma>$ zur transformierten Basis $|\tilde{\phi}_n^\sigma>= \mathcal{D}^{(3)} \left|\phi_n^\sigma\right\rangle$?

Die Transformation $\mathcal{D}^{(3)}$ angewandt auf die nicht symmetrisierten Spinkonfigurationen zweier Gitterplätze

$$\begin{array}{lccl} \left|\pm\pm\right\rangle & \to & - & \left|\pm\pm\right\rangle \\ \left|\pm 0\right\rangle & \to & \mathrm{i} & \left|\pm 0\right\rangle \\ \left|0 \pm\right\rangle & \to & \mathrm{i} & \left|0 \pm\right\rangle \\ \left|+-\right\rangle & \to & - & \left|+-\right\rangle \\ \left|-+\right\rangle & \to & - & \left|-+\right\rangle \\ \left|00\right\rangle & \to & & \left|00\right\rangle \end{array} \tag{A.4}$$

liefert zur Identität nur je einen Phasenfaktor $\gamma = 1, \mathrm{i}$ oder -1 mit der Eigenschaft $\gamma^*\gamma = 1$. Geht man nun wieder über zur Basis $|\phi_n^\sigma>$, ist dieser Phasenfaktor für die Zustände in den disjunkten Unterräumen mit $S_T^z = \pm 1, \pm 2$

jeweils gleich. Bei der Erwartungswertbildung in (A.3) heben sich diese Phasenfaktoren auf. Ebenso verhält es sich bei dem antissymmetrischen Zustand $|\phi_0^-\rangle$. Auch hier sind die Phasenfaktoren der beimischenden Zustände gleich. Anderes gilt für die beiden symmetrischen Zuständen im Unterraum bei $S_T^z = 0$. Hier bewirkt der Vorzeichenunterschied zwischen dem Zustand $|00\rangle$ und den beiden Zuständen $|+-\rangle$ und $|-+\rangle$ eine Abbildung

$$\begin{aligned} \mathcal{D}^{(3)}|\phi_{01}^+\rangle_a &= -|\phi_{01}^+\rangle_{-a}\,, \\ \mathcal{D}^{(3)}|\phi_{02}^+\rangle_a &= -|\phi_{02}^+\rangle_{-a} \end{aligned} \tag{A.5}$$

auf eine Basis mit gespiegeltem Superpositionsparameter. Zusätzlich tritt ein Phasenfaktor auf, der aber „weggedreht“ werden kann.

Abgesehen von den Phasenfaktoren können wir also nun die neue Basis $|\tilde{\phi}_n^\sigma >$ als Basis der Form (3.11) bis (3.14) mit neuem $\tilde{a} = -a$ identifizieren. Der dazugehörige Hamiltonian gehört also ebenfalls zur Modellklasse (3.2) und hat das gleiche Spektrum wie der Ausgangshamiltonian h.

A.2 Symmetrie bezüglich σ

Wendet man die Transformation $\mathcal{D}^{(4)}$ auf die nicht symmetrisierten Spinkonfigurationen zweier Gitterplätze

$$\begin{array}{lcrl} |\pm\pm\rangle & \rightarrow & - & |\pm\pm\rangle \\ |\pm 0\rangle & \rightarrow & & |\pm 0\rangle \\ |0\pm\rangle & \rightarrow & - & |0\pm\rangle \\ |+-\rangle & \rightarrow & - & |+-\rangle \\ |-+\rangle & \rightarrow & - & |-+\rangle \\ |00\rangle & \rightarrow & & |00\rangle \end{array} \tag{A.6}$$

an, liefert auch sie zur Identität wieder nur je einen Phasenfaktor. Im Raum der (anti-)symmetrisierten Zustände leistet sie damit die Übergänge:

$$\begin{array}{lcrl} |\phi_{\pm 2}\rangle & \rightarrow & - & |\phi_{\pm 2}\rangle \\ |\phi_{\pm 1}^+\rangle & \rightarrow & & |\phi_{\pm 1}^-\rangle \\ |\phi_{\pm 1}^-\rangle & \rightarrow & & |\phi_{\pm 1}^+\rangle \\ |\phi_{01}^+\rangle_a & \rightarrow & - & |\phi_{01}^+\rangle_{-a} \\ |\phi_{02}^+\rangle_a & \rightarrow & - & |\phi_{02}^+\rangle_{-a} \\ |\phi_0^-\rangle & \rightarrow & - & |\phi_0^-\rangle \end{array} \tag{A.7}$$

Die unitäre Transformation $\mathcal{D}^{(4)}$ bildet also auf ein System mit a auf ein System mit dem Superpositionsparameter $-a$ ab. Zusätzlich werden symmetrische und antisymmetrische Zustände in den Unterräumen mit $S_T^z = -1, 1$ vertauscht. Für den MPG-Parameter σ stellt dies einen Übergang $\sigma \rightarrow -\sigma$ dar.

B Die Single-Mode-Approximation für den Matrixprodukt-Grundzustand

B.1 Statischer Strukturfaktor

Der statische Strukturfaktor (7.17) des Matrixprodukt-Grundzustands

$$
\begin{aligned}
S_k &= \langle \psi_k | \psi_k \rangle \\
&= \lim_{L\to\infty} \frac{1}{L}\frac{1}{Z} \langle \sum_{j'=1}^{L} \mathrm{e}^{\mathrm{i}kj'} S^z_{j'} \psi_0 | \sum_{j=1}^{L} \mathrm{e}^{\mathrm{i}kj} S^z_j \psi_0 \rangle \\
&= \sum_{j=1}^{\infty} \mathrm{e}^{\mathrm{i}k(j-1)} \frac{1}{Z} \langle \psi_0 | S^z_1 S^z_j | \psi_0 \rangle \quad \text{(wg. Translationsinvarianz)}
\end{aligned}
\tag{B.1}
$$

lässt sich als fouriertransformierte Korrelationsfunktion interpretieren. Durch einen Wechsel der Gitterplatzindices

$$
j = 1 \ldots \infty \quad \to \quad j = -\infty \cdots + \infty \tag{B.2}
$$

lässt sich die Paritätserhaltung ausnutzen, so dass die Summe in

$$
S_k = \frac{1}{Z} \langle \psi_0 | S^z_0 S^z_0 | \psi_0 \rangle + \sum_{j=1}^{\infty} \left(\mathrm{e}^{\mathrm{i}kj} + \mathrm{e}^{-\mathrm{i}kj} \right) \frac{1}{Z} \langle \psi_0 | S^z_0 S^z_j | \psi_0 \rangle \tag{B.3}
$$

nur über positive Gitterplätze ausgeführt werden muss. In Abschnitt 4.4 sind die Korrelationsfunktionen für die unendliche Kette angegeben.

Mit diesen Ausdrücken ist es möglich (B.3) in geschlossener Form

$$
\begin{aligned}
S_k &= \frac{|a|}{1+|a|} - \frac{a^2}{(1-|a|)^2} \left(\frac{1-|a|}{1+|a|} \right) \sum_{j=1}^{\infty} 2 \left(\frac{1-|a|}{1+|a|} \right)^j \cos kj \\
&= \frac{|a|}{1+|a|} - 2\frac{a^2}{1-a^2} \left(\frac{1 - \frac{1-|a|}{1+|a|}\cos k}{1 - 2\frac{1-|a|}{1+|a|}\cos k + \left(\frac{1-|a|}{1+|a|}\right)^2} - 1 \right) \\
&= \frac{|a|\,(1-\cos k)}{1 + a^2 - \cos k + a^2 \cos k}.
\end{aligned}
\tag{B.4}
$$

darzustellen.

Wir erhalten schließlich eine analytische Form

$$S_k = \frac{|a|\,(1-\cos k)}{1+a^2+(a^2-1)\cos k} \tag{B.5}$$

für den statischen Strukturfaktor des MPA-Modells. Im speziellen Fall $a = 2$ (VBS-Modell) ergibt sich

$$S_k^{\mathrm{VBS}} = \frac{2(1-\cos k)}{5+3\cos k} \tag{B.6}$$

in Übereinstimmung mit [53].

B.2 Oszillationsstärke

Über die Transfermatrix-Methode lässt sich die zweite wichtige Größe zur Berechung der SMA-Anregungsenergie, die Oszillationsstärke

$$\begin{aligned} F_k &= \langle \psi_k | H | \psi_k \rangle \\ &= \sum_j \langle \psi_k | h_{j,j+1} | \psi_k \rangle \end{aligned} \tag{B.7}$$

aus (7.18), bestimmen. Zunächst soll eine endliche Kette der Länge L betrachtet werden. Die Translationsinvarianz der periodisch geschlossenen Kette erlaubt es, nur den Hamiltonian $h_{1,2}$ für zwei benachbarte Gitterplätze zu betrachten. So vereinfacht stellt sich F_k nun als

$$F_k = \frac{1}{Z}\langle \psi_0 | \left(\sum\nolimits_{j'} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}kj'} S^z_{j'}\right) \, h_{1,2} \, \left(\sum\nolimits_j \mathrm{e}^{\mathrm{i}kj} S^z_j\right) | \psi_0 \rangle \tag{B.8}$$

$$= \frac{1}{Z}\langle \psi_0 | \left(S^z_1 + \mathrm{e}^{-\mathrm{i}k} S^z_2\right) \, h_{1,2} \, \left(S^z_1 + \mathrm{e}^{\mathrm{i}k} S^z_2\right) | \psi_0 \rangle \tag{B.9}$$

dar. Der lokale Hamiltonian wirkt nur auf die ersten beiden Gitterplätze. Für Gitterplätze $n \geq 3$ vertauscht S^z_n mit $h_{1,2}$. Der entsprechende Erwartungswert verschwindet in diesem Fall, da $|\psi_0\rangle$ Grundzustand zum lokalen Hamiltonoperator ist.

In (B.9) wird klar, dass F_k als Erwartungswert des Grundzustands $|\psi_0\rangle$ aufgefasst werden kann. Seine Matrixproduktstruktur gestattet,

$$F_k = \frac{1}{Z} \operatorname{tr} \, T^{L-2} \, T(h_{1,2}) \tag{B.10}$$

mit der assoziierten Transfermatrix

$$T(h_{1,2}) := \left\langle \left(S^z_1 + \mathrm{e}^{\mathrm{i}k} S^z_2\right) m_1 m_2 \right| h_{1,2} \left| \left(S^z_1 + \mathrm{e}^{\mathrm{i}k} S^z_2\right) m_1 m_2 \right\rangle \tag{B.11}$$

nach Abschnitt (4.4) als Spur über Transfermatizen darzustellen. Es seien die Zustandsmatrizen

$$\left(S_1^z + \mathrm{e}^{\mathrm{i}k} S_2^z\right) m_1 m_2 =$$

$$\begin{pmatrix} a\left(\mathrm{e}^{\mathrm{i}k}-1\right)\big|+-\big\rangle & \sqrt{a}\left(\sigma\big|+0\big\rangle - \mathrm{e}^{\mathrm{i}k}\big|0+\big\rangle\right) \\ -\sqrt{a}\left(\big|-0\big\rangle - \sigma\mathrm{e}^{\mathrm{i}k}\big|0-\big\rangle\right) & a\left(1-\mathrm{e}^{\mathrm{i}k}\right)\big|-+\big\rangle \end{pmatrix} \tag{B.12}$$

und

$$h_{1,2}\left(S_1^z + \mathrm{e}^{\mathrm{i}k} S_2^z\right) m_1 m_2 =$$

$$\begin{pmatrix} \lambda_0 \frac{a}{\sqrt{2+a^2}}\left(\mathrm{e}^{\mathrm{i}k}-1\right)\big|\phi_{01}^+\big\rangle & \lambda_1\sqrt{\frac{a}{2}}\sigma\left(1-\mathrm{e}^{\mathrm{i}k}\right)\big|\phi_1^\sigma\big\rangle \\ \lambda_1\sqrt{\frac{a}{2}}\left(1-\mathrm{e}^{\mathrm{i}k}\right)\big|\phi_{-1}^\sigma\big\rangle & \lambda_0\frac{a}{\sqrt{2+a^2}}\left(\mathrm{e}^{\mathrm{i}k}-1\right)\big|\phi_{01}^+\big\rangle \end{pmatrix} \tag{B.13}$$

mit den normierten Eigenzuständen aus (3.11) bis (3.14) gegeben. Dann ist

$$T(h_{1,2}) = (1-\cos k)\begin{bmatrix} c_1 & c_2 & 0 & 0 \\ c_2 & c_1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -c_1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -c_1 \end{bmatrix} \tag{B.14}$$

mit den Konstanten

$$\begin{aligned} c_1 &:= \lambda_0 \frac{2a^2}{2+a^2} \\ c_2 &:= \lambda_1\,|a|\,. \end{aligned} \tag{B.15}$$

Für die Spurbildung werden die Erwartungswerte

$$\Gamma_0 = (c_1+c_2)(1-\cos k) \tag{B.16}$$
$$\Gamma_1 = (c_1-c_2)(1-\cos k) \tag{B.17}$$
$$\Gamma_2 = c_1(\cos k - 1) \tag{B.18}$$
$$\Gamma_3 = c_1(\cos k - 1), \tag{B.19}$$

wobei

$$\Gamma_n := \big\langle u_n\big|\, T(h_{1,2})\,\big|u_n\big\rangle, \tag{B.20}$$

zu den Eigenvektoren $\big|u_n\big\rangle$ der Transfermatrix aus (4.4) herangezogen.

Damit ist die Oszillationsstärke

$$F_k = \left[(c_1+c_2)(1+|a|)^{N-2} + (c_1-c_2)(1-|a|)^{N-2} - 2c_1\right](1-\cos k) \tag{B.21}$$

in nicht-normierter Form. Mit der Normierung aus Gleichung (4.31) hat die endliche Kette die Oszillationsstärke

$$F_k = \frac{(c_1+c_2)(1+|a|)^{N-2} + (c_1-c_2)(1-|a|)^{N-2} - 2c_1}{(1+|a|)^N + (1-|a|)^N + 2}(1-\cos k) \tag{B.22}$$

und die unendliche Kette

$$
\begin{aligned}
F_k &= \frac{(c_1 + c_2)}{(1 + |a|)^2} \, (1 - \cos k) \\
&= \frac{\lambda_0 \frac{2a^2}{2+a^2} + \lambda_1 \, |a|}{(1 + |a|)^2} \, (1 - \cos k).
\end{aligned}
\tag{B.23}
$$

Auch hier stimmt die Oszillationsstärke des VBS-Modells

$$
F_k^{\mathrm{VBS}} = \frac{10}{27} \, (1 - \cos k) \tag{B.24}
$$

mit der Literatur [53] überein.

C Verwendete DMRG-Implementation

C.1 Beschreibung des Programms

Unter Benutzung der numerischen Methode der *Dichtematrix-Renormierungsgruppe* ist im Rahmen der vorliegenden Arbeit ein Programm entwickelt worden, das niedrigliegende Energien und Erwartungswerte von Spinketten berechnet. Neben der Kettenlänge L kann auch die Spingröße S frei gewählt werden. Der Hamiltonian kann beliebige Terme unterschiedlicher Reichweite umfassen. Wir setzen allerdings eine S_T^z-Erhaltung und Spiegelsysmmetrie voraus. Randbedingungen können durch zusätzliche Spins und Randfelder modelliert werden.

Bei der Programmierung der DMRG-Methode wurden sowohl prozedurale als auch objektorientierte Elemente verwendet. DMRG-Objekte wie System- und Superblock wurden mit ihren Methoden als C++-Klassen realisiert. Die durchstruktiere Programmierung ermöglicht effektive Fehleranalysen und leichte Modifizierbarkeit. Unser Programm nutzt die Erhaltung der guten Quantenzahl S_T^z zur Verkleinerung des Hilbertraumes. Dadurch wird der Speicherbedarf gegenüber einer naiven Herangehensweise drastisch verringert.

C.2 Programmparameter

Die Systemparameter werden dem Programm in einer Initialisierungsdatei übergeben. Variablen sind:

- *Spin S*
  Die Spingröße in der Kette kann frei gewählt werden $(1/2, 1, 3/2, 2, \dots)$.

- *Kettenlänge L*
  Die Länge der untersuchten Kette kann frei gewählt werden. Allerdings muss die Anzahl der Gitterpunkte gerade sein.

- *Bulk-Hamiltonian*
  Der Hamiltonian der inneren Gitterplätze (Bulk-Hamiltonian) umfasst abgesehen den Randbedingungen sämtliche Wechselwirkungen der Spinkette. Er wird dargestellt als Summe über eine beliebige Anzahl von Termen der Form
  $$J \sum_j A_j A_{j+n},$$
  wobei der Operator A aus den Spinoperatoren $S^x, \mathrm{i}S^y$ und S^z zusammengesetzt werden kann. J ist die Kopplungskonstante. Der Index n gibt

die Reichweite der Wechselwirkung an. Diese Darstellung beinhaltet also Nächste-Nachbarn-Wechselwirkung ($n = 1$) und Wechselwirkung zwischen weiteren Nachbarn ($n > 1$). Auch Single-Ion-Terme ($J \sum_j A_j$) sind möglich.

- *Randfelder*
  Um Randbedingungen zu modellieren, können zusätzliche Single-Ion-Terme auf die äußeren Spins (1 und L) wirken.

- *Zusätzliche Gitterplätze*
  Bei endlichen Ketten können Finite-size-Effekte auftreten. Um diese gering zu halten, haben wir die Möglichkeit einbezogen, an den Ränder zusätzliche Gitterplätze (0 und $L+1$) einzurichten. Hier kann die Spingröße, ein eventueller Single-Ion-Term und die Wechselwirkung mit den Gitterplätze 1 bzw. L frei gewählt werden.

- *Gesamtspin in z-Richtung*
  Das Programm ist für Systeme entworfen, in denen die z-Komponente des Gesamtspins S_T^z eine Erhaltungsgröße ist. Die Untersuchung wird durch den Parameter S_T^z auf einen Unterraum beschränkt.

- *Anzahl der Zustände im Block*
  Als DMRG-typischer Parameter beschreibt m die Anzahl der Zustände, auf die der Systemblock nach der Renormierungsprozedur verkürzt wird. m ist ein Maß für die Güte der Berechnungen.

- *Zentrale Mittelwerte*
  Für eine beliebige Anzahl Operatoren kann der Erwartungswert in der Mitte der Kette $\langle A_{L/2} \rangle, \langle B_{L/2} \rangle, \ldots$ berechnet werden.

- *Korrelationen*
  Fur ein festgelegtes Paar von Gitterplätzen i und $L-i$, wobei $i \leq L/2$ beliebig kann eine beliebige Zahl von Korrelationen $\langle A_j A_{L-j} \rangle, \langle B_j B_{L-j} \rangle, \ldots$ berechnet werden.

- *Energie-Eigenwerte*
  Die Anzahl der zu berechnenden Energie-Eigenwerten ist ein Parameter. Die dazugehörigen Eigenvektoren werden bei der Dichtematrix-Bildung und bei der Berchnung der Korrelationen und Erwartungswerte verwendet.

- *Periodische Randbedingungen*
  Während die Standardmethode mit offenen Rändern arbeitet, lassen sich optional periodische Randbedingungen wählen.

Die vom Programm verstandenen Parameter sind in Tabelle C.1 zusammengefasst.

`S`	Spingröße S
`L`	Kettenlänge L
`H, H+`	Bulk-Hamiltonian
`Hss`	Single-Ion-Term
`periodic`	periodische Randbedingungen
`Sadd`	Spingröße von zusätzlichen Randspins
`Hadd`	Wechselwirkung mit zusätzlichen Randspins
`Haddss`	Single-Ion-Term von zusätzlichen Randspins
`Hbf`	Single-Ion-Term auf äußere Spins
`Szges`	Gesamtspin in z-Richtung S_T^z
`m`	Anzahl der mitgenommenen Zustände
`nev`	Anzahl der berechneten Energie-Eingenwerte und -vektoren
`cenavg`	Zentrale Mittelwerte
`corrsite`	Korrelations-Gitterplatz
`corr`	Korrelationsoperatoren

Tabelle C.1: Parameter in der Initialisierungsdatei

C.3 Die Hauptroutine

Der Ablauf des DMRG-Algorithmus ist schematisch bereits in Kapitel 5.4 skizziert. Er spiegelt sich in der in Abbildung C.1 dargestellten Hauptroutine des DMRG-Programms wider. Die einzelnen Schritte sollen hier näher beschrieben werden.

1. *Initialisierung* Eine Instanz der Klasse `InitialValues` wird erzeugt. Ein als Elementfunktion realisierter Parser liest die DMRG-Parameter aus einer Initialisierungsdatei ein.

2. *Bilden der Startblöcke* Zwei Instanzen der Klasse `Block` werden realisiert. Mit den Daten der `InitialValues`-Klasse werden die beiden Blöcke als Systemblock und Single-site initialisiert.

3. *Starten der Schleife* Die nun folgenden Anweisungen werden solange wiederholt, bis die Länge des Systemblocks $L/2$ überschreitet.

4. *Neuer Systemblock* Ein neuer Systemblock wird aus dem alten Systemblock und dem Single-site-Block per Tensorprodukt gebildet. Im Programm ist dieses Tensorprodukt als Konstruktor der Klasse `Block` realisiert. Informationen zur neuen Basis und alle Operatoren des Systemblocks werden neu erstellt. Der alte Systemblock wird gelöscht.

5. *Bilden des Superblocks* Für die Dauer der Schleife wird eine Instanz der Klasse `SuperBlock` aufgerufen und mit den Daten des Systemblocks und den DMRG-Parametern initialisiert.

6. *Berechnung der Energien und Erwartungswerte* Zwei Elementfunktionen der `SuperBlock`-Klasse berechnen die *nev* niedrigsten Eigenwerte und -zustände bzw. die Erwartungswerte und Korrelationen.

```
int main( int argc, char *argv [] ){

   string   initfile :=argv [ 1 ];
    InitialValues   start ;
   start . readfile (   initfile   );

  Block* oldblock;
  oldblock=new Block( start, 'B' );
  Block*  singlesite ;
   singlesite =new Block( start, 'S' );
  Block* systemblock;

  bool loop=true;

  while( loop ){

    systemblock=new Block( *oldblock, *singlesite ,  start  );
    delete oldblock;

    SuperBlock supblock( systemblock, &start  );

    supblock.find_LowStates();
    supblock. find_ExpectationValues ();

    supblock.get_TransformMatrix();

    systemblock->change_Basis( supblock.TransfMat );

    // -- create output

    oldblock=systemblock;
    if ( systemblock->get_length()>= (start.get_L() / 2) )
      loop=false;
  }

  delete oldblock;
  delete  singlesite ;

}
```

Abbildung C.1: Die Hauptroutine in C++-Code

7. *Konstruktion der Transformationsmatrix* Die reduzierte Dichtematrix wird aus der berechneten Wellenfunktion gebildet und vollständig diagonalisiert. Die zur Renormierung benötigte Transformationsmatrix wird aus den m höchsten Eigenvektoren der Dichtematrix erstellt und als Elementobjekt der `SuperBlock`-Klasse zur Verfügung gestellt.

8. *Renormierung* Eine Elementfunktion der `Block`-Klasse nimmt unter Kenntnis der Transformationsmatrix den Basiswechsel im Systemblock vor und reduziert damit seine Dimension auf die Größe m. Dazu gehört die Transformation der Elementoperatoren des Systemblocks.

9. *Abfragen der Laufbedingung* Solange der Systemblock die Länge $L/2$ noch nicht erreicht hat, erfolgt Rücksprung zu Punkt 4. Sonst wird die Hauptschleife verlassen und das Programm beendet.

Die einzelnen Schritte des Algorithmus sind jeweils als Elementfunktionen der verschiedenen Objekte implementiert. Diese Idee wurde bereits in [54] von Noack und White vorgeschlagen und von M. Dudzinski und mir für Spinketten-Hamiltonians realisiert.

C.4 Objektklassen

Die objektorientierte Programmierung erlaubt es, die Abstraktionseinheiten des DMRG-Algorithmus im Sprachkonstrukt Objektklasse zu realisieren. Beispielsweise ist es sinnvoll, eine Klasse „Matrix" zu konstruieren und alle gängigen Manipulationen (wie z.B. Matrix-Multiplikation, Matrix-Addition, Diagonalisierung) als Elementfunktionen einzubinden. Der Benutzer der Objektklasse benötigt folglich zur Verwendung der Objekte und ihrer Elementfunktionen keine Kenntnis über deren programmiertechnische Implementierung. Somit erhält man die Möglichkeit auf einer höheren Abstraktionsebene zu programmieren. Dies erleichtert die Lesbarkeit des Programmcodes, gestattet Speicherzuweisung während der Programmlaufzeit und erlaubt das problemlose Abändern von Elementfunktionen. Nachteil der objektorientierten Programmierung ist ein in der Regel etwas höherer Speicherbedarf, der sich durch die Realisierung der Objektkonstrukte ergibt.

Aus diesen Gründen wurde das Programm weitgehend objektorientiert implementiert. Teile des Programms, die signifikanten Einfluss auf die Laufzeit haben, wie die Matrixdiagonalisierung, wurden aus optimierten Programmbibliotheken eingebunden.

Für den interessierten Leser sollen zum Schluss die Elementfunktionen dreier wichtiger Objektklassen angegeben werden. Die Klasse `InitialValues` (Tabelle C.2) gestattet das Einlesen und Analysieren (*Parsen*) der Initialisierungsdatei. Anschließend stellt sie über Elementfunktionen die Systemparameter als Variablen zur Verfügung. Die DMRG-spezifischen Block-Manipulationen sind in den Klassen `Block` (Tab. C.3) und `SuperBlock` (Tab. C.4) realisiert. Typische Manipulationen für die `Block`-Klasse, die das DMRG-Konstrukt „Block" implementiert, sind das tensorielle Verknüpfen von zwei Blöcken zu einem neuen und der durch die reduzierte Dichtematrix vermittelte Basiswechsel. Die Klasse

`SuperBlock` beinhaltet Elementfunktionen, wie das Ermitteln der niedrigsten Energien durch Lanczos-Diagonalisierung oder das Aufstellen der reduzierten Dichtematrix.

InitialValues	
no public variables	
InitialValues()	*constructor*
print()	*print parameters of studied modell*
readfile(string)	*read initialisation data*
return parameters of studied modell:	
get_L()	*length of chain*
bulk Hamiltonian:	
get_HS(spin)	*spin size*
ex_periodic()	*periodic boundary conditions?*
ex_Hss()	*single site term?*
get_Hss()	*single site operator*
get_HNterms()	*number of terms*
get_Hrange()	*max. range of interaction*
get_HNops()	*number of operators*
get_Hopnr(int)	*number of operator*
get_Hdist(int)	*range of interaction*
get_Hcoeff(int)	*coefficent of term*
get_Hop(int)	*operator*
boundary fields at 1, L:	
ex_Hbf()	*boundary fields?*
get_Hbf()	*boundary field operator*
additional spins S' at 0, L+1:	
ex_add()	*additional sites?*
get_addS()	*size of add. spins*
ex_addss()	*additional single site term?*
get_addss()	*additional single site operator*
get_addNterms()	*nr. of interaction terms with add. sites*
get_addcoeff(int)	*coefficients*
get_add1op(int)	*operator on site 1*
get_add0op(int)	*operator on site 0*
single site averages at L/2, ground state:	
get_cenavN()	*number of operators*
get_cenavop(int)	*operator*
correlation functions, ground state:	
get_corrN()	*number of operators*
get_corrsite()	*site of correlation measurement*
get_corrop(int)	*operator*
DMRG parameters:	
get_Sztot()	$S_t^z otal$
get_Nev()	*number of eigenvalues to be found*
get_m()	*number of states kept*

Tabelle C.2: Objektklasse `InitialValues`

Block	
int: length	*nr of sites in block*
BlockBasis*: basis	*pointer to block's basis*
vector< vector< SparseOperator* > >: HOp	*array of site operators*
SparseOperator*: H	*block hamiltonian*
vector< SparseOperator* >: borderOp	*boundary field operators*
vector< SparseOperator* >: corrOp	*correlation operators*
vector< SparseOperator* >: avgOp	*operator to be measured*
Block(const InitialValues&, char)	*make startblock*
Block(const Block&, const Block&, const InitialValues&)	*build new block from old block and site*
~Block()	*destructor*
change_Basis(const SparseOperator&)	*make change of basis*
get_length()	*length of block*
get_nrofstates()	*current number of states in block*
operator<<(ostream&, const Block&)	*print block data*

Tabelle C.3: Objektklasse `Block`

SuperBlock	
SparseOperator: TransfMat	*transfer matrix*
SuperBlock(const Block* , const Initial-Values*)	*constructor*
~SuperBlock()	*destructor*
print()	*print superblock data*
find_LowStates()	*find ground and first excited states*
find_ExpectationValues()	*calculate expection values*
get_TransformMatrix()	*make transformation matrix used for change of systemblock basis*
get_HamiltonMatrix()	*show superblock hamiltonian as a matrix*
get_truncationerror()	*truncation error*
get_eigenvaluesN()	*number of eigenvalues*
get_eigenvalue(int)	*eigenvalue*
single site averages at L/2, ground state:	
get_cenavN()	*expectation value*
get_cenav(int)	*operator*
correlation functions, ground state:	
get_corrN()	*number of operators*
get_corr(int)	*correlation value*

Tabelle C.4: Ojektklasse `SuperBlock`

Literaturverzeichnis

[1] Heisenberg, W.: *Zur Theorie des Ferromagnetismus.* Z. Phys. **49**, Seite 619, 1928.

[2] Mermin, D. und H. Wagner: *Absence of Ferromagnetism or Antiferromagnetism in One- or Two-Dimensional Isotropic Heisenberg Models.* Phys. Rev. Lett. **17**, Seite 1133, 1966.

[3] Haldane, F.D.M.: *Continuum Dynamics of the 1-D Heisenberg Antiferromagnet: Identification with the O(3) Nonlinear Sigma Model.* Phys. Lett. **93A**, Seite 464, 1983.

[4] Haldane, F.D.M.: *Nonlinear Field Theory of Large-Spin Heisenberg Antiferromagnets: Semiclassically Quantized Solitons of the One-Dimensional Easy-Axis Néel State.* Phys. Rev. Lett. **50**, Seite 1153, 1983.

[5] Bethe, H.: *Zur Theorie der Metalle: Eigenwerte und Eigenfunktionen der linearen Atomkette.* Z. Phys. **71**, Seite 205, 1931.

[6] Katsumata, K., H. Hori, T. Takeuchi, M. Date, A. Yamagishi und J. P. Renard: *Magnetization process of an $S = 1$ linear-chain Heisenberg antiferromagnet.* Phys. Rev. Lett. **63**, Seite 86, 1989.

[7] Buyers, W. J. L, R. M. Morra, R. L. Armstrong, M. J. Hogan, P. Gerlach und K. Hirakawa: *Experimental evidence for the Haldane gap in a spin-1 nearly isotropic, antiferromagnetic chain.* Phys. Rev. Lett. **56**, Seite 371, 1986.

[8] Mutka, H., J. L. Soubeyroux, G. Bourleaux und P. Colombet: *Support for the Haldane conjecture: Gap for magnetic excitations in the quasi-one-dimensional S=1 Heisenberg antiferromagnet* $AgVP_2S_6$. Phys. Rev. **B 39**, Seite 4820, 1989.

[9] Renard, J. P. und others: *Quantum energy gap in two quasi-one-dimensional S=1 Heisenberg antiferromagnets.* J. Appl. Phys. **63**, Seite 3538, 1988.

[10] Darriet, J. und L. P. Regnault: *The compound* Y_2BaNiO_5*: A new example of a Haldane gap in a $S = 1$ magnetic chain.* Solid State Commun. **86**, Seite 409, 1993.

[11] DiTusa, J. F. und others: *One-dimensional spin fluctuations in a transition metal oxide.* Physica B **194-196**, Seite 181, 1994.

[12] FREITAG, W.-D.: *Anregungen der Spin 1 Valence-Bond-Solid-Kette.* Doktorarbeit, Institut für Theoretische Physik, Universität zu Köln, 1993.

[13] ASCHAUER, H. und U. SCHOLLWÖCK: *Absence of string order in the anisotropic $S = 2$ Heisenberg antiferromagnet.* Phys. Rev. **B 58**, Seite 359, 1998.

[14] NIJS, M. DEN und K. ROMMELSE: *Preroughening transitions in crystal surfaces and valence-bond phases in quantum spin chains.* Phys. Rev. **B 40**, Seite 4709, 1989.

[15] SCHULZ, H. J. und T. ZIMAN: *Finite-length calculations of eta and phase diagrams of quantum spin chains.* Phys. Rev. **B 33**, Seite 6545, 1986.

[16] YAJIMA, M. und M. TAKAHASHI: *Correlation Functions of Spin-1 XXZ Chain in a Magnetic Field.* J. Phys. Soc. Jpn. **63**, Seite 3634, 1994.

[17] KITAZAWA, A., K. NOMURA und K. OKAMOTO: *Phase Diagram of $S = 1$ Bond-Alternating XXZ Chains.* Phys. Rev. Lett. **76**, Seite 4038, 1996.

[18] SCHULZ, H. J.: *Phase diagrams and correlation exponents for quantum spin chains of arbitrary spin quantum number.* Phys. Rev. **B 34**, Seite 6372, 1986.

[19] AFFLECK, I., T. KENNEDY, E. H. LIEB und T. TASAKI: *Rigorous results on valence-bond ground states in antiferromagnets.* Phys. Rev. Lett. **59**, Seite 799, 1987.

[20] UIMIN, G. V.: *One-dimensional problem for $S = 1$ with modified antiferromagnetic hamiltonian.* JETP Lett. 12, Seite 225, 1976.

[21] LAI, C. K.: *Lattice gas with nearest-neighbor interaction in one dimension with arbitrary statistics.* J. Math. Phys. **15**, Seite 1675, 1974.

[22] SUTHERLAND, B.: *Model for a multicomponent quantum system.* Phys. Rev. **B 12**, Seite 3795, 1975.

[23] KLÜMPER, A.: *New results for q-State Vertex Models and the Pure Biquadratic Spin-1 Hamiltonian.* Europhys. Lett. **9**, Seite 815, 1989.

[24] KLÜMPER, A.: *The spectra of q-state vertex models and related antiferromagnetic quantum spin chains.* J. Phys. **A 23**, Seite 809, 1990.

[25] KLÜMPER, A.: *Investigation of excitation spectra of exactly solvable models using inversion relations.* Int. J. Mod. Phys. **B 4**, Seite 871, 1990.

[26] BARBER, M. N. und M. T. BATCHELOR: *Spectrum of the biquadratic spin-1 antiferromagnetic chain.* Phys. Rev. **B 40**, Seite 4621, 1989.

[27] TAKHTAJAN, L. A.: *The picture of low-lying excitations in the isotropic Heisenberg chain of arbitrary spins.* Phys. Lett. **87A**, Seite 479, 1982.

[28] BABUJIAN, H. M.: *Exact Solution of the One-Dimensional Isotropic Heisenberg Chain with Arbitrary Spin S*. Phys. Lett. **90A**, Seite 479, 1982.

[29] MILLET, P., F. MILA, F. C. ZHANG, M. MAMBRINI, A. B. VAN OOSTEN, V. A. PASHCHENKO, A. SULPICE und A. STEPANOV: *Biquadratic Interactions and Spin-Peierls Transition in the Spin-1 Chain* $LiVGe_2O_6$. Phys. Rev. Lett. **83**, Seite 4176, 1999.

[30] MILA, F. und F. C. ZHANG: *On the origin of biquadratic exchange in spin 1 chains*. Eur. Phys. J. **B 16**, 2000.

[31] PESCHEL, I., W. WANG, M. KAULKE und K. HALLBERG (Herausgeber): *Density Matrix Renormalisation. A New Numerical Method in Physics*, Band 528 der Reihe *Lecture Notes in Physics*. Springer, Berlin, 1998.

[32] J.ZITTARTZ: *APG-groundstates for anisotropic Spin-1 chains*. Unveröffentlichte Rechnung.

[33] KLÜMPER, A., A. SCHADSCHNEIDER und J. ZITTARTZ: *Matrix Produkt Ground States for One-Dimensional Spin-1 Quantum Antiferromagnets*. Europhys. Lett. **24**, Seiten 293–297, 1993.

[34] BOER, J. DE und A. SCHADSCHNEIDER: *Exact Ground States of Generalized Hubbard Models*. Phys. Rev. Lett. **75**, Seite 4298, 1995.

[35] NIGGEMANN, H.: *Exact ground states for one- and two-dimensional quantum spin systems*. Doktorarbeit, Institut für Theoretische Physik, Universität zu Köln, 1998.

[36] AHRENS, M. A.: *Exakte Grundzustände der Spin-2-Kette*. Diplomarbeit, Institut für Theoretische Physik, Universität zu Köln, 2001.

[37] HALLBERG, K.: *Density-matrix algorithm for the calculation of dynamical properties of low-dimensional systems*. Phys. Rev. **B 52**, 1995.

[38] WANG, X. und T. XIANG: *Transfer-matrix density-matrix renormalization-group theory for thermodynamics of one-dimensional quantum systems*. Phys. Rev. **B 56**, Seite 5061, 1997.

[39] WHITE, S. R.: *Density matrix formulation for quantum renormalization groups*. Phys. Rev. Lett. **69**, Seite 2863, 1992.

[40] WILSON, K. G.: *The renormalization group: Critical phenomena and the Kondo problem*. Rev. Mod. Phys. **47**, Seite 773, 1976.

[41] KEMPER, A.: *Dichtematrix-Renormierungsgruppe für zweidimensionale klassische Modelle der statistischen Mechanik*. Diplomarbeit, Institut für Theoretische Physik, Universität zu Köln, 2000.

[42] LANCZOS, C. *J. Res. Natl. Bur. Stand.* **45**, Seite 225, 1950.

[43] WHITE, S. R.: *Density-matrix algorithms for quantum renormalization groups*. Phys. Rev. **B 48**, Seite 10345, 1993.

[44] DAVIDSON, E. R. *J. Comp. Phys.* **17**, Seite 87, 1975.

[45] SCHADSCHNEIDER, A. und J. ZITTARTZ: *Variational study of isotropic spin-1 chains using matrix-product states.* Ann. Physik**4**, Seite 157, 1995.

[46] ÖSTLUND, S. und S. ROMMER: *Thermodynamic Limit of Density Matrix Renormalization.* Phys. Rev. Lett. **75**, Seite 3537, 1995.

[47] WHITE, S. R. und D. A. HUSE: *Numerical renormalization-group study of low-lying eigenstates of the antiferromagnetic S=1 Heisenberg chain.* Phys. Rev. B **48**, Seite 3844, 1993.

[48] SCHOLLWÖCK, U., TH. JOLICOEUR und T. GAREL: *Onset of incommensurability at the valence-bond-solid point in the* $S = 1$ *quantum spin chain.* Phys. Rev. **B 53**, Seite 3304, 1996.

[49] FÁTH, G. und J. SÓLYOM: *Period tripling in the bilinear-biquadratic antiferromagnetic* $S = 1$ *chain.* Phys. Rev. **B 44**, Seite 11836, 1991.

[50] FÁTH, G. und J. SÓLYOM: *Isotropic spin-1 chain with twisted boundary condition.* Phys. Rev. **B 47**, Seite 872, 1993.

[51] SØRENSEN, E. und I. AFFLECK: *Large-scale numerical evidence for Bose condensation in the S=1 antiferromagnetic chain in a strong field.* Phys. Rev. Lett.**71**, Seite 1633, 1993.

[52] J.ZITTARTZ: *Spin-1-Modell: Anregungen.* Unveröffentlichte Rechnung.

[53] AROVAS, D. P., A. AUERBACH und F. D. M. HALDANE: *Extended Heisenberg models of antiferromagnetism: Analogies to the fractional quantum Hall effect.* Phys. Rev. Lett.**60**, Seite 531, 1988.

[54] PESCHEL, I., W. WANG, M. KAULKE und K. HALLBERG (Herausgeber): *Density Matrix Renormalisation. A New Numerical Method in Physics*, Band 528 der Reihe *Lecture Notes in Physics.* Springer, Berlin, 1998.

Danksagungen

Zunächst danke ich Herrn Prof. Dr. J. Zittartz für die Vergabe und Unterstützung der vorliegenden Diplomarbeit.

Besonderer Dank gilt Herrn Dr. A. Schadschneider für seine freundliche Betreuung und seine wichtigen Anregungen und Hinweise.

Bei Maciek Dudzinski bedanke ich mich für die kollegiale Zusammenarbeit bei Entwicklung des DMRG-Programms.

Vielen Dank an Marc André Ahrens, Christian Dziurzik, Andreas Kemper, Ansgar Kirchner und Frank Zielen, die mich als Kollegen nicht nur bei Computerproblemen, Dateninterpretationen, Symmetrieüberlegungen, Kaffeekochen und Konzertbesuchen unterstützt haben!

Bei Claudia von Canstein, Marc André Ahrens, Andreas Kemper und Frank Zielen möchte ich mich ganz herzlich für das bereitwillige und gewissenhafte Korrekturlesen meiner Diplomarbeit bedanken.

Schließlich gilt mein ganz besonderer Dank meinen Eltern, die mir mein Studium ermöglicht und mich in jeder Hinsicht unterstützt haben.

Erklärung

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

Köln im Januar 2002