

Anwendung der Dichtematrix-Renormierung auf nichtthermitesche Probleme

Dissertation
zur Erlangung der Doktorwürde
am Fachbereich Physik
der Freien Universität Berlin

vorgelegt von
MATTHIAS KAULKE
aus Eisenhüttenstadt

Berlin 1999

1. Gutachter : Prof. Dr. I. Peschel
Institut für Theoretische Physik
der Freien Universität Berlin
Arnimallee 14, 14195 Berlin

2. Gutachter : Prof. Dr. K.-D. Schotte
Institut für Theoretische Physik
der Freien Universität Berlin
Arnimallee 14, 14195 Berlin

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Die Dichtematrix-Renormierung	5
2.1	Grundlagen der DMRG	5
2.2	Die Methode unbeschränkter Systemgröße	8
2.3	Die Methode fester Systemgröße	10
2.4	Berechnung von Erwartungswerten	12
2.5	Anmerkungen zum Fehler	13
2.6	Bemerkungen zur Implementierung	15
2.6.1	Symmetrien	15
2.6.2	Zur Wahl der Programmiersprache	16
2.7	Übersicht über Anwendungen des Verfahrens	17
3	Die Heisenberg-Kette	21
3.1	Einleitende Bemerkungen	21
3.2	DMRG-Prozedur und Grundzustandsenergien	22
3.3	Korrelationsfunktionen und kritische Exponenten	27
3.4	Der uniaxiale Fall $\Delta > 1$	32
3.4.1	Das Dichtematrixspektrum	32
3.4.2	Magnetisierungen	35
3.4.3	Die End-zu-End-Korrelationsfunktion	37
4	Das nichthermitesche XX-Modell	39
4.1	Das Modell	39
4.2	DMRG bei nichthermiteschen Matrizen	40
4.2.1	Wahl der Dichtematrix	40
4.2.2	Erwartungswerte	41
4.3	DMRG-Prozedur	42

5	Die q-symmetrische Heisenberg-Kette	45
5.1	Das Modell	45
5.2	DMRG-Prozedur und Grundzustandsenergien	47
5.3	Korrelationsfunktionen und kritische Exponenten	51
5.3.1	Die g -Operatoren	51
5.3.2	Der Ising-Fall	52
5.3.3	Der Potts-Fall	59
5.3.4	Abschließende Bemerkungen	65
6	Nichtgleichgewichtsmodelle und spezielle Grundzustände	67
6.1	Einleitende Bemerkungen	67
6.2	q -symmetrische Diffusion	67
6.3	Der Grundzustand im Ferromagneten	72
6.4	Matrixproduktzustände	73
6.5	Diffusionsmodell mit Vorzugsrichtung	76
6.6	Modell mit Koagulation und Dekoagulation	79
6.7	Abschließende Bemerkungen	83
7	Zusammenfassung	85
Anhang		
A	DMRG-Daten	91
A.1	Daten zum Heisenberg-Modell für $\Delta \leq 1$	91
A.2	Daten zum Heisenberg-Modell für $\Delta > 1$	94
A.3	Daten zum nichthermiteschen XX -Modell	96
A.4	Daten zum q -symmetrischen Heisenberg-Modell	97
B	Zur Lösung des XX-Modells	101
Literatur		107
Danksagung		115
Lebenslauf		117

Danksagung

Mein Dank gilt Herrn Prof. Dr. I. Peschel für das interessante Thema und für seine umfangreiche Hilfe während der Bearbeitung des Themas und der Fertigstellung der Arbeit. Insbesondere danke ich ihm für die Freiheit, die er mir bei der Einteilung der Arbeit gewährt hat.

Herrn Prof. Dr. K.-D. Schotte bin ich dankbar für zahlreiche Diskussionen und aufmunternde Worte. Darüber hinaus war er stets eine treibende Kraft, wenn es darum ging Computertechnik oder -zubehör zu beschaffen.

Dr. X. Wang (Lausanne) danke ich für die Einführung in die Dichtematrix-Methode und die vielen hilfreichen Diskussionen sowie seine Gastfreundschaft.

Außerdem danke ich Dr. A. Honecker (Zürich) für die Hilfe bei der Realisierung meines ersten DMRG-Programms und seine Unterstützung bei der Erforschung der mysteriösen Welt der Numerik und der Computer.

Dr. H. Hinrichsen bin ich sehr dankbar für die Diskussionen zur q -symmetrischen Heisenberg-Kette und zu den Nichtgleichgewichtsmodellen.

Dem Max-Planck-Institut für Physik komplexer Systeme in Dresden, insbesondere Herrn H. Scherrer, danke ich für die großzügige und unkomplizierte Bereitstellung von Computerressourcen, ohne die die Rechnungen zu Kap. 5 nur schwer möglich gewesen wären.

Weiterhin danke ich der Universität Henri Poincaré, Nancy, speziell dem Laboratoire de Physique des Matériaux und seinen Mitarbeitern für ihre Gastfreundschaft und die nützlichen Diskussionen.

Dankbar bin ich den Mitarbeitern der EDV-Abteilung des Fachbereiches, die die für meine Arbeit so wichtigen Computer am Laufen gehalten haben. Speziell danke ich D. Pleiter für seine Geduld mit mir insbesondere in der Anfangsphase meiner Arbeit.

Nicht zuletzt möchte ich meiner Frau Katrin und meinen Eltern für ihre umfangreiche Unterstützung danken. Ohne sie wäre ich nie so weit gekommen.

