

# Kapitel 2

## Die Dichtematrix-Renormierung

### 2.1 Grundlagen der DMRG

Da der Zustandsraum eines Quantensystems mit zunehmender Kettenlänge exponentiell wächst, ist es im allgemeinen nicht möglich, den Grundzustand exakt für große Systeme zu bestimmen. Es ist also notwendig, einen approximativen Zustand zu konstruieren, der in einem kleinen Unterraum definiert ist. Diese Idee ist nicht neu und wurde bereits in der numerischen Ortsraum-Renormierung umgesetzt. Dort wird das System, zum Beispiel ein Spinsystem, in Blöcke von wenigen Spins unterteilt und jeder Block isoliert behandelt. Von jedem Block werden dann einige der am tiefsten liegenden Eigenzustände mitgenommen und damit durch erneutes Verkoppeln der Blöcke ein genäherter Zustand für das gesamte System konstruiert.

Während die Ortsraum-Renormierung sehr erfolgreich zur Lösung des Kondo-Problems eingesetzt werden konnte [14], lieferte sie bei anderen Quantenketten sehr schlechte [15,16] oder sogar falsche [17] Ergebnisse. Heute weiß man, worin die Schwäche dieses Verfahrens liegt. Es wird nicht berücksichtigt, daß sich die exakte Eigenfunktion des gesamten Systems aus dem Zusammenspiel eines Blockes mit seiner Umgebung ergibt.

Es ist also eine Methode erforderlich, die von vornherein das Zusammenspiel zwischen den Blöcken berücksichtigt und die in einem Block mitgenommenen Zustände unter diesem Gesichtspunkt auswählt. Wie wir sehen werden, erfüllt die DMRG genau diese Forderung.

Es soll zunächst das mathematische Prinzip, das der DMRG-Prozedur zugrunde liegt, diskutiert werden [12]. Die zu klärende Frage lautet: Wie findet man zu einem gegebenen exakten Zustand  $|\Phi\rangle$  einen optimal angenäherten Zustand  $|\Phi'\rangle$ , indem man nur einen Teil des Hilbert-Raumes verwendet?

Da wir auf einem diskreten Gitter endlicher Größe arbeiten, ist der Zustandsraum endlich. Wir teilen nun das System in zwei Teile und wählen für jeden Teil

einen vollständigen Satz von Basisvektoren. Diese Basiszustände sind  $|i\rangle$  und  $|j\rangle$  mit  $i = 1, 2, \dots, I$ ,  $j = 1, 2, \dots, J$  und  $I \leq J$ . Das Produkt  $|i\rangle|j\rangle$  liefert dann einen vollständigen Satz von Basisvektoren für den Hilbert-Raum des ganzen Systems. Entwickelt man den exakten Zustand nach diesen Basiszuständen, so erhält man

$$|\Phi\rangle = \sum_{i,j} \Phi_{ij} |i\rangle |j\rangle. \quad (2.1)$$

Der Einfachheit halber sei angenommen, daß der Zustand  $|\Phi\rangle$  reell ist. Die folgende Diskussion kann aber auch auf komplexe Zustände verallgemeinert werden.

Man bildet nun einen approximativen Zustand, indem man in den Teilen des Systems zu reduzierten Sätzen von Basisvektoren  $|u^\alpha\rangle$  und  $|v^\alpha\rangle$  mit  $\alpha = 1, 2, \dots, m$  ( $m < I$ ) übergeht.

$$|\Phi'\rangle = \sum_{\alpha} \Phi'_{\alpha} |u^{\alpha}\rangle |v^{\alpha}\rangle \quad (2.2)$$

Der Zustand  $|\Phi'\rangle$  ist dann eine optimale Näherung für den exakten Zustand, wenn die Differenz

$$S = \|\Phi - \Phi'\|^2 \quad (2.3)$$

so klein wie möglich wird. Schreibt man die eingeschränkten Basen als

$$|u^{\alpha}\rangle = \sum_i u_{\alpha i} |i\rangle \quad (2.4)$$

$$|v^{\alpha}\rangle = \sum_j v_{\alpha j} |j\rangle, \quad (2.5)$$

dann ergibt sich aus (2.3) mit (2.1) und (2.2)

$$S = \sum_{i,j} \left( \Phi_{ij} - \sum_{\alpha} \Phi'_{\alpha} u_{\alpha i} v_{\alpha j} \right)^2. \quad (2.6)$$

Dieses Minimierungsproblem ist ein Problem kleinster Quadrate und wird gelöst durch die singuläre Zerlegung der rechteckigen Matrix  $\Phi$

$$\Phi = UDV^T \quad (2.7)$$

mit einer quadratischen Matrix  $U$  und einer Diagonalmatrix  $D$ , die beide die Dimension  $I \times I$  besitzen, und einer Rechtecksmatrix  $V$  mit der Dimension  $I \times J$ .  $U$  ist eine orthogonale Matrix und  $V$  ist spaltenorthogonal. Die Diagonalelemente von  $D$  sind die singulären Werte der Matrix  $\Phi$ . Für quadratische Matrizen entspricht die Zerlegung (2.7) der Transformation auf die Diagonalfom. Wählt man nun als Entwicklungskoeffizienten  $\Phi'_{\alpha}$  die  $m$  größten Elemente von  $D$  und als Basisvektoren  $|u^{\alpha}\rangle$  bzw.  $|v^{\alpha}\rangle$  die entsprechenden Spalten von  $U$  und  $V$ , so ist die Größe  $S$  minimal und der Vektor  $|\Phi'\rangle$  ist die gesuchte Näherung von  $|\Phi\rangle$ .

Befindet sich das System im Zustand  $|\Phi\rangle$ , dann lautet die Dichtematrix

$$\varrho = |\Phi\rangle\langle\Phi|. \quad (2.8)$$

Durch Summation über die Zustände  $|j\rangle$  erhält man die reduzierte Dichtematrix

$$(\varrho_1)_{ii'} = \sum_j \Phi_{ij} \Phi_{i'j} \quad (2.9)$$

oder in Matrixnotation

$$\varrho_1 = \Phi\Phi^T. \quad (2.10)$$

Verwendet man die Zerlegung (2.7) und die Orthogonalitätseigenschaften der Matrix  $V$ , so bekommt man

$$\begin{aligned} \varrho_1 &= UDV^TVDU^T \\ &= UD^2U^T. \end{aligned} \quad (2.11)$$

Das bedeutet: Die Matrix  $U$ , die die optimalen Zustände für die Darstellung von  $|\Phi\rangle$  enthält, diagonalisiert die reduzierte Dichtematrix. Die Quadrate der Elemente der Diagonalmatrix  $D$  sind die Eigenwerte von  $\varrho_1$ , und die Spalten der Matrix  $U$  enthalten die dazugehörigen Eigenvektoren. Damit hat man ein leicht anwendbares Verfahren, die optimalen Basiszustände  $|u^\alpha\rangle$  zu finden – man wählt die Eigenzustände der reduzierten Dichtematrix, die zu den  $m$  größten Eigenwerten gehören.

Daß die so gewählten Eigenzustände von  $\varrho_1$  tatsächlich eine optimale Basis sind, läßt sich auch intuitiv sofort verstehen. Physikalisch hat nämlich  $\varrho_1$  die Bedeutung eines statistischen Operators, d.h. die Eigenwerte von  $\varrho_1$  geben an, mit welchem statistischen Gewicht der zugehörige Eigenzustand zur Darstellung des Zustandes  $|\Phi\rangle$  beiträgt, wenn man die Eigenzustände der reduzierten Dichtematrix als Basiszustände wählt. Da die reduzierte Dichtematrix  $\varrho_1$  aus der vollständigen Matrix  $\varrho$  durch Spurbildung über die Zustände  $|j\rangle$  entstanden ist, enthält sie nicht nur Informationen über den Aufbau des Grundzustandes im Teil 1 (der durch die Basisvektoren  $|i\rangle$  dargestellt wird), sondern auch aus dem anderen Teil der Kette. Damit haben wir die Lösung des oben erwähnten physikalischen Problems gefunden.

Das Gesagte gilt auch, wenn sich das System in einem gemischten Zustand befindet. Dann ist die Dichtematrix eine Überlagerung von Matrizen zu den Zuständen  $|\Phi_l\rangle$ , die den gemischten Zustand bilden. Dabei befindet sich das System mit der Wahrscheinlichkeit  $p_l$  im Zustand  $|\Phi_l\rangle$  und die Dichtematrix hat die Gestalt

$$(\varrho_1)_{ii'} = \sum_l p_l \sum_j \Phi_{l,ij} \Phi_{l,i'j}. \quad (2.12)$$

In den nächsten Abschnitten soll nun die numerische Umsetzung der Methode behandelt werden

## 2.2 Die Methode unbeschränkter Systemgröße

Die einfachsten Version der DMRG ist die Methode unbeschränkt großer Systeme, bei der iterativ eine Kette beliebiger Länge konstruiert wird. In den Originalarbeiten wird sie als Infinite-Size-Methode [12,13] bezeichnet. Der Name der Methode kommt daher, daß sie gedacht ist, das Verhalten eines Systems im thermodynamischen Grenzfall  $L \rightarrow \infty$  zu studieren. Allerdings ist der Name nicht sehr glücklich gewählt worden, da das Verfahren als numerische Prozedur keine Ketten unendlicher Länge behandeln kann. Außerdem beschränkt der wachsende Fehler in den Korrelationsfunktionen bei großen Kettenlängen die Anwendbarkeit des Verfahrens. Da sich der Name Infinite-Size-Methode eingebürgert hat und die Prozedur in der Literatur immer so bezeichnet wird, verwenden wir ihn auch in dieser Arbeit weiter.

Man beginnt mit einer kurzen Kette von  $L_0$  diskreten Plätzen, die durch einen Hamilton-Operator  $H$  gegeben ist. An jedem Platz befindet sich eine Variable, z.B. ein Spin, die  $p$  verschiedene Werte annehmen kann. Das bedeutet, der Zustandsraum wird lokal an einem Platz durch  $p$  Basisvektoren aufgespannt. Die Zahl der Gitterplätze,  $L_0$ , wählt man so, daß sich das System mit wenig Aufwand exakt behandeln läßt. Dann zerlegt man die Kette in zwei Teile (siehe obere Hälfte von Abb. 2.1), wobei jeder Teil aus einem Block von mehreren Plätzen (B bzw. B') und einem einzelnen Platz (a bzw. a') aufgebaut wird.<sup>1</sup> Der Hamilton-Operator  $H$  schreibt sich dann als Summe der Hamilton-Operatoren der Untersysteme und deren Wechselwirkungen

$$H = H_B + H_{Ba} + H_{aa'} + H_{a'B'} + H_{B'}. \quad (2.13)$$

Die Diagonalisierung von  $H$  liefert den Grundzustand  $|\Phi\rangle$  in der Form

$$|\Phi\rangle = \sum_{i,j} \Phi_{ij} |i\rangle_1 \otimes |j\rangle_2, \quad (2.14)$$

wobei die Vektoren  $|i\rangle_1$  und  $|j\rangle_2$  ( $i, j = 1, \dots, p^{L_0/2}$ ) die Basisvektoren des Teils 1 und 2 des Systems sind.

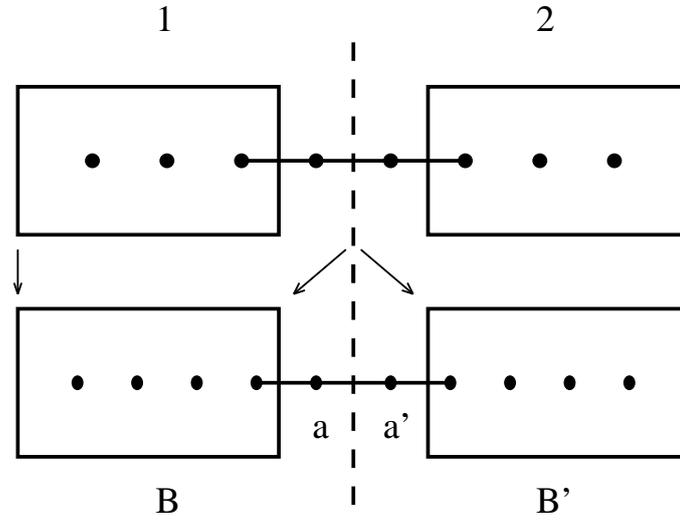
Im nächsten Schritt soll nun das System vergrößert werden. Da der Hilbert-Raum exponentiell mit der Systemgröße anwächst, muß ein eingeschränkter Satz von Basisvektoren derart konstruiert werden, daß der Grundzustand optimal in der eingeschränkten Basis dargestellt werden kann (vgl. den vorigen Abschnitt). Um das zu erreichen, bildet man zuerst die quantenmechanische Dichtematrix des Systems

$$\varrho = |\Phi\rangle\langle\Phi|. \quad (2.15)$$

Durch Summation über die Zustände  $|j\rangle_2$  im Teil 2 des Systems erhält man die

---

<sup>1</sup>Die in Abbildung 2.1 dargestellte Teilung des Systems in zwei gleich große Teile hat praktische Vorteile, ist aber nicht notwendig. Im Prinzip kann man das System beliebig in zwei Teile spalten.



**Abbildung 2.1:** Schematische Darstellung der Einteilung der Kette in der Methode unbeschränkt großer Systeme.

reduzierte Dichtematrix  $\varrho_1$ :

$$\varrho_1 = \sum_{ii'} \Phi_{ij} \Phi_{i'j}^* |i\rangle_{11} \langle i'|. \quad (2.16)$$

Die Dichtematrix  $\varrho_1$  besitzt Eigenwerte  $\omega_{n1}$  und dazugehörige Eigenvektoren  $|\omega_n\rangle_1$  ( $n = 1, \dots, p^{L_0/2}$ ). Für die Eigenwerte gilt

$$0 \leq \omega_{n1} \leq 1 \quad \forall n \quad \text{und} \quad \sum_{n=1}^{p^{L_0/2}} \omega_{n1} = 1. \quad (2.17)$$

Man wählt nun die Eigenvektoren von  $\varrho_1$ , die zu den  $m$  größten Eigenwerten gehören, als Basisvektoren des Teils 1. Für den Teil 2 muß analog die Dichtematrix  $\varrho_2$  konstruiert werden, deren Eigenvektoren dann als Basis für diesen Teil verwendet werden.<sup>2</sup>

Der alte Teil 1 des Systems (Block B–a) wird nun als neuer Block B aufgefaßt. Entsprechend wird aus dem alten Teil 2 (Block a'–B') der neue Block B'.

$$\begin{aligned} H_B + H_{Ba} &\rightarrow H_B \\ H_{a'B'} + H_{B'} &\rightarrow H_{B'} \end{aligned} \quad (2.18)$$

Dann fügt man zwischen den beiden Blöcken zwei neue Plätze a und a' ein (siehe untere Hälfte von Abb. 2.1).

<sup>2</sup>Sind die beiden Teile des Systems reflexionssymmetrisch zueinander, dann vereinfacht sich die numerische Umsetzung wesentlich, weil dann nur  $\varrho_1$  und dessen Eigenvektoren verwendet werden müssen.

Sämtliche, für die Rechnung benötigte Operatoren in den Blöcken  $B$  und  $B'$  werden nun auf die neue Basis transformiert

$$\hat{O} \rightarrow \mathbf{U}\hat{O}\mathbf{U}^\dagger. \quad (2.19)$$

Die Matrix  $\mathbf{U}$  enthält die Eigenvektoren von  $\varrho_1$  zu den  $m$  größten Eigenwerten. Ist  $m < p^{L_0/2}$ , so enthält die neue Basis weniger Zustände als die alte, und die Matrix  $\mathbf{U}$  ist eine Rechtecksmatrix, die eine Transformation auf einen eingeschränkten Satz von Basiszuständen liefert. Diese Transformation, bei der ein Teil des Hilbert-Raumes abgeschnitten wird, soll im folgenden in Anlehnung an den englischen Originalbegriff als Trunkierung bezeichnet werden.

Danach bildet man die neuen Basen für die beiden Teile des Systems:

$$\begin{aligned} |i'\rangle_1 &= |\omega_i\rangle_1 \otimes |a\rangle \\ |j'\rangle_2 &= |a'\rangle \otimes |\omega_j\rangle_2 \quad i, j = 1, \dots, m, \end{aligned} \quad (2.20)$$

wobei  $|a\rangle$  und  $|a'\rangle$  beliebige Sätze von Basisvektoren (zum Beispiel der normalen Spinbasis) für die zusätzlichen Plätze  $a$  und  $a'$  darstellen.

Nun läßt sich erneut der Hamilton-Operator (2.13) konstruieren. Das gesamte Verfahren wird dann solange wiederholt, bis die gewünschte Kettenlänge  $L$  erreicht ist. In Tabelle 2.1 ist der gesamte Algorithmus noch einmal schematisch zusammengefaßt.

## 2.3 Die Methode fester Systemgröße

Bei der im vorigen Abschnitt beschriebenen Methode für unbeschränkt große Systeme läßt sich die Genauigkeit der Ergebnisse (vgl. Abschnitt 2.5) nur durch eine Vergrößerung der verwendeten Basis, d.h. durch ein größeres  $m$  erreichen. Hier soll nun eine Abwandlung dieser Methode beschrieben werden, die es ermöglicht, zu gegebener Systemgröße  $L$  die Genauigkeit des Verfahrens wesentlich zu verbessern – die Methode fester Systemgröße.

Die Infinite-Size-Methode hat zur Folge, daß die Operatoren an den beiden Plätzen in der Mitte der Kette exakt behandelt wurden, in der Nähe der Mitte nur wenigen Transformationen unterlagen, in größerem Abstand von der Mitte aber sehr oft transformiert worden sind. Durch diese Eigenschaft werden offenbar Zustände bevorzugt, für die die Plätze an den Rändern weniger bedeutsam sind als die Plätze in der Mitte. Die Methode fester Systemgröße berücksichtigt diesen Umstand und ermöglicht es, zumindest einen Teil der Information, die während des Trunkierungsprozesses verloren gegangen ist, wiederzugewinnen.

In den Originalarbeiten und auch in der Literatur, die darauf folgte, wird die Methode fester Systemgröße als Finite-Size-Methode bezeichnet. Auch hier ist die

1. Man konstruiere den Hamilton-Operator der Kette:  
 $H = H_1 + H_{aa'} + H_2 = H_B + H_{Ba} + H_{aa'} + H_{a'B'} + H_{B'}$ .
2. Man berechne den Grundzustand  $|\Phi\rangle$ .
3. Man bilde die Dichtematrix  $\varrho = |\Phi\rangle\langle\Phi|$  und die reduzierten Dichtematrizen  $\varrho_1 = Sp_{(2)}(\varrho)$ ,  $\varrho_2 = Sp_{(1)}(\varrho)$ .
4. Man diagonalisiere  $\varrho_1$  und  $\varrho_2$  und behalte die Eigenvektoren zu den  $m$  größten Eigenwerten als neue Basisvektoren für die beiden Teile des Systems.
5. Man nehme Teil 1 (Teil 2) des Systems als neuen Block B (B'):  $H_1 = H_B + H_{Ba} \rightarrow H_B$ ,  $H_2 = H_{a'B'} + H_{B'} \rightarrow H_{B'}$ .
6. Man transformiere alle notwendigen Operatoren auf die neue, eingeschränkte Basis.
7. Man füge zwei Plätze (a und a') in der Mitte der Kette ein und bilde den neuen Hamilton-Operator.
8. Man wiederhole die Prozedur beginnend mit Punkt 2.

**Tabelle 2.1:** Die Infinite-Size-Methode der DMRG.

Namensgebung nicht sehr gut. Das Wort „finite“ wurde nur in Opposition zum Wort „infinite“ in der Bezeichnung der Methode für unbeschränkte Systemgrößen verwendet (vgl. die Ausführungen zu Beginn des vorigen Abschnitts). Selbstverständlich sind alle hier untersuchten Systeme endlich. Wir wollen aber dem allgemeinen Gebrauch folgen und die Bezeichnung Finite-Size-Methode weiterhin verwenden.

Man führt zuerst die im vorigen Abschnitt beschriebene Prozedur bis zu einer gewünschten Kettenlänge  $L$  aus, speichert aber in jedem Schritt die Hamilton-Operatoren  $H_B$ ,  $H_{Ba}$ ,  $H_{B'}$ ,  $H_{a'B'}$  und die für die Berechnung von Korrelationsfunktionen (vgl. Abschnitt 2.4) wichtigen Operatoren. Dann vergrößert man einen Teil der Kette bei fester Kettenlänge auf Kosten des anderen (siehe Abb. 2.2). Den Hamilton-Operator für den Block B bildet man jeweils aus dem gespeicherten Operator  $H_B$  des vorherigen Schrittes. Für diese Konfiguration führt man dann die Dichtematrix-Prozedur aus und konstruiert einen neuen Satz von Basisvektoren für die beiden Systemteile. In den weiteren Iterationsschritten wird dann die Grenze zwischen Teil 1 und Teil 2 bis an den Rand der Kette und wieder zurück zur Mitte verschoben. Ein solcher vollständiger Prozeß wird als Sweep bezeichnet. Während der ersten Hälfte eines Sweep-Vorganges unterliegt nur der Hilbert-Raum des Teils 2 der Kette einer Trunkierung, der Teil 1 wird ausgehend von den gespeicherten Operatoren exakt behandelt.

Die Umsetzung der Finite-Size-Methode erfordert einen weitaus höheren Auf-

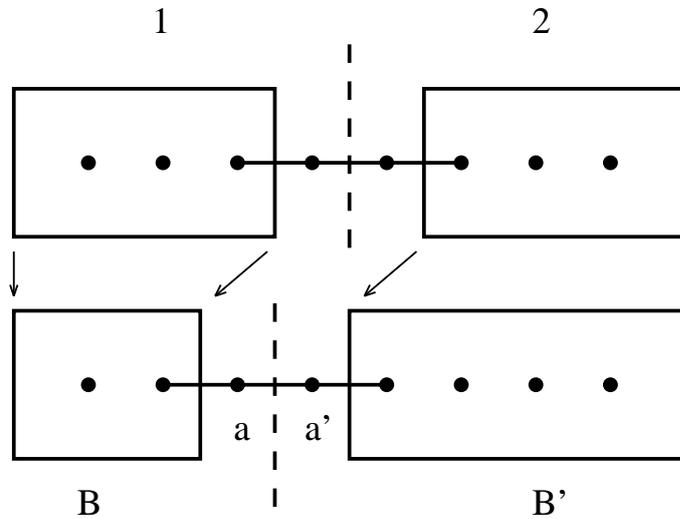


Abbildung 2.2: Der Sweep-Prozeß der DMRG-Prozedur.

wand als die Infinite-Size-Methode. Dieser zusätzliche Aufwand, der sich zum einen in einer komplizierteren Programmstruktur, aber auch in einem wesentlich höheren Speicherbedarf zeigt, steht möglicherweise in keinem guten Verhältnis zu dem Gewinn an Genauigkeit, der durch die verbesserte Methode erzielt wird. Es hat sich jedoch gezeigt, daß in bestimmten Modellen der Gewinn an Genauigkeit bei festem  $m$  sehr hoch sein kann. In Diffusionsmodellen ist die Methode fester Systemgröße sogar unabdingbar, um genaue Ergebnisse für die Grundzustandsenergie und Erwartungswerte im Grundzustand zu erzielen, vgl. Kap. 6. Die oben dargestellte Form der DMRG wird im weiteren Verlauf dieser Arbeit keine Verwendung finden, sie ist hier aber kurz skizziert worden, weil sie in der aktuellen Forschung, die mit Hilfe der DMRG betrieben wird, benutzt wird.

## 2.4 Berechnung von Erwartungswerten

Der große Vorteil der DMRG liegt darin, daß sie es ermöglicht, nicht nur Eigenwerte (Energien), sondern auch Eigenzustände und damit Korrelationsfunktionen numerisch mit hoher Genauigkeit zu berechnen. Bei der Berechnung von Korrelationsfunktionen muß man unterscheiden, ob die Operatoren, deren Erwartungswerte man sucht, innerhalb desselben Systemteils liegen oder nicht. Wir wollen das im Folgenden kurz anhand einer Zwei-Punkt-Korrelationsfunktion  $\langle S_i S_j \rangle$  diskutieren. Die Betrachtung ist aber nicht auf diese Funktion beschränkt, sondern gilt allgemein für jede Art von Erwartungswert.

1. Die Größen  $S_i$  und  $S_j$  liegen in verschiedenen Teilen der Kette. In diesem Fall ist die Berechnung einer Korrelationsfunktion einfach. Im Laufe der DMRG speichert man die Operatoren  $S_i$  und  $S_j$  als getrennte Matrizen, sobald die Kette lang genug ist, so daß sie die Plätze  $i$  und  $j$  enthält. Jeder Operator wird dann im weiteren Verlauf der Prozedur wie die Hamilton-Operatoren der Blöcke  $B$  und  $B'$  in die neuen Basen transformiert. Nach Erreichen der maximalen Kettenlänge berechnet sich die Korrelationsfunktion wie gewohnt aus

$$C(i, j) = \langle \Phi | S_i S_j | \Phi \rangle. \quad (2.21)$$

Mit diesem Ausdruck wird die Korrelation in der genäherten Basis exakt berechnet.

2. Die Situation ist etwas anders, wenn sich die beiden Größen im selben Teil des Systems befinden. In diesem Fall darf man nicht die Operatoren getrennt speichern, sondern muß sofort, wenn es die Kettenlänge erlaubt, das Produkt  $P(i, j) = S_i S_j$  bilden und als *eine* Matrix im weiteren Verlauf der Rechnung behandeln. Die Korrelationsfunktion ist dann

$$C(i, j) = \langle \Phi | P(i, j) | \Phi \rangle. \quad (2.22)$$

Dieser Ausdruck berechnet die Korrelationsfunktion exakt in der eingeschränkten Basis. Keinesfalls darf man (2.21) verwenden [12].

## 2.5 Anmerkungen zum Fehler

Über den Wert einer numerischen Methode kann man nur dann entscheiden, wenn sich eine Aussage über den Fehler machen läßt. Ein Maß, das sich natürlicherweise zur Charakterisierung des Fehlers anbietet, ist der sogenannte Trunkierungsfehler

$$\varepsilon = 1 - \sum_{i=1}^m \omega_i, \quad (2.23)$$

der die Summe der Eigenwerte darstellt, die zu den nicht berücksichtigten Eigenvektoren der reduzierten Dichtematrix gehören. Verschwindet diese Größe für irgendeinen Wert von  $m$ , so ist die DMRG-Prozedur exakt und liefert im Rahmen der Maschinengenauigkeit exakte Ergebnisse.

Der Trunkierungsfehler (2.23) allein gibt einem keine eindeutige Information über den wirklichen Fehler in verschiedenen Größen. Untersuchungen an lösbaren Problemen [18] haben aber gezeigt, daß der Fehler in der Grundzustandsenergie bei

Anwendung der Finite-Size-Methode bis auf die Größenordnung des Trunkierungsfehlers reduziert werden kann.<sup>3</sup> Um das zu erreichen, muß man sicher sein, daß die DMRG-Prozedur konvergiert ist, d.h. eine Erhöhung des Wertes für  $m$  und eine zusätzliche Zahl von Finite-Size-Schritten zu keiner Verbesserung des Wertes der Grundzustandsenergie (oder der zu berechnenden Erwartungswerte) mehr führt. Der Trunkierungsfehler bietet in diesem Sinne zwar keine exakte Fehlerschranke, aber einen Hinweis auf die Größenordnung des realen Fehlers. Außerdem kann man bei der Untersuchung von Quantensystemen ausnutzen, daß die DMRG eine Variationsmethode ist, der numerische Wert für die Grundzustandsenergie liegt also in jedem Fall oberhalb des exakten. Bei der Anwendung der DMRG auf nichthermitesche Hamilton-Operatoren geht diese Eigenschaft verloren (siehe Kap. 4 und 5).

Aus der Genauigkeit der Energie läßt sich nicht auf die Genauigkeit des zugehörigen Eigenvektor schließen. Es zeigt sich, daß bei Anwendung der Methode unbeschränkt großer Systeme der Fehler im Vektor und damit in den Erwartungswerten um Größenordnungen von dem Fehler in der Energie abweichen kann [18]. Die Abweichungen in den Erwartungswerten kommen daher, daß die Operatoren, aus denen man Erwartungswerte bestimmen will, während der DMRG ständig auf eingeschränkte Basiszustände transformiert wurden. Bei zusätzlicher Verwendung der Methode fester Systemgröße läßt sich dieser Fehler mitunter stark reduzieren. Die Erfahrung hat aber gezeigt, daß er weit über dem Trunkierungsfehler liegen kann.

Einen großen Einfluß auf die Genauigkeit des Verfahrens haben auch die Randbedingungen. Die besten Ergebnisse liefert die DMRG bei offenen oder fest fixierten Rändern. Periodische Randbedingungen oder anders geartete Kopplungen, die die Kette zum Ring schließen, setzen die Genauigkeit herab, weil die beiden Systemteile nun an zwei Stellen miteinander wechselwirken.

Allgemein kann man sagen, daß die Genauigkeit des Verfahrens sehr stark von dem untersuchten Modell abhängt. Da, wie oben beschrieben, der Trunkierungsfehler einen Anhaltspunkt liefert, ist der Abfall des Eigenwertspektrums der reduzierten Dichtematrix ein wichtiger Punkt. Es ist überraschend, daß das Spektrum und seine Struktur bisher nur wenig diskutiert worden sind. Im allgemeinen hat man sich mit der Berechnung des Trunkierungsfehlers begnügt. Erst in jüngster Zeit ist versucht worden, das Spektrum der Dichtematrix für interessante Systeme im voraus zu berechnen, um so bereits vor einer DMRG-Rechnung angeben zu können, wieviele Eigenzustände für eine gewünschte Genauigkeit zu berücksichtigen sind. Man kann sogar spezielle Systeme finden, in denen sich von vornherein analytisch zeigen läßt, daß für ein endliches  $m$  die DMRG exakt ist. Solche Beispiele, siehe [19,20] sowie

---

<sup>3</sup>Bei der Diskussion um Größenordnungen darf man nicht vergessen, daß die DMRG in den meisten Fällen überaus genaue Resultate liefert. Ein relativer Fehler von der Größenordnung  $10^{-3} \dots 10^{-4}$  gilt bei DMRG-Rechnungen mitunter als ziemlich schlecht.

Kapitel 5 und 6, sind sehr hilfreich für das tiefere Verständnis der Methode.

## 2.6 Bemerkungen zur Implementierung

### 2.6.1 Symmetrien

Ein wichtiger Punkt bei einer effizienten Programmierung der DMRG ist die Ausnutzung von Symmetrien. Symmetrien verringern nicht nur den Speicherbedarf und die Rechenzeit. Durch das Herabsetzen der Dimension des zu behandelnden Zustandsraumes der Hamilton-Matrix wird auch der Trunkierungseffekt kleiner und die Methode daher genauer. Häufig auftretende Symmetrien in DMRG-Rechnungen sind Symmetrien bezüglich kontinuierlicher oder diskreter Rotationen, Spin-Inversion und Paritätsoperationen. Wie groß der technische Aufwand ist, Symmetrien zu implementieren, hängt davon ab, ob der entsprechende Symmetrieoperator global mit dem Hamilton-Operator vertauscht oder nur eine lokale Symmetrie an einem Gitterplatz beschreibt.

Handelt es sich um eine globale Symmetrie, d.h. der Symmetrieoperator vertauscht mit dem Hamilton-Operator, so gibt es in dem Problem eine Erhaltungsgröße und damit eine gute Quantenzahl. Das ist zum Beispiel bei der Rotationssymmetrie um die  $z$ -Achse der Fall, bei der die  $z$ -Komponente des Spins erhalten bleibt. In einem solchen Fall kann man die Basiszustände nach der guten Quantenzahl klassifizieren, und der Hamilton-Operator zerfällt in Blöcke zu verschiedenen Werten dieser Quantenzahl. Diese Blockstruktur überträgt sich auch auf die Dichtematrix. Die Matrix  $U$  sei der Symmetrieoperator, d.h. es gilt

$$H' = UHU^{-1} = H \quad \text{oder} \quad [U, H] = 0. \quad (2.24)$$

Dann gilt für einen nichtentarteten Grundzustand

$$U|\Phi\rangle = \lambda|\Phi\rangle \quad (2.25)$$

mit dem Eigenwert  $\lambda$ . Daraus folgt für die Dichtematrix

$$\varrho' = U\varrho U^{-1} = U|\Phi\rangle\langle\Phi|U^{-1} = \lambda|\Phi\rangle\langle\Phi|\lambda^{-1} = \varrho \quad (2.26)$$

oder

$$[U, \varrho] = 0. \quad (2.27)$$

Zerlegt man die Symmetriematrix in der Form  $U = U_1U_2$ , wobei die Matrizen  $U_1$  bzw.  $U_2$  nur auf die Größen im Teil 1 bzw. Teil 2 der Kette wirken, so erhält man für die reduzierte Dichtematrix  $\varrho_1 = Sp_{(2)}(\varrho)$  analog

$$[U_1, \varrho_1] = 0. \quad (2.28)$$

Die Dichtematrix besitzt also die gleichen Symmetrien wie der Hamilton-Operator. Darum lassen sich auch die Eigenzustände der reduzierten Dichtematrizen und damit die neuen Basiszustände nach derselben Quantenzahl in einem Teil des Systems klassifizieren. Die Blockstruktur von  $H$  bleibt so in der gesamten Rechnung erhalten und die Selektion der relevanten Matrixelemente ist relativ leicht durchführbar. Ist der Grundzustand entartet, gelten die oben angegebenen Relationen weiterhin, wenn die Dichtematrix  $\rho$  aus allen Zuständen zum Eigenwert  $\lambda$  gebildet wird. Wählt man nur einen der entarteten Zustände aus, so wird die Symmetrie gebrochen.

Hat man dagegen eine lokale Symmetrie im System, dann vertauscht der Symmetrieeoperator nicht mit dem Hamilton-Operator, wie es zum Beispiel bei der Spin-Inversions-Symmetrie der Fall sein kann. In diesem Fall wird die Implementierung deutlich komplizierter. Es ist nun erforderlich, Tabellen (sogenannte Look-Up Tables) anzulegen, die die Koordinaten der relevanten Matrixelemente in den verschiedenen Matrizen enthalten. Diese Vorgehensweise ist natürlich umständlicher und unter Umständen auch langsamer als die Methode der Quantenzahlen. Aber es ist möglich, daß sich die technische Umsetzung lohnt, weil der Gewinn an Genauigkeit und Rechenzeit sehr hoch ist. Solche Tabellen können natürlich auch bei globalen Symmetrien angewandt werden, wenn die Klassifizierung nach Quantenzahlen programmiertechnische Probleme bereitet.

Die Bedeutung und die effiziente Implementierung von Symmetrien in DMRG-Rechnungen wurde unabhängig voneinander zuerst in [21,22] und in [23] diskutiert.

In unserer Arbeit wurde nur die Erhaltung der  $z$ -Komponente des Gesamtspins, d.h. die Rotationssymmetrie um die  $z$ -Achse berücksichtigt, indem alle verwendeten Zustände nach den Werten von  $S_{tot}^z$  klassifiziert wurden.

## 2.6.2 Zur Wahl der Programmiersprache

Die physikalische Idee, die hinter der DMRG steckt ist relativ einfach, und ebenso einfach ist der mathematische Apparat, der zur Durchführung des Verfahrens benötigt wird. Aus diesem Grund ist es mehr eine Frage des Geschmacks, welche Programmiersprache zur numerischen Implementierung verwendet wird.<sup>4</sup> Tatsächlich nutzen die Experten auf dem Gebiet der DMRG sowohl Programme in Fortran als auch in C++, da offenbar keine der beiden Sprachen für das Verfahren prädestiniert zu sein scheint. Ein gut geschriebener Code ist in beiden Sprachen etwa gleich schnell und läßt sich gleich gut von Fehlern bereinigen.

Die Programme, die benutzt wurden, um die Ergebnisse dieser Arbeit zu berechnen, sind durchgängig in Fortran geschrieben. Die Programme zum Kapitel 3 wurden in Fortran 77 (F77) verfaßt. Das ist angemessen, solange der Aufwand an

---

<sup>4</sup>Es ist durchaus möglich, ein einfaches DMRG-Programm sogar in BASIC zu schreiben. Die Effizienz wird allerdings nicht allzu hoch sein.

Speicher vertretbar klein bleibt. F77 hat jedoch zwei große Nachteile, die eine Implementierung der DMRG-Methode sehr erschweren: es gibt keine dynamischen Felder und keinen Pointer-Typ. Insbesondere das Fehlen von dynamisch zuweisbarem Speicher macht die Verwaltung und die Manipulation der sehr großen Matrizen zu einem mühevollen Prozeß. Darum sind wir bei den späteren Rechnungen zu dem moderneren Standard Fortran 90 (F90) übergegangen, der diese Nachteile nicht mehr besitzt.

Fortran 90 ist insbesondere für Anfänger leichter zu handhaben, da die Sprache einen natürlichen Umgang mit den mathematischen Strukturen, besonders mit Matrizen erlaubt. Außerdem sind gerade Rechenoperationen und Manipulationen von Vektoren und Matrizen von vornherein so in die Sprache integriert, daß nicht nur die Programmierung übersichtlich ist, sondern daß auch ein Übergang auf einen Rechner mit paralleler Prozessorarchitektur ohne Veränderung des Quellcodes möglich ist. Ein konsequent geschriebener F90-Code liefert sowohl auf einem seriellen als auch auf einem parallelen Rechner sehr gute Recheneffizienz. F90 ist im Gegensatz zu C++ keine wirklich objektorientierte Sprache. Dieser Nachteil spielt jedoch bei der DMRG eine untergeordnete Rolle, da ihn andere Eigenschaften von F90 überwiegen.

Neben dem Speicherbedarf für etliche Milliarden doppelt genaue Fließkommazahlen ist die CPU-Zeit, die für die Diagonalisierung des Hamilton-Operators benötigt wird, die entscheidende Grenze für die praktische Realisierbarkeit der DMRG. Das macht sich insbesondere bei den Rechnungen zu Kapitel 5 bemerkbar, wo bis auf die Dichtematrizen  $\varrho_1$  und  $\varrho_2$  selbst fast alle Felder doppelt genaue komplexe Werte enthalten. Neben dem etwa doppelt so großen Speicherbedarf verursacht die komplexe Arithmetik eine Erhöhung der CPU-Zeit um einen Faktor 1.7 bis 2. Bei sehr großen Werten von  $m$  kann also eine gute Diagonalisierungsroutine große Vorteile bringen. Da in unseren Rechnungen nur der Grundzustandsvektor des Hamilton-Operators gesucht war, wurden die Diagonalisierungen vorwiegend iterativ ausgeführt, was auch in Bezug auf den Speicherbedarf angebracht schien (vgl. dazu auch die Abschnitte 3.2 und 5.2).

## 2.7 Übersicht über Anwendungen des Verfahrens

Die DMRG-Methode wurde ursprünglich entwickelt, um Grundzustandseigenschaften von eindimensionalen Systemen möglichst genau zu bestimmen. Die sehr guten Resultate bei Quantenspinketten und Ketten mit wechselwirkenden Fermionen, z.B. Hubbard-Modell, hat frühzeitig dazu geführt, die Methode auch auf andere Probleme anzuwenden.

Die Berechnung des Grundzustandes ermöglicht in Quantenspinsystemen die Bestimmung von Eigenschaften bei  $T = 0$ . Um auch thermodynamische Größen mit der DMRG zu behandeln, ist es erforderlich, angeregte Zustände zu bestimmen.

Die Berechnung von Anregungen ist allerdings mit einem Verlust an Genauigkeit verbunden, da zur Berechnung eines angeregten Zustandes alle darunter liegenden Zustände ebenfalls als Zielzustände gewählt werden müssen, um zu verhindern, daß die Methode versehentlich auf einen falschen angeregten Zustand konvergiert. Wenn also keine Quantenzahlen vorliegen, die es ermöglichen, eine Anregung als Grundzustand in einem Unterraum des Hilbert-Raumes zu betrachten, so muß man mit einer modifizierten Dichtematrix arbeiten, die in geeigneter Weise mehrere Zustände anvisiert. Eine solche Dichtematrix der Form (vgl. (2.12))

$$\varrho_\alpha = \sum_{p_l} p_l \sum_{ii'j} \Phi_{l,ij} \Phi_{l,i'j}^* |i\rangle_{\alpha\alpha} \langle i'| \quad (2.29)$$

mit  $\alpha = 1, 2$ , wobei die  $p_l$  geeignet zu wählende Gewichte für die Zustände  $|\Phi_l\rangle$  sind, enthält Informationen über mehrere Zustände und stellt somit einen Kompromiß bezüglich der Genauigkeit jedes einzelnen Zielzustandes dar. Darüber hinaus ist es nicht möglich, alle Anregungen, insbesondere in Modellen mit verschwindender Energielücke, zu berechnen. Die Bestimmung thermodynamischer Eigenschaften wie in [24] über die Berechnung des Anregungsspektrums ist daher ziemlich kompliziert und erfordert einen großen numerischen Aufwand.

Thermodynamische Größen lassen sich einfacher über die sogenannte Quantentransfermatrix berechnen. Die Erweiterung der DMRG auf dieses Problem wurde in [25] durchgeführt. Diese Art der DMRG hat sich als äußerst effektiv bei der Berechnung von Eigenschaften bei endlicher Temperatur erwiesen. Ihre Umsetzung ist allerdings beträchtlich aufwendiger als die der gewöhnlichen DMRG.

Die Quantentransfermatrix-DMRG beruht darauf, daß man thermische Erwartungswerte eines eindimensionalen Quantensystems in Erwartungswerte eines klassischen zweidimensionalen Systems umschreibt und diese mit einer geeigneten Transfermatrix berechnet. Sie ist damit eine Variante der üblichen Behandlung zweidimensionaler Systeme wie des Ising-Modells über Transfermatrizen, für welche die DMRG auch schon herangezogen wurde [26,27]. Erst vor kurzem wurde die Methode auch auf dreidimensionale klassische Systeme erweitert [28]. In der Praxis stößt man jedoch bei dreidimensionalen Systemen sehr bald auf unüberwindliche Probleme in Bezug auf den Bedarf an Computerspeicher und Rechenzeit, so daß die Methode zum gegenwärtigen Zeitpunkt eher von theoretischem Interesse ist.

Es wurde auch versucht, die herkömmliche DMRG auf zweidimensionale Quantensysteme auszuweiten [29,30]. In zwei Dimensionen ist der Zustandsraum jedoch bedeutend größer als in nur einer Dimension. Daher stößt die DMRG hier sehr schnell an ihre Grenzen. Auch der Aufbau des Systems aus zwei Teilen ist in zwei Dimensionen weitaus aufwendiger.

Die Anwendung auf nichthermitesche Hamilton-Operatoren begann 1997 mit Berechnungen zum Quanten-Hall-Effekt [31]. Weitere Arbeiten folgten rasch [32–34]. Die ersten nichthermiteschen Matrizen wurden zwar vorher in den oben

erwähnten Rechnungen an Transfermatrizen behandelt, doch unterscheiden sich die Transfermatrix-Methoden durch die Wahl der Dichtematrix deutlich von den anderen Rechnungen zu nichthermiteschen Matrizen, siehe Kap. 4.

Bis heute ist die DMRG-Methode außer auf die oben bereits erwähnten Probleme auch noch auf eine ganze Reihe anderer interessanter Fragestellungen angewandt worden. Ein sehr großes Feld umfassen derzeit Rechnungen zu Spinleitern [35], da sie neben ihrer Bedeutung für das Verständnis des Überganges von einer Dimension zu zwei Dimensionen auch für die Modellierung realer Materialien (siehe z.B. [36–39]) wichtig geworden sind. Eine kleine und keineswegs vollständige Auswahl von DMRG-Rechnungen an Spinleitern findet man in [40–44].

Bemerkenswert ist die Anwendung der DMRG auf bosonische Systeme wie z.B. Oszillatoren oder Systeme mit Elektron-Phonon-Wechselwirkungen [45,46]. Trotz der doppelten Einschränkung des Zustandsraumes – einmal durch die notwendige Reduzierung des unendlich-dimensionalen Raumes der bosonischen Zustände eines Oszillators und zum anderen durch die Trunkierung innerhalb des DMRG-Prozesses – erwies sich das Verfahren als äußerst effizient. Die Erfahrungen, die man an solchen Rechnungen gewonnen hat, wurden dann sogar eingesetzt um quantenchemische Rechnungen am  $\text{H}_2\text{O}$ -Molekül durchzuführen [47].

Die Liste der in diesem Abschnitt besprochenen Erweiterungen der DMRG-Methode ist keineswegs vollständig. Für einen umfangreicheren Überblick siehe [13] und die Referenzen darin.