

Kapitel 3

Die Heisenberg-Kette

3.1 Einleitende Bemerkungen

Um die Genauigkeit der Methode zu testen, haben wir Rechnungen an der offenen antiferromagnetischen Heisenberg-Kette mit Spin $1/2$ ($p = 2$) bei $T = 0$ durchgeführt. Das Heisenberg-Modell [48] ist durch den Hamilton-Operator

$$H = \sum_{i=1}^{L-1} \mathbf{S}_i \mathbf{S}_{i+1} = \sum_{i=1}^{L-1} \left\{ \Delta S_i^z S_{i+1}^z + \frac{1}{2} (S_i^+ S_{i+1}^- + S_i^- S_{i+1}^+) \right\} \quad (3.1)$$

gegeben. Je nach dem Wert der z -Kopplung Δ bezeichnet man es als *XXX-Kette* ($\Delta = 1$) oder *XXZ-Kette* ($\Delta \neq 1$). Der vollständig anisotrope Fall des *XYZ-Modells* soll hier nicht näher betrachtet werden. Eine Verallgemeinerung des Falles verschwindender z -Kopplung (*XX-Modell*) wird im Kap. 4 diskutiert. Der Operator (3.1) ist schon oft untersucht worden, da er sich als äußerst fruchtbar in der Theorie des Magnetismus erwiesen hat. War das Interesse an eindimensionalen Modellen zuerst nur dadurch motiviert, daß durch ihr Studium ein besseres Verständnis von Phasenübergängen in drei Dimensionen und den damit verbundenen kritischen Phänomenen gewonnen werden konnte, so kennt man heute zahlreiche Materialien, deren magnetisches Verhalten durch eindimensionale Modelle wie zum Beispiel das Heisenberg-Modell beschrieben wird [1]. Für die theoretische Physik wurde das Heisenberg-Modell schon früh interessant, als sich erwies, daß es mit einem bestimmten Ansatz gelöst werden kann. Die ersten analytischen Untersuchungen dazu wurden von Bethe 1931 durchgeführt [2]. In dieser wegweisenden Arbeit wurden die Eigenwerte und Eigenfunktionen für den isotropen Fall $\Delta = 1$ für endliche Ketten berechnet. Danach wandte man den Bethe-Ansatz schon bald auch auf andere eindimensionale Modelle an [49].

Die Grundzustandsenergie im thermodynamischen Grenzfall $L \rightarrow \infty$ wurde für das *XXX-Modell* das erste Mal von Hulthén 1938 berechnet [50]. Für das *XXZ-Modell* gelang die Lösung erstmals 1958 [51] (siehe auch [52]). 1971 stellte Baxter

eine Verbindung zwischen der anisotropen XYZ-Kette und dem zweidimensionalen klassischen Acht-Vertex-Modell her und konnte so etwas später das XYZ-Modell lösen [53] (siehe auch [54]).

Für $0 \leq \Delta \leq 1$ befindet sich das System an einem quantenkritischen Punkt und Korrelationsfunktionen fallen algebraisch ab. Die Theorie der konformen Invarianz [55,56,7,8] und analytische Rechnungen [4] machen Aussagen über die kritischen Exponenten und bieten somit eine gute Möglichkeit, die DMRG-Resultate zu testen. Für den Fall $\Delta = 0$ läßt sich das Heisenberg-Modell mittels Jordan-Wigner-Transformation [3] (siehe auch Anh. B) auf ein Modell nicht wechselwirkender fermionischer Teilchen abbilden und exakt diagonalisieren.

Im isotropen Fall $\Delta = 1$ treten im asymptotischen Verhalten der Korrelationsfunktionen multiplikative Korrekturen auf, die logarithmisch mit der Systemgröße anwachsen. Diese Korrekturen wurden zum ersten Mal 1977 von Finkelstein in [57] behandelt und 1985 erneut diskutiert [58]. Bald darauf folgten numerische Untersuchungen des Problems mit Hilfe von Monte-Carlo-Rechnungen [59] und verschiedene analytische Überlegungen [60]. Ähnliche Korrekturterme wurden auch in der Grundzustandsenergie beobachtet [61,62].

Die ersten Rechnungen am antiferromagnetischen Heisenberg-Modell mit Hilfe der Dichtematrix-Renormierung wurden von White in seiner Pionierarbeit zur DMRG 1992 durchgeführt [12]. In [63] konnten das erste Mal auch die logarithmischen Korrekturen in den Korrelationsfunktionen für große Systeme von bis zu 70 Plätzen numerisch bestimmt werden. Mit den Bethe-Wellenfunktionen sind die Eigenfunktionen des Heisenberg-Modells zwar bekannt, jedoch ist ihre Struktur zu kompliziert, um damit Korrelationsfunktionen berechnen zu können. Das ist für längere Ketten erst durch die DMRG möglich geworden.

Obwohl das Heisenberg-Modell so intensiv studiert wurde, können wir im Abschnitt 3.4 einige interessante Ergebnisse für den uniaxialen Fall $\Delta > 1$ präsentieren, die in der Literatur offenbar bisher noch nicht diskutiert worden sind. Wir gehen davon aus, daß sie hier zum ersten Mal dargestellt werden. Der Fall $\Delta > 1$, bei dem sich die Heisenberg-Kette in einer geordneten Phase befindet, ist für die DMRG auch noch aus einem anderen Grund interessant. In diesem Fall läßt sich nämlich das Eigenwertspektrum der Dichtematrix analytisch angeben [19].

3.2 DMRG-Prozedur und Grundzustandsenergien

Um die Grundzustandsenergien zu berechnen, haben wir die Infinite-Size-Methode der DMRG aus Abschnitt 2.2 angewandt. In Abb. 3.1 ist ein typisches Spektrum der reduzierten Dichtematrix ρ_1 für eine kurze isotrope Kette von 30 Plätzen darge-

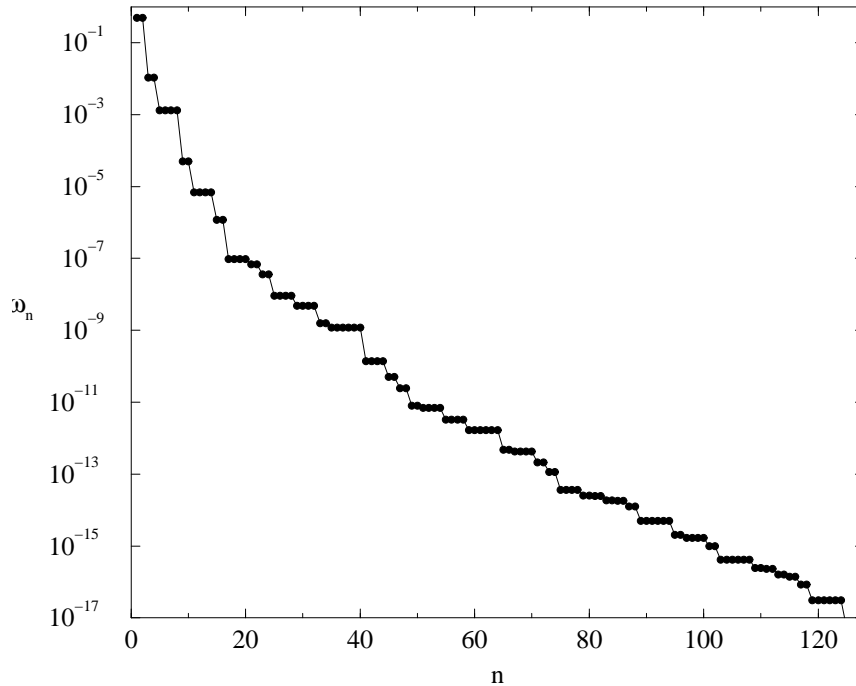


Abbildung 3.1: Spektrum der reduzierten Dichtematrix ρ_1 für eine XXX -Kette von 30 Plätzen, berechnet mit 64 Zuständen.

stellt. Man erkennt, daß die Eigenwerte exponentiell abfallen, so daß bereits wenige Zustände ausreichen, um den Trunkierungsfehler bis auf nahezu Maschinengenauigkeit herabzusetzen. Dieses Verhalten wurde bereits in [12] gefunden und als Anhaltspunkt für die Genauigkeit der Methode genommen. Ein so schnell abfallendes Eigenwertspektrum scheint typisch für die Heisenberg-Kette zu sein. Es hängt kaum von der Anisotropie Δ ab, lediglich im Fall $\Delta = 0$ liegen die Eigenwerte etwas niedriger als für $\Delta \neq 0$.

Es wäre sehr nützlich, könnte man den Ursprung dieses Spektrums besser verstehen, da der exponentielle Abfall der Eigenwerte entscheidend für die Genauigkeit des Verfahrens ist. Man vergleiche dazu die Diskussion im Abschnitt 3.4.1.

Wir haben die Grundzustandsenergien für Ketten mit einer Reihe verschiedener Werte von Δ untersucht. Im folgenden sollen die wesentlichen Resultate am Beispiel von drei speziellen Werten diskutiert werden: $\Delta = 0$, $\sqrt{2}/2$ und 1. Diese Modelle werden der Einfachheit halber als XX , XXZ und XXX -Modell bezeichnet.

Bei der Diagonalisierung des Hamilton-Operators wurde die Potenzmethode (Vektoriteration), ein iteratives Verfahren zum Auffinden des Eigenzustandes einer Matrix mit extremalem Eigenwert, verwendet. Bei der Potenzmethode wird die Ma-

trix auf einen beliebigen Startvektor angewandt und das Ergebnis dieser Operation als neuer Startvektor für den nächsten Iterationsschritt verwendet. Das Verfahren konvergiert stabil auf den Eigenvektor mit dem betragsmäßig größten Eigenwert. Die Geschwindigkeit der Konvergenz hängt dabei vom Abstand des extremalen Eigenwertes vom nächsten benachbarten Eigenwert, im Falle des Heisenberg-Modells also von der Lücke im Anregungsspektrum, ab. Da die Konvergenz der Potenzmethode sehr langsam ist und für große Kettenlängen aufgrund der kleiner werdenden Lücke zwischen Grundzustand und erster Anregung immer schlechter wird, haben wir ein Lanczos-Verfahren in einem reduzierten Unterraum von maximal 30 Basiszuständen durchgeführt, um einen möglichst guten Startvektor für die Potenzmethode zu finden.

Darüber hinaus wurde ausgenutzt, daß die z -Komponente des Spins eine Erhaltungsgröße ist und der Grundzustand stets im Unterraum $S_{tot}^z = 0$ des Hilbert-Raumes liegt. Auf diese Weise konnte die Dimension der zu diagonalisierenden Matrizen stark reduziert werden.

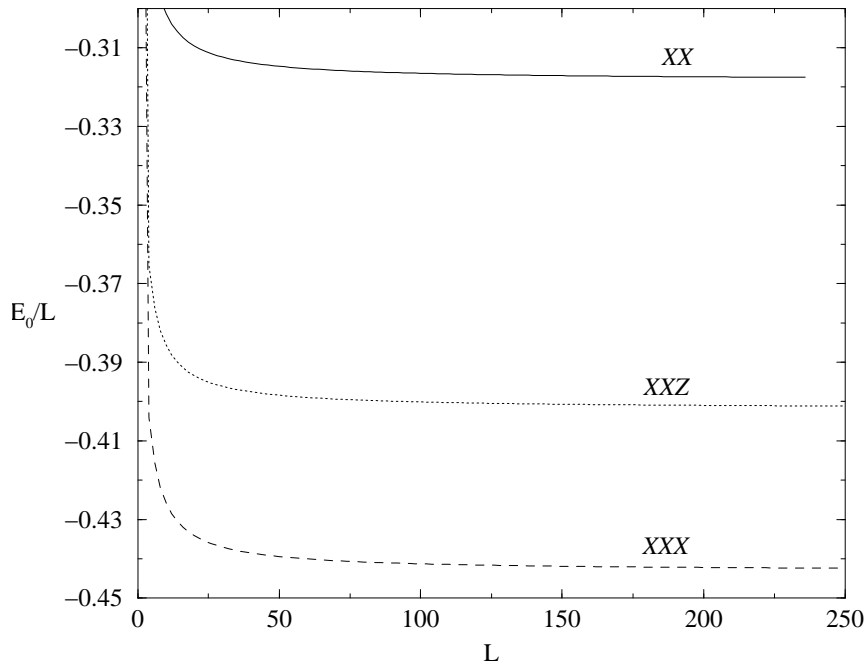


Abbildung 3.2: Grundzustandsenergie pro Spin als Funktion der Kettenlänge für die drei im Text besprochenen Modelle, berechnet mit 128 Zuständen der Dichtematrix.

Die Energien pro Spin als Funktion der Kettenlänge sind für Rechnungen mit 128 berücksichtigten Zuständen der Dichtematrix in Abb. 3.2 dargestellt. Wurden nur wenige Zustände der Dichtematrix berücksichtigt ($m \leq 32$), so konnten in kurzer Zeit Ketten mit bis zu 1000 Plätzen berechnet werden. Für die maximale Zahl von Zuständen, $m = 128$, konnten in vernünftiger Zeit Ketten mit einer Länge von etwa 250 Plätzen behandelt werden.

Für die XX -Kette kann man die Energie analytisch angeben [64] (vgl. auch Anh. B). Sie lautet

$$E = \sum_{q \leq \frac{\pi}{2}} 2 \cos q \quad (3.2)$$

mit

$$q = \frac{\pi}{L+1} n, \quad n = 1, 2, \dots, L. \quad (3.3)$$

Man findet durch Vergleich der analytischen Werte der Grundzustandsenergie pro Platz mit den numerischen Daten einen Fehler von etwa 10^{-9} für Systeme von etwa 200 Plätzen und $m = 128$. Für kurze Ketten ist er um ein bis zwei Größenordnungen kleiner. Für $m = 32$ betrug er etwa 10^{-5} . Damit ist der Fehler von der gleichen Größenordnung wie der Trunkierungsfehler. Dieses Verhalten ist typisch für die Heisenberg-Kette und auch für die verallgemeinerten Modelle aus den Kap. 4 und 5. Es gilt aber nicht immer. In anderen Modellen ist der reale Fehler in den Energien manchmal deutlich größer als der Trunkierungsfehler, wie z.B. in Rechnungen an gekoppelten Heisenberg-Ketten [65] und ganz besonders bei der Behandlung von Nichtgleichgewichtsmodellen, [33] und Kap. 6, beobachtet wurde.

Im Grenzfall $L \rightarrow \infty$ kann man das Verhalten der Grundzustandsenergie angeben. Man kann erwarten, daß sich die Energie zunächst linear mit der Systemgröße ändert. Da es sich um ein offenes System handelt, sind die Quantenfluktuationen an der Oberfläche verschieden von denen im Volumen. Man erhält darum einen zusätzlichen Term von der Oberfläche des Systems. Damit folgt für die Grundzustandsenergie in führender Ordnung:

$$E = \varepsilon_{\infty} L + B, \quad (3.4)$$

wobei B den Oberflächenanteil und ε_{∞} den Volumenanteil der unendlichen Kette bezeichnen. Dieser Anteil an der Energie ist nicht universell und hängt von den spezifischen Eigenheiten des Modells ab. Darüber hinaus gibt es einen Beitrag C/L , der aus der Wechselwirkung der beiden Enden der Kette resultiert und umgekehrt proportional zur Kettenlänge abfällt. Dieser Term, der mit dem Casimir-Effekt aus der Quantenfeldtheorie identifiziert werden kann [66], ist universell. Hierbei ist mit universell gemeint, daß er nur von einem Parameter c abhängt, der als zentrale Ladung bezeichnet wird und zur Klassifizierung der Symmetrie des Modells in der Theorie

der konformen Invarianz dient. Damit schreibt sich die Grundzustandsenergie

$$E = \varepsilon_\infty L + B - \frac{C}{L} \quad (3.5)$$

oder

$$\varepsilon = \frac{E}{L} = \varepsilon_\infty + \frac{B}{L} - \frac{C}{L^2}. \quad (3.6)$$

Zusätzlich zu diesen Termen kommen im isotropen Fall noch Korrekturen [61,62] proportional zu

$$\frac{1}{L^2(\ln L)^3} + O\left(\frac{\ln(\ln L)}{L^2(\ln L)^4}; \frac{1}{L^2(\ln L)^4}\right) \quad (3.7)$$

hinzu, die hier jedoch nicht weiter diskutiert werden sollen.

In Abb. 3.3 ist die Grundzustandsenergie pro Platz als Funktion der inversen Kettenlänge aufgetragen. Für sehr große Ketten verhält sich die Energie tatsächlich

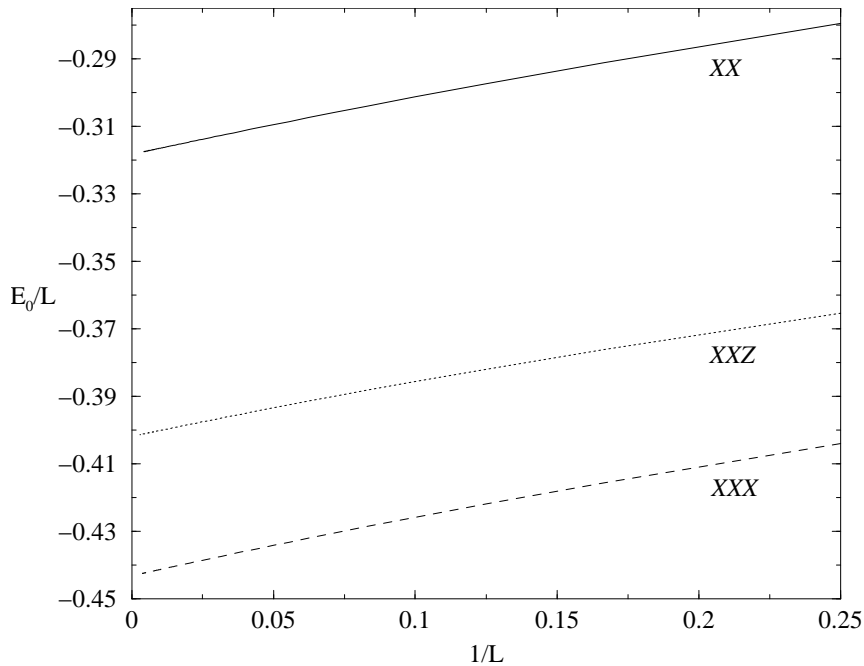


Abbildung 3.3: Wie Abb. 3.2, jedoch als Funktion der inversen Kettenlänge.

linear in $1/L$ und nähert sich einem endlichen Grenzwert, der für die isotrope Kette nach [50] $\varepsilon_\infty^{XXX} = 1/4 - \ln 2 = -0.443147\dots$ beträgt. Das XX-Modell nähert sich dem aus der analytischen Rechnung erhaltenen Wert $\varepsilon_\infty^{XX} = -1/\pi = -0.318309\dots$ Für kürzere Ketten erkennt man deutlich eine Krümmung im Verlauf der Grundzustandsenergie, die auf die Korrekturterme zurückzuführen ist.

3.3 Korrelationsfunktionen und kritische Exponenten

Wir haben verschiedene Spin-Spin-Korrelationsfunktionen berechnet, von denen im folgenden die End-zu-End-Korrelation $\langle S_1^x S_L^x \rangle$ und die Rand-zu-Volumen-Korrelation $\langle S_1^x S_r^x \rangle$ mit $r = 1, 2, \dots, L/2$ betrachtet werden sollen. Die Rechnungen wurden mit maximal 128 Zuständen durchgeführt, da sich so eine hinreichend gute Genauigkeit der numerischen Werte erzielen ließ.

Wie bereits erwähnt, befindet sich das System für die hier betrachteten Werte der Anisotropie Δ an einem kritischen Punkt, und es gibt außer der Systemgröße keine charakteristische Längenskala. Über den algebraischen Abfall der Korrelationsfunktionen kann man mit Hilfe der Theorie der konformen Invarianz Aussagen machen [7,8].

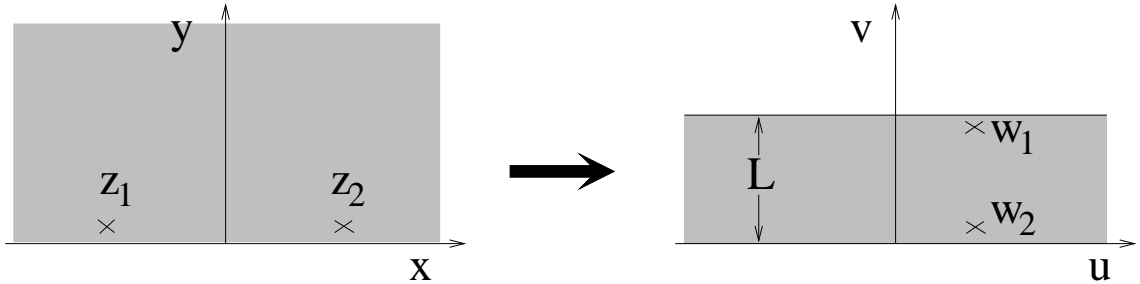


Abbildung 3.4: Abbildung der oberen Halbebene auf einen Streifen. Die Punkte z_1 und z_2 in der z -Ebene werden auf die Punkte w_1 und w_2 in der w -Ebene abgebildet. Die u -Achse kann als Zeitachse interpretiert werden.

Die Theorie der konformen Invarianz bezieht sich zunächst auf klassische zweidimensionale Modelle und ihre Korrelationsfunktionen. Da es aber eine Korrespondenz zwischen einem klassischen Modell in zwei Dimensionen und einem quantenmechanischen Modell in einer Dimension gibt [8], kann man mit ihrer Hilfe Informationen über die Korrelationsfunktionen von Quantenspinketten gewinnen. Die Theorie nutzt die Invarianz des physikalischen Modells unter konformen Transformationen aus. Damit kann aus der Kenntnis des Verhaltens der Korrelationen in einer gegebenen Geometrie auf ihr Verhalten in einer anderen Geometrie, die man durch konforme Transformationen erzeugt hat, geschlossen werden. Ist $w = w(z)$ eine solche Abbildung, so gilt für die Korrelationsfunktionen in der neuen Geometrie [7,8]

$$C(w_1, w_2) = \left| \frac{\partial w}{\partial z_1} \right|^{-x} \left| \frac{\partial w}{\partial z_2} \right|^{-x} C(z_1, z_2), \quad (3.8)$$

wobei der Exponent x dem Volumenexponenten entspricht.

Zum Beispiel kann man durch die Transformation

$$w(z) = \frac{L}{\pi} \ln z \quad (3.9)$$

die obere Halbebene auf einen unendlich langen Streifen der Breite L abbilden. Wählt man die Lage der Punkte z_1 und z_2 entsprechend (siehe Abb. 3.4), so werden sie auf die Punkte w_1 und w_2 am Rand des Streifens abgebildet. Interpretiert man die u -Achse als Zeitachse (d.h. als die Wirkungsrichtung der Transfermatrix), so liegen diese Punkte in der Nähe der Enden einer Spinkette der Länge L und offenen Randbedingungen zu einem festem Zeitpunkt. Die Korrelationsfunktion $C(z_1, z_2)$ in der z -Ebene fällt wie $|z_1 - z_2|^{-2x_s}$ ab, wobei x_s der kritische Exponent der Oberfläche ist [7]. Verwendet man diese Eigenschaft, so ist die Korrelationsfunktion $C(w_1, w_2)$, die man mit Hilfe der Transformationsformel (3.8) erhält, die End-zu-

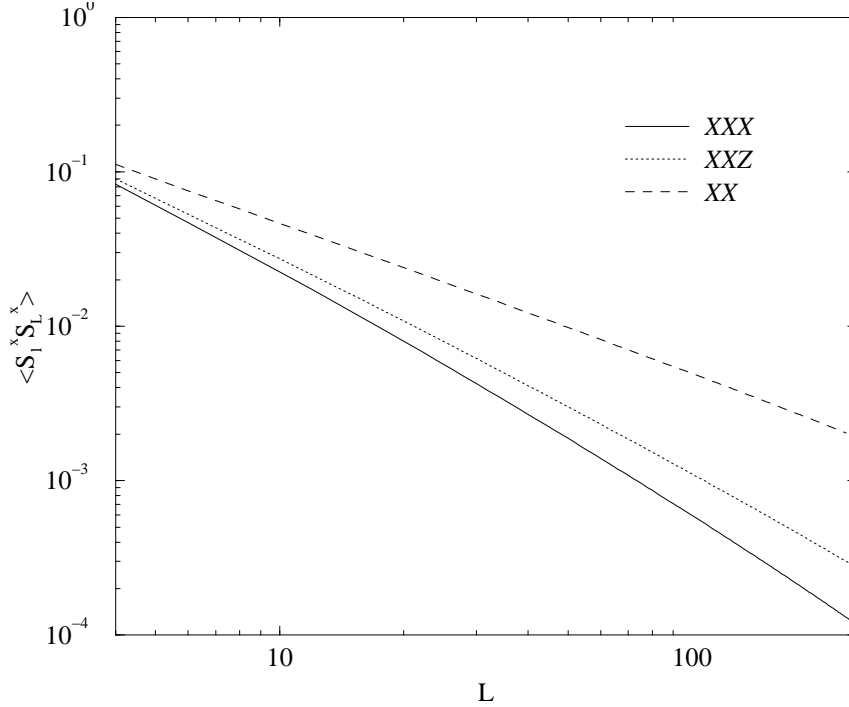


Abbildung 3.5: Doppelt logarithmische Darstellung der End-zu-End-Korrelation als Funktion der Kettenlänge für die drei im Text besprochenen Modelle, berechnet mit 128 Zuständen der Dichtematrix.

End-Korrelationsfunktion der entsprechenden Spinkette und zeigt das Verhalten

$$C(1, L) \sim \frac{1}{L^{2x_s}}. \quad (3.10)$$

Analog kann man für die Rand-zu-Volumen-Korrelationsfunktion zwischen dem ersten Platz der Kette und einem Platz im Abstand r dazu im Innern die Beziehung

$$C(1, r) \sim \frac{r^{-(x_s+x)}}{L^{2x_s}} \quad (3.11)$$

ableiten. Für eine feste Kettenlänge L ergibt sich

$$C(1, r) \sim \frac{1}{r^{x_s+x}}. \quad (3.12)$$

Dabei ist zu beachten, daß der Abstand r stets klein ist im Vergleich zur charak-

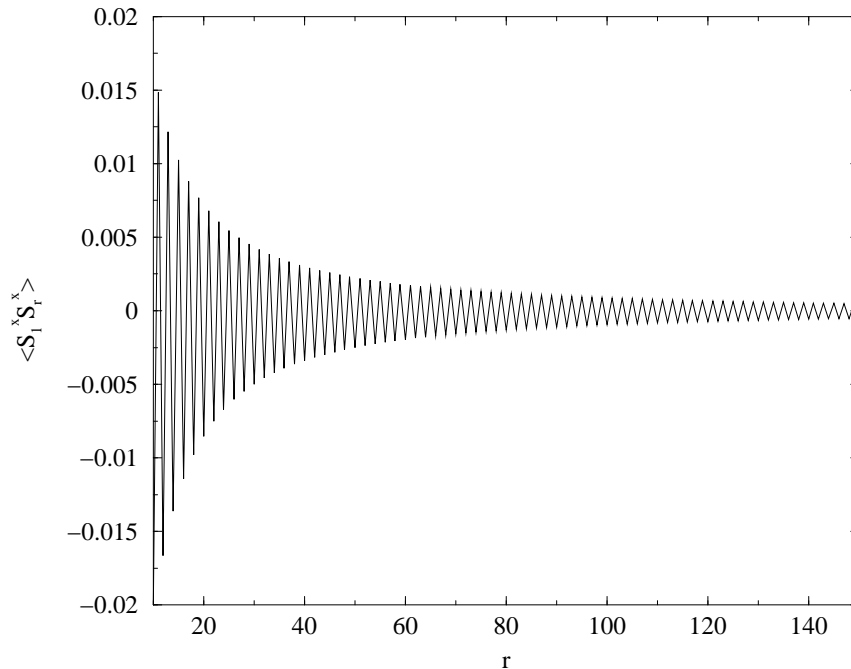


Abbildung 3.6: Profil der Rand-zu-Volumen-Korrelationsfunktion einer isotropen Heisenberg-Kette mit 300 Plätzen als Funktion des Abstandes r vom Rand der Kette, berechnet mit 64 Zuständen der Dichtematrix.

teristischen Länge L des Systems. Für feste Kettenlängen kann man auch andere Beziehungen angeben, die das Verhalten der Korrelationen als Funktion des Abstandes vom Rand der Kette oder von der Kettenmitte beschreiben. Solche Beziehungen sind Grundlage der Diskussion des Verhaltens der Korrelationsfunktionen bei der q -symmetrischen Heisenberg-Kette im Abschnitt 5.3.

In Abb. 3.5 ist die End-zu-End-Korrelationsfunktion für die drei betrachteten Werte von Δ als Funktion der Kettenlänge doppelt logarithmisch aufgetragen. Diese Funktion sollte sich für große Kettenlänge gemäß (3.10) verhalten. Aus einem Fit an die numerischen Daten bekommt man als Oberflächenexponenten $x_s = 0.4999$ (XX), 0.7505 (XXZ) und 1.301 (XXX). Nach [56] ist der Oberflächenexponent im Heisenberg-Modell mit dem Volumenexponenten verknüpft. Es gilt

$$x_s = 2x. \quad (3.13)$$

Der Volumenexponent wiederum ist exakt bekannt [4]. Er hängt von der Anisotropie

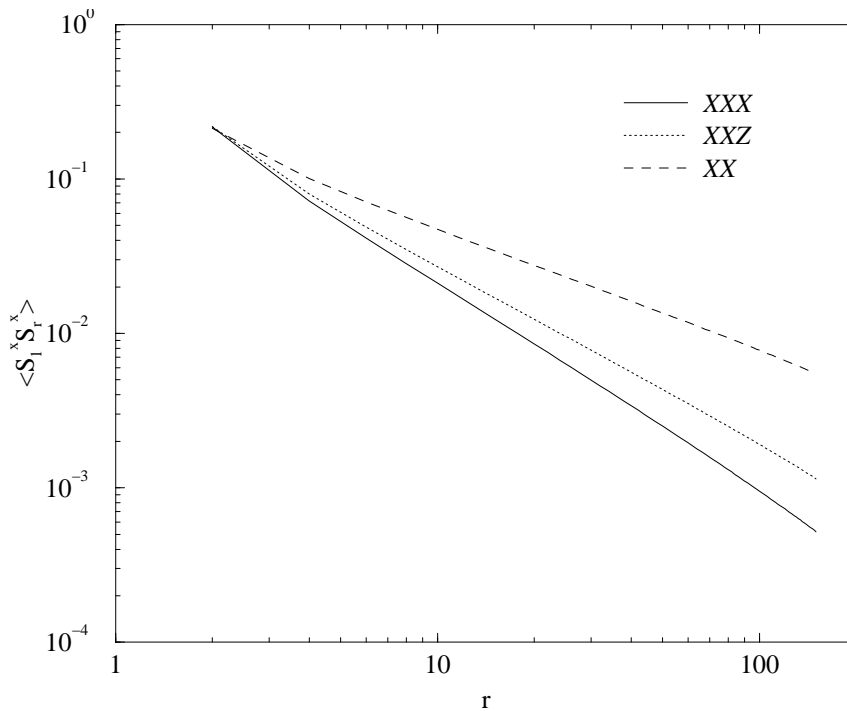


Abbildung 3.7: Doppelt logarithmische Darstellung der Maxima der Funktion aus Abb. 3.6.

Δ ab und ist gegeben durch

$$x = \frac{1}{2} - \frac{\arccos \Delta}{2\pi}. \quad (3.14)$$

Aus (3.13) und (3.14) erhält man als exakte Werte für die Oberflächenexponenten $x_s = 1/2$ (XX), $3/4$ (XXZ) und 1 (XXX). Für die anisotropen Fälle stimmen die numerischen Werte mit den theoretischen sehr gut überein. Dabei muß man

	XX		XXZ		XXX	
	DMRG	exakt	DMRG	exakt	DMRG	exakt
x_s	0.4999	1/2	0.7505	3/4	1.301	1
$x + x_s$	0.752	3/4	1.121	9/8	1.299	3/2

Tabelle 3.1: Kritische Exponenten im Heisenberg-Modell. Die DMRG-Werte wurden aus Korrelationsfunktionen bestimmt, die mit 128 Zuständen der reduzierten Dichtematrix ρ_1 berechnet wurden.

bedenken, daß der numerische Aufwand nicht besonders hoch war. Die Genauigkeit ließe sich leicht durch ein größeres m , d.h. durch eine höhere Zahl von Zuständen der Dichtematrix, und durch Rechnungen zu längeren Systemen erhöhen. Die recht großen Abweichungen im isotropen Fall $\Delta = 1$ erklären sich aus den logarithmischen Korrekturen zusätzlich zum einfachen Potenzverhalten der Korrelationsfunktionen. Diese Korrekturen führen im Volumen zu einem Verhalten proportional zu [59,60]

$$\frac{(\ln L)^{\frac{1}{2}}}{L}. \quad (3.15)$$

Durch einen Fit mit einer entsprechend modifizierten Funktion erhält man auch hier eine gute Übereinstimmung zwischen der Theorie und den numerischen Untersuchungen [63].

Um auch den Volumenexponenten bestimmen zu können, haben wir außerdem für feste Kettenlängen ($L \simeq 300$) die Korrelationsfunktion $\langle S_1^x S_r^x \rangle$ für $r = 1, 2, \dots, L/2$ berechnet, um aus dem Verhalten für große r gemäß (3.12) die Summe der beiden kritischen Exponenten zu bestimmen.

Abbildung 3.6 zeigt ein typisches Profil dieser Korrelationsfunktion für eine Kette von 300 Plätzen. Da es sich bei dem untersuchten Modell um einen Antiferromagneten handelt, oszilliert die Korrelationsfunktion in ähnlicher Weise wie bei Vorhandensein einer spontanen Ordnung mit zwei Untergittern. Gleichzeitig fällt sie aber mit zunehmendem Abstand ab.

Trägt man die Maxima der Funktion doppelt logarithmisch auf, wie in Abb. 3.7, so kann man aus dem linearen Verhalten für große r den Exponenten $x + x_s$ bestimmen. In Tabelle 3.1 sind diese Werte zusammen mit den Exponenten der Oberfläche und den exakten Werten zusammenfassend dargestellt. Auch hier verursachen die logarithmischen Korrekturen im isotropen Fall starke Abweichungen der numerischen Werte von den analytischen.

3.4 Der uniaxiale Fall $\Delta > 1$

3.4.1 Das Dichtematrixspektrum

In den vorigen Abschnitten wurde die Heisenberg-Kette am kritischen Punkt untersucht und die kritischen Exponenten der Oberfläche und des Volumens bestimmt. Wir wollen jetzt die DMRG-Methode auf den uniaxialen Fall $\Delta > 1$ anwenden. In diesem Fall ist die Quantenspinkette in der geordneten Phase. Das zugehörige klassische Modell, das Sechs-Vertex-Modell, befindet sich dann unterhalb der kritischen Temperatur. Die Korrelationslänge ist endlich und hängt von der Anisotropie ab. Für Werte von Δ in der Nähe von 1 läßt sich eine einfache Näherung für die Korrelationslänge angeben [67]

$$\xi^{-1} \simeq 8 \exp\left(-\frac{\pi^2}{2 \operatorname{arcosh} \Delta}\right). \quad (3.16)$$

In Tabelle 3.2 sind die Korrelationslängen für einige Werte von Δ , die im folgenden auftreten, zusammengestellt.

Δ	1.3	1.5	1.7	2.0	2.5	5.0
ξ	85	21	10	5.3	2.9	1.1

Tabelle 3.2: Korrelationslängen im uniaxialen Heisenberg-Modell.

Es soll zunächst das Spektrum der Dichtematrix untersucht werden. In Abb. 3.8 sind die Eigenwerte von ϱ_1 für drei verschiedene Werte von Δ aufgetragen. Man sieht deutlich, daß die Eigenwerte mit wachsendem Δ immer schneller abfallen. Die DMRG-Prozedur wird also für den nichtkritischen Fall genauere Ergebnisse liefern als für den kritischen.

Interessanter als diese bloße Feststellung ist jedoch die Tatsache, daß man in diesem Fall das Spektrum der Dichtematrix analytisch angeben kann [19]. Die Berechnung beruht auf einer Korrespondenz zwischen der Dichtematrix ϱ_1 für einen Teil der Spinkette und einer speziellen Transfermatrix des zugehörigen klassischen Modells, der Ecken-Transfermatrix [68]. Die Korrespondenz besteht darin, daß sich die Dichtematrix als Produkt von vier gleichen Ecken-Transfermatrizen A schreiben läßt [27], deren Eigenwerte aus dem Spektrum eines Operators H_{CTM} folgen.

$$\varrho_1 = A^4 = \exp(-H_{\text{CTM}}) \quad (3.17)$$

Der Operator H_{CTM} läßt sich diagonalisieren und hat dann die gleiche Gestalt wie im Fall eines Problems freier Fermionen. Dabei entstehen für die Energien Entartungen, wenn die Einteilchenniveaus ausgehend vom leeren Grundzustand nacheinander

mit einzelnen Fermionen gefüllt werden. Die in Abb. 3.8 erkennbaren Entartungen stimmen mit den theoretisch erwarteten Werten exakt überein. Es ist überraschend, daß diese Übereinstimmung, von kleinen Abweichungen abgesehen, selbst für Eigenwerte der Größenordnung 10^{-18} noch vorhanden ist, obwohl die Rechnungen nur mit doppelt genauen Fließkommazahlen, d.h. 16 Nachkommastellen, ausgeführt wurden.

Aus (3.17) entnimmt man, daß das Spektrum exakt exponentiell abfallen muß. Entfernt man aus den numerischen Daten die Entartungen, wie in Abb. 3.9 geschehen, so kann das bestätigt werden. Die Anstiege der Kurven ergeben sich analytisch aus den Einteilchenenergien des fermionischen Problems

$$2\varepsilon = \operatorname{arcosh} \Delta \quad (3.18)$$

und numerisch aus einem linearen Fit der Daten in einer Darstellung $\ln \omega_n$ gegen n . Die numerischen Werte stimmen mit den analytischen auf bis zu vier Dezimalstellen überein.

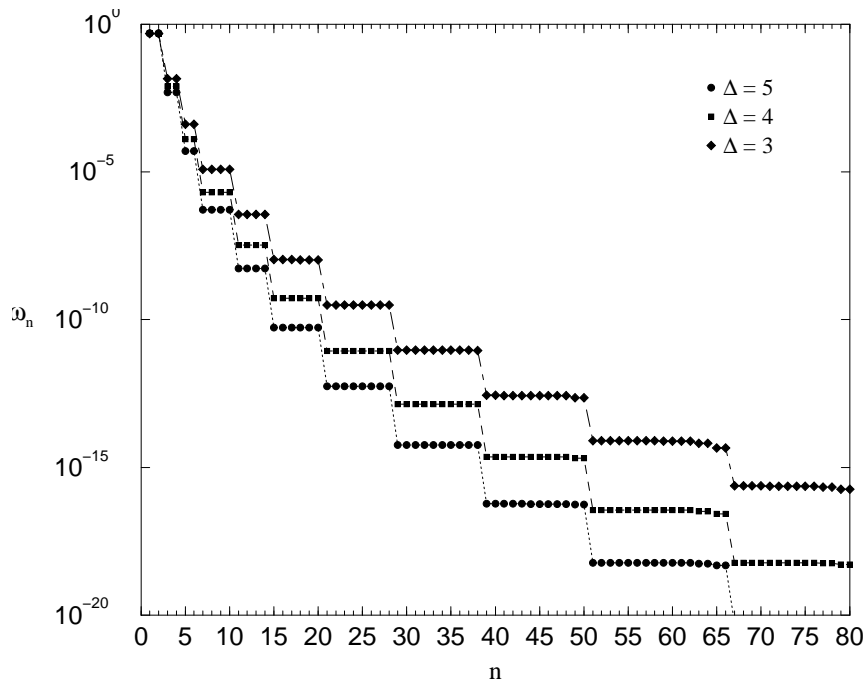


Abbildung 3.8: Spektrum der reduzierten Dichtematrix ϱ_1 für drei XXZ-Ketten von 98 Plätzen, berechnet mit 64 Zuständen.

Zu Abb. 3.9 muß man jedoch zwei Anmerkungen machen. Zum einen besteht aufgrund von numerischen Ungenauigkeiten eine gewisse Willkür darin, welche Eigenwerte man als entartet betrachten soll. Es wurde hier eine relative Differenz der

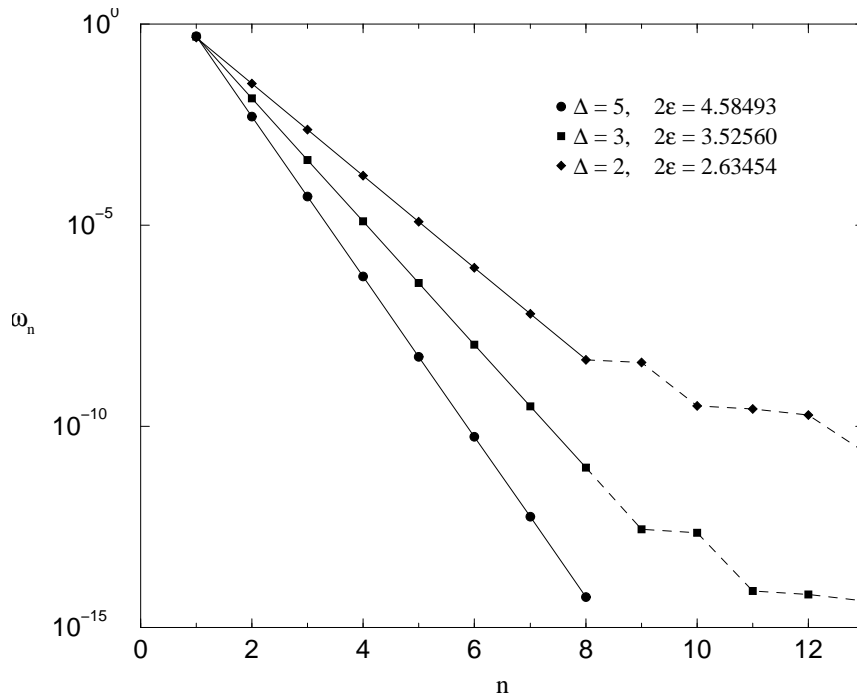


Abbildung 3.9: Wie Abb. 3.8, aber ohne Entartungen. Die Werte der ε wurden aus den Anstiegen bestimmt.

Eigenwerte von 10^{-4} als Kriterium benutzt. Lockert man diese Forderung noch weiter, so dehnt sich der Bereich, in dem genau exponentielles Verhalten zu beobachten ist, zu größeren Werten von n hin aus. Die zweite Anmerkung bezieht sich auf das untere Ende des Spektrums. Es ist deutlich zu erkennen, daß sich die Kurven für größere n abflachen. Das widerspricht allerdings früheren Resultaten aus Rechnungen an Ecken-Transfermatrizen in endlichen Systemen [69], wo das Spektrum am Ende steiler abfällt. Diese Diskrepanz kann zum einen daraus resultieren, daß die Geometrie, in der die Ecken-Transfermatrizen analytisch behandelt wurden von der Geometrie abweicht, in der das numerisch untersuchte Modell definiert ist. Diese geometrischen Unterschiede sollten jedoch für ein großes nichtkritisches System keinen großen Einfluß haben, wenn die Korrelationslänge hinreichend klein ist. Zum anderen könnte die Diskrepanz aber auch aus Ungenauigkeiten der numerischen Methode folgen, die sowohl durch die Trunkierung als auch durch Rundungsfehler (man bedenke, daß die Eigenwerte am unteren Ende des Spektrums bereits sehr klein sind) entstehen könnten.

Trotz dieser Tatsachen kann man die oben angegebenen Resultate als eine überzeugende Bestätigung der theoretischen Vorhersagen betrachten. Man kann analoge

Überlegungen auch für das Ising-Modell im transversalen Feld abseits des kritischen Punkts anstellen und auch dort das Spektrum der reduzierten Dichtematrix analytisch aus den Spektren von Ecken-Transfermatrizen berechnen [19].

Im kritischen Fall $0 \leq \Delta \leq 1$ ist die Situation komplizierter, da aufgrund der unendlichen Korrelationslänge die Geometrie, in der die Transfermatrix definiert ist, eine entscheidende Rolle spielt.

3.4.2 Magnetisierungen

In der uniaxialen Heisenberg-Kette gibt es eine spontane Magnetisierung. Um das Verhalten dieser Magnetisierung zu untersuchen, haben wir mit Hilfe des Programms, das für die Berechnung des kritischen Modells geschrieben wurde, Korrelationsprofile der Art $\langle S_i^z S_{L/2}^z \rangle$ für $i = 2, 4, \dots, L/2 - 2$, d.h. zwischen einem Ort i und der Mitte der Kette berechnet. Ist der Abstand zwischen den beiden Plätzen groß im Vergleich zur Korrelationslänge, dann gibt dieser Erwartungswert das Produkt der Magnetisierungen an den beiden Plätzen i und $L/2$. Dies läßt sich in der Tat für die hier betrachteten Kettenlängen erreichen. Dazu haben wir die oben erwähnte Korrelationsfunktion für eine Kette von 100 Plätzen mit nur 32 Zuständen der Dichtematrix berechnet.

In Abb. 3.10 sind Profile dieser Art für vier ausgewählte Werte von Δ dargestellt. Die Funktion steigt vom Rand der Kette zur Mitte hin monoton an. Für größere Δ zeichnet sich etwa in der Mitte der Kettenhälfte ein Plateau ab, das den Wert M_B^2 besitzen sollte, wobei M_B die Magnetisierung im Volumen darstellt. Für die kleineren Werte von Δ ist die Korrelationslänge noch zu groß (vgl. Tabelle 3.2), um das Plateau deutlich sehen zu können. Am Rand der Kette ($i = 1$) sollte die Korrelationsfunktion den Wert $M_B M_S$ annehmen, wobei M_S die Oberflächenmagnetisierung der Kette ist.

Die Volumenmagnetisierung wurde bereits 1973 von Baxter [70] (siehe auch [71]) berechnet.

$$M_B = \prod_{n=1}^{\infty} \left(\frac{1 - q^{2n}}{1 + q^{2n}} \right)^2, \quad (3.19)$$

wobei der Parameter q mit der Anisotropie Δ über

$$\Delta = \frac{1}{2} (q + q^{-1}) \quad (3.20)$$

verknüpft ist. Formt man diesen Ausdruck weiter um, so erhält man

$$M_B = \prod_{n=1}^{\infty} \tanh^2(n \operatorname{arcosh} \Delta), \quad (3.21)$$

was sich numerisch mit beliebiger Genauigkeit berechnen läßt.

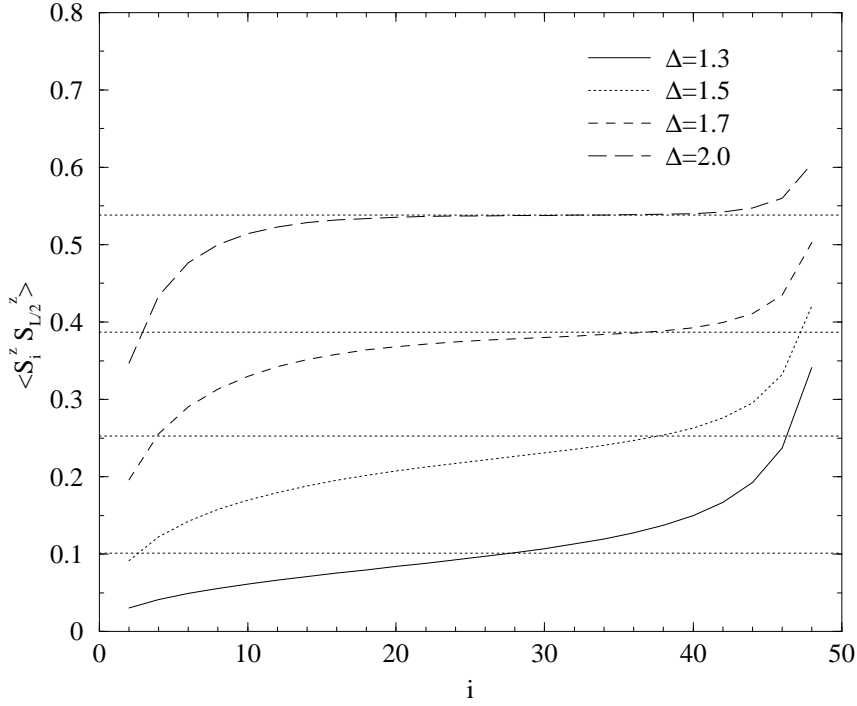


Abbildung 3.10: Korrelationsprofil einer Heisenberg-Kette von 100 Plätzen für verschiedene $\Delta > 1$, berechnet mit 32 Zuständen. Die waagerechten Linien markieren den thermodynamischen Limes M_B^2 .

Die Quadrate der exakten Werte der Volumenmagnetisierung im thermodynamischen Grenzfall sind in Abb. 3.10 als waagerechte Linien eingezeichnet. Man sieht deutlich, daß das Plateau für $\Delta = 2$ sehr gut mit diesem Wert zusammenfällt. Der Fall $\Delta = 2$ zeigt auch sehr schön die Magnetisierung in der Nähe des Randes. Man erkennt einen monotonen Abfall zur Oberfläche hin, wie er auch in zweidimensionalen Heisenberg-Magneten beobachtet wurde [72]. Im Gegensatz zum Ising-Magneten ist ein solches Profil hier nicht selbstverständlich, da die Quantenfluktuationen am Rand geringer sind als im Volumen, so daß die Korrelationsfunktion zwischen nächsten Nachbarn am Rand größer ist als in der Mitte der Kette.

Wie bereits erwähnt, sollte sich für $i = 1$ das Produkt $M_S M_B$ ergeben. Die Oberflächenmagnetisierung ist ebenfalls analytisch bekannt und mit der Magnetisierung im Volumen verknüpft. Es gilt [73]

$$M_S = M_B^2. \quad (3.22)$$

Die hier gezeigten numerischen Resultate sind am Rand jedoch nicht sehr genau. Wir haben M_S aus einer anderen Rechnung bestimmt.

3.4.3 Die End-zu-End-Korrelationsfunktion

Die Oberflächenmagnetisierung lässt sich unter anderem aus dem Verhalten der Korrelationsfunktion zwischen dem ersten und dem letzten Platz der Kette als Funktion der Kettenlänge bestimmen. Für große Kettenlängen (größer als die Korrelationslänge) sollte diese Funktion gegen den Grenzwert M_S^2 gehen.

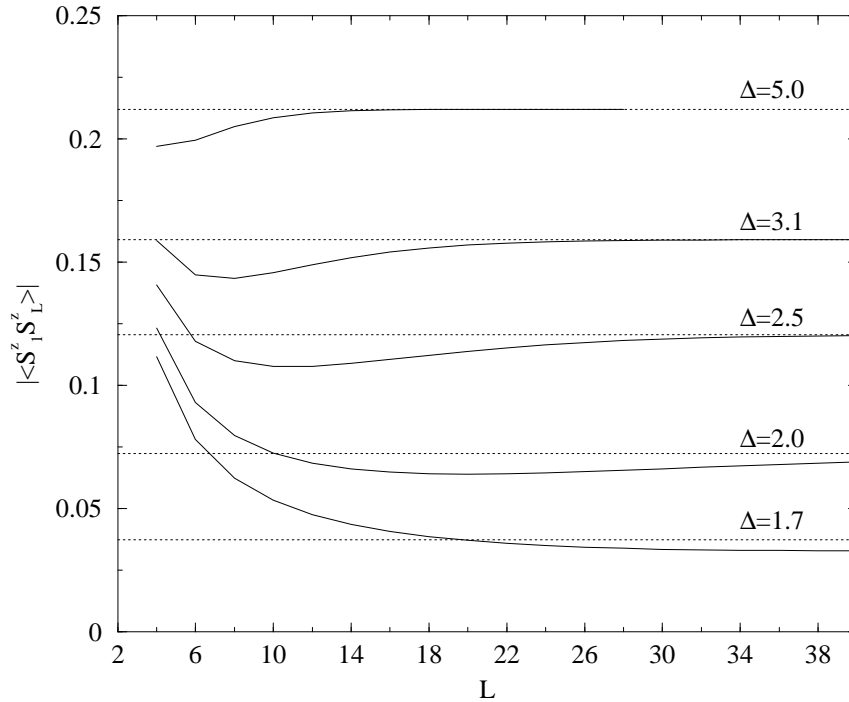


Abbildung 3.11: End-zu-End-Korrelation als Funktion der Kettenlänge für die uniaxiale Heisenberg-Kette, berechnet mit 64 Zuständen. Die waagerechten Linien markieren den thermodynamischen Limes M_S^2 .

Die numerischen Rechnungen mit 64 Zuständen der Dichtematrix haben ein unerwartetes und sehr interessantes Verhalten dieser Korrelationsfunktion ergeben. Für kurze Ketten fällt die Funktion monoton ab, wobei ihr Verlauf mit wachsendem L immer flacher wird. Dieses Verhalten ist nicht überraschend, und der flache Verlauf der Funktion könnte einen verleiten anzunehmen, die Funktion hätte bereits den Grenzwert erreicht. Vergrößert man die Kette weiter, so steigt die Funktion jedoch wieder an, bis sie schließlich den Wert M_S^2 erreicht. Dieses merkwürdige Verhalten ist in Abb. 3.11 gut zu erkennen. Für $\Delta = 5$ stimmen der analytische Wert für M_S^2 und der numerische bereits bei $L = 30$ auf fünf Dezimalstellen exakt überein. Für $\Delta = 2.5$ hat man eine Übereinstimmung von vier Dezimalen bei einer

Kettenlänge von 70 Plätzen. Für noch kleinere Werte der Anisotropie muß man zu weitaus größeren Systemen (mehrere hundert Gitterplätze) rechnen, um eine ebenso gute Übereinstimmung zu erzielen. Das ist aber nicht verwunderlich, denn nach Tabelle 3.2 sind die Korrelationslängen in diesen Fällen bereits um eine bis zwei Größenordnungen länger als bei $\Delta = 5$.

Eine einfache Erklärung für das nichtmonotone Verhalten der Korrelationsfunktion ist bisher nicht bekannt. Es tritt auch bei anderen Korrelationen im uniaxialen Heisenberg-Modell sowie beim transversalen Ising-Modell auf. Man kann allerdings sagen, daß der Effekt mit der Größe der Korrelationslänge zusammenhängt. Für Werte von Δ in der Nähe von eins ist die Korrelationslänge so groß, daß das Minimum der End-zu-End-Korrelationsfunktion erst bei sehr großen Kettenlängen zu beobachten wäre. Wird die Anisotropie groß ($\Delta > 4$), so tritt das Minimum fast am Rand der Kette auf, und es ist, wie im Fall $\Delta = 5$ ($\xi = 1.1$), für $L > 2$ nur noch eine monoton ansteigende Korrelation zu beobachten. Für $L = 2$ ist die Korrelation unabhängig von Δ stets $1/4$.

Ein ähnliches Phänomen wurde im Verhalten der Magnetisierung in halbunendlichen Ising-Systemen, die durch eine planare Oberfläche begrenzt sind, beobachtet [74]. Legt man dort am kritischen Punkt ein kleines Randfeld an, so steigt die Magnetisierung zunächst an und fällt dann wieder ab.