

Kapitel 5

Die q -symmetrische Heisenberg-Kette

5.1 Das Modell

Als ein physikalisch relevantes Modell wird in diesem Kapitel eine verallgemeinerte Heisenberg-Kette mit offenen Randbedingungen betrachtet, die durch den Hamilton-Operator [55,56]

$$H = \mp \sum_{i=1}^{L-1} e_i \quad (5.1)$$

mit

$$e_i = -\frac{1}{2} \left(\sigma_i^x \sigma_{i+1}^x + \sigma_i^y \sigma_{i+1}^y + \frac{q + q^{-1}}{2} (\sigma_i^z \sigma_{i+1}^z - 1) + \frac{q - q^{-1}}{2} (\sigma_i^z - \sigma_{i+1}^z) \right) \quad (5.2)$$

gegeben ist. Dabei sind die σ_i^α Pauli-Matrizen und q ein zunächst beliebiger komplexer Parameter. Der Hamilton-Operator (5.2) besitzt eine verallgemeinerte Rotationssymmetrie, die als q - oder Quantengruppen-Symmetrie bezeichnet wird [76]. Sie ist gekennzeichnet durch eine modifizierte Vertauschungsrelation zwischen den Spinoperatoren:

$$[S^+, S^-] = [2S^z]_q \quad (5.3)$$

mit der Notation

$$[n]_q = \frac{q^n - q^{-n}}{q - q^{-1}}. \quad (5.4)$$

Für $q = 1$ erhält man die herkömmliche Spin-Algebra $SU(2)$. Daher wird diese verallgemeinerte Algebra auch als q -deformierte $SU(2)$ -Algebra $U_q[SU(2)]$ bezeichnet. Für eine Kette von L Spins schreiben sich die Spinoperatoren dann als

$$S^z = \sum_{i=1}^L \sigma_i^z / 2 \quad (5.5)$$

und

$$S^\pm = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^L q^{\sum_{l=1}^{i-1} \sigma_l^z / 2} \sigma_i^\pm q^{-\sum_{l=i+1}^L \sigma_l^z / 2}. \quad (5.6)$$

Während die z -Komponente des Spins unverändert gegenüber der herkömmlichen $SU(2)$ -Algebra ist, werden die Umklappoperatoren (5.6) durch zusätzliche Terme modifiziert, die sie zu nichtlokalen Objekten machen. Das Umklappen eines Spins an einem Gitterplatz wird nun auch von der Einstellung der Spins an allen anderen Gitterplätzen beeinflusst. Mit den Spinoperatoren (5.5) und (5.6) folgt

$$[H, \mathbf{S}] = 0, \quad (5.7)$$

d.h. der Hamilton-Operator besitzt tatsächlich die Symmetrie $U_q[SU(2)]$.

Die Motivation dafür, dieses Modell zu betrachten, lag im wesentlichen in zwei Dingen begründet: Zum einen handelt es sich für komplexe Werte des Parameters q bei (5.2) um einen nichthermiteschen Operator, der es ermöglicht, die DMRG in diesem Fall zu untersuchen. Zum anderen ist das Modell interessant, da es in kompakter Form eine ganze Reihe von physikalischen Systemen repräsentiert.

Wählt man den Fall des Antiferromagneten (Vorzeichen „-“ in (5.1)) und beschränkt sich auf komplexe q auf dem Einheitskreis in der komplexen Zahlenebene, so enthält der Hamilton-Operator (5.2) die Eigenwertspektren zahlreicher Quantenspinsysteme. Schreibt man q in der Form

$$q = \exp\left(\frac{i\pi}{r+1}\right) \quad (5.8)$$

mit ganzzahligem r , so daß $q^{r+1} = -1$, so entspricht zum Beispiel der Fall $r = 3$ dem kritischen transversalen Ising-Modell und $r = 5$ dem Drei-Zustands-Potts-Modell [76]. Diese beiden Fälle sollen im wesentlichen in diesem Kapitel diskutiert werden. Auf diese Weise gehört zu jedem $r > 2$ ein kritisches Quantenspinsystem. Im Grenzfall $r \rightarrow \infty$ erhält man wieder die Spin-1/2 Heisenberg-Kette aus Kap. 3.

Für bestimmte reelle Werte von q ergeben sich Potts-Modelle mit mehr als drei Zuständen [77], die hier nicht weiter betrachtet werden sollen.

Diese Korrespondenzen beruhen darauf, daß die Operatoren e_i aus (5.2) eine sogenannte Temperley-Lieb-Algebra [78] bilden, indem sie die Bedingungen

$$e_i^2 = (q + q^{-1})e_i \quad (5.9)$$

$$e_i e_{i\pm 1} e_i = e_i \quad (5.10)$$

$$[e_i, e_j] = 0 \quad \text{für } (j \neq i \pm 1) \quad (5.11)$$

erfüllen. Dasselbe gilt für die Terme, die in den Hamilton-Operatoren der anderen, durch die q -symmetrische Kette repräsentierten Modelle auftreten (vgl. Abschnitt 5.3), so daß die verschiedenen Quantenspinsysteme und die $U_q[SU(2)]$ -Kette nur verschiedene Darstellungen einer Algebra sind.

Wählt man jedoch das ferromagnetische Vorzeichen, so beschreibt das Modell ein Nichtgleichgewichts-Problem, nämlich das Hüpfen von klassischen Teilchen auf einem Gitter mit Vorzugsrichtung unter Ausschluß von Doppelbesetzungen [79]. Dieses Problem wird im Abschnitt 6.2 diskutiert.

Man hat hier also ein System, das als Spin-1/2-Kette formuliert ist, gleichzeitig aber die Eigenwertspektren von Modellen zu liefern vermag, für die der Zustandsraum pro Platz normalerweise mehr als zwei Zustände enthält. Es bietet sich hier also die Gelegenheit mit einem Hamilton-Operator und damit mit einem einzigen Computerprogramm eine Vielzahl von Modellen zu untersuchen. Wie in den Abschnitten 5.3.2 und 5.3.3 diskutiert wird, muß man für diesen Vorteil einen Preis bezahlen, der darin besteht, daß man unter Umständen nicht die ursprünglichen Spin-Spin-Korrelationsfunktionen, die man normalerweise in diesen Modellen studiert, berechnen kann. Statt dessen erhält man verallgemeinerte Korrelationsfunktionen, die der Symmetrie $U_q[SU(2)]$ angepaßt sind.

Trotz des komplexwertigen Parameters q besitzt der Hamilton-Operator (5.2) reelle Eigenwerte und kann mit Hilfe des Bethe-Ansatzes behandelt werden [55,56]. Man kann auch die Eigenschaft des Operators als Erzeuger der Temperley-Lieb-Algebra ausnutzen und eine Darstellung mittels hermitescher Operatoren finden. In einer solchen hermiteschen Darstellung wurden bereits DMRG-Rechnungen durchgeführt [80]. Auf diese Weise lassen sich jedoch nicht die Eigenzustände und damit die Korrelationsfunktionen bestimmen. Da es sich aber hier um kritische Systeme handelt, ist gerade die Berechnung der Exponenten des algebraischen Abfalls der Korrelationsfunktionen ein interessanter Aspekt und soll mit Hilfe der DMRG durchgeführt werden.

Wie im Abschnitt 4.2 dargestellt, benötigt man zur Berechnung von Erwartungswerten sowohl den linken als auch den rechten Eigenvektor von H . Da der Hamilton-Operator (5.2) komplex-symmetrisch ist, ist der linke Eigenvektor einfach transponiert zum rechten Eigenvektor. Auf diese Weise lassen sich in diesem Modell allein aus der Kenntnis des rechten Eigenvektors von H beliebige Erwartungswerte im Grundzustand berechnen.

5.2 DMRG-Prozedur und Grundzustandsenergien

Um die Grundzustandsenergien und im nächsten Abschnitt die Korrelationsfunktionen zu berechnen, verwenden wir die Methode unbeschränkt großer Systeme für nichthermitesche Hamilton-Operatoren, wie sie im Abschnitt 4.2 dargestellt worden

ist.

Wie bei der isotropen Heisenberg-Kette läßt sich auch hier ausnutzen, daß der Grundzustand in einem Unterraum zu $S_{tot}^z = 0$ des Hilbert-Raumes liegt. Das reduziert die Dimension der zu behandelnden Hamilton-Matrix erheblich und verbessert so die Genauigkeit des Verfahrens.

Einen ersten Anhaltspunkt für die Effizienz der DMRG-Methode bekommt man, wenn man auch hier zuerst einen Blick auf das Eigenwertspektrum der Dichtematrix wirft. In Abb. 5.1 ist das Spektrum der Dichtematrix ϱ_1 für eine Kette von 30 Plätzen

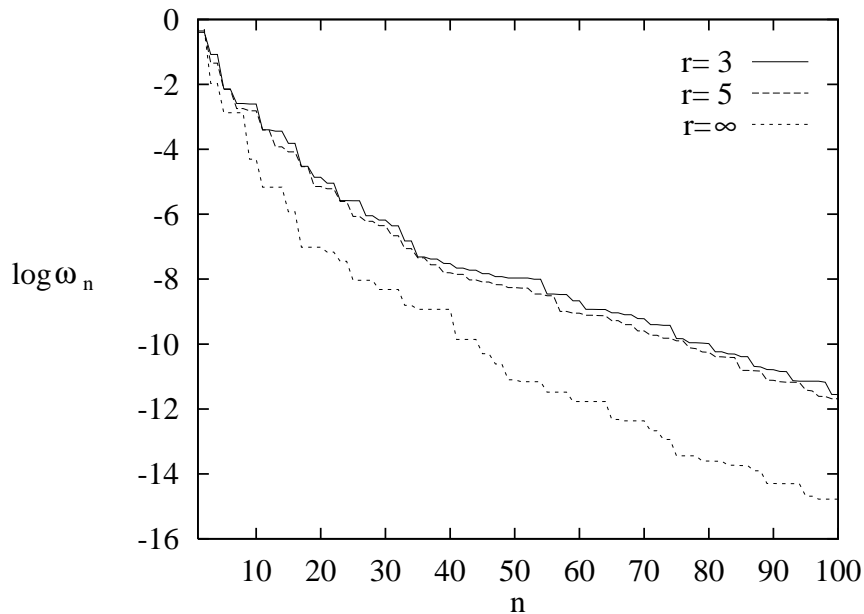


Abbildung 5.1: Eigenwertspektrum der Dichtematrix ϱ_1 für verschiedene Werte des Parameters r und eine Kettenlänge von 30 Plätzen, berechnet mit 64 Zuständen.

dargestellt.¹ Da r in gewisser Weise die Nichthermitizität des Hamilton-Operators mißt, ist es interessant zu sehen, daß das Spektrum von ϱ_1 deutlich mit r variiert. Der ungünstigste Fall liegt für $r = 3$ vor, wo das Spektrum merklich über den anderen liegt. Erhöht man den Wert von r , so senkt sich das Spektrum allmählich ab. (Der Übersichtlichkeit halber sind nur Spektren für den Ising-Fall und den Potts-Fall dargestellt.) Im Grenzfall $r \rightarrow \infty$ erhält man exakt das Spektrum der isotropen Heisenberg-Kette, wie es im Abschnitt 3.2 diskutiert wurde. Auf diese Weise besitzt man schon an dieser Stelle einen Test für die Genauigkeit der numerischen Methode im Grenzfall großer r .

¹Aufgrund der Symmetrie des Operators (5.2) sind die Eigenwerte von ϱ_1 und ϱ_2 gleich.

Obwohl die Spektren in Abb. 5.1 für endliche r immer noch einen exponentiellen Abfall zeigen, liegen sie doch um etwa zwei bis drei Größenordnungen oberhalb des Spektrums der gewöhnlichen Heisenberg-Kette. Man muß deshalb feststellen, daß die q -symmetrische Kette schon aus diesem Grund numerisch weniger vorteilhaft ist, daß also eine größere Anzahl von Eigenzuständen der Dichtematrix berücksichtigt werden muß.

Darüber hinaus bereitet die q -symmetrische Kette auch technische Probleme. Da bis auf die Dichtematrizen fast alle Matrizen komplexe Einträge besitzen, ist es erforderlich mit komplexen Variablen zu rechnen. Das führt neben einem ungefähr doppelt so großen Speicherbedarf auch zu einer Erhöhung des Bedarfs an Rechenzeit um einen Faktor von etwa 1.7 bis 2. Da aber fast die gesamte Rechenzeit auf die Diagonalisierung des Hamilton-Operators entfällt, stellt gerade dieser Punkt eine entscheidende Beschränkung dar.

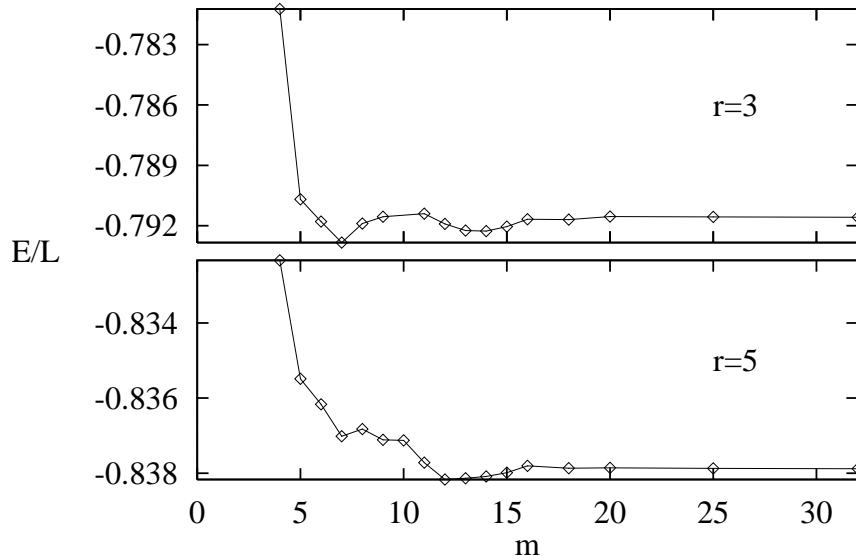


Abbildung 5.2: Grundzustandsenergien pro Platz für $r = 3$ und $r = 5$ als Funktion der Zahl der berücksichtigten Zustände m für eine Kette von 50 Plätzen.

Wie bereits bei den Rechnungen im Kap. 3 verwenden wir zum Auffinden des Grundzustandes auch hier eine Vektoriteration in Verbindung mit der Lanczos-Methode zur Konstruktion des Startvektors. Das Lanczos-Verfahren ist allerdings für nichthermitesche Matrizen im allgemeinen nicht numerisch stabil. Da aber der rechte und der linke Eigenvektor von H transponiert zueinander sind, kann man das Lanczos-Verfahren wie bei einer reellen symmetrischen Matrix anwenden, allerdings muß man dann zur Normierung das Skalarprodukt $\mathbf{u}^T \mathbf{v}$ zwischen zwei komplexen Vektoren \mathbf{u} und \mathbf{v} verwenden, das nicht positiv definit ist. Diese Tatsache ist in den

Rechnungen zu beachten. Da sich aber das modifizierte Skalarprodukt nicht wesentlich auf den Verlauf der Rechnungen ausgewirkt hat, war diese Lösung gegenüber der Programmierung eines wohl definierten Algorithmus für nichthermitesche Matrizen (z.B. des Arnoldi-Verfahrens) mit dem wenigsten technischen Aufwand verbunden, da die Routinen bereits aus den Rechnungen zum herkömmlichen Heisenberg-Modell zur Verfügung standen.

Um einen Eindruck von der Konvergenz des Verfahrens zu bekommen, haben wir die Grundzustandsenergie pro Gitterplatz für verschiedene Werte von r als Funktion der Zahl der berücksichtigten Zustände m der Dichtematrix berechnet. Abbildung 5.2 zeigt den Verlauf der Energie für die beiden interessanten Fälle $r = 3$ und $r = 5$. Wie schon bei den Rechnungen zur nichthermiteschen XX -Kette in Kapitel 4 ist auch hier die Grundzustandsenergie keine monotone Funktion von m , was bedeutet, daß die DMRG auch hier keine obere Schranke für den exakten Eigenwert liefert.

Abbildung 5.3 zeigt die Grundzustandsenergie pro Spin für Systeme mit verschiedenen Werten von r als Funktion der inversen Kettenlänge $1/L$. Für alle endlichen Werte von r wurden die Rechnungen mit 128 Zuständen der Dichtematrix ausgeführt. Diese Zahl erwies sich als ausreichend, um den Trunkierungsfehler für die größten hier dargestellten Systeme (etwa 100 Plätze) kleiner als 10^{-10} zu halten. Für den Grenzfall $r = \infty$ genügten 64 Zustände. Durch den Vergleich mit exakten Werten für kurze Ketten hat sich gezeigt, daß auch hier der Trunkierungsfehler und der reale Fehler in der Grundzustandsenergie von der gleichen Größenordnung sind.

Die Symbole in Abb. 5.3 kennzeichnen Datenpunkte aus den Rechnungen von Sierra et al. [80], in denen mit einer hermiteschen Darstellung des Hamilton-Operators (5.2) und 160 Zuständen der Dichtematrix gearbeitet wurde. Die von uns erhaltenen Energien stimmen mit diesen Werten auf bis zu neun Dezimalstellen überein.

Wie bei der gewöhnlichen Heisenberg-Kette (vgl. Abschnitt 3.2) hat auch hier die Grundzustandsenergie allgemein die Form

$$\varepsilon = \frac{E}{L} = \varepsilon_\infty + \frac{B}{L} - \frac{C}{L^2}, \quad (5.12)$$

die sich aus einem nicht universellen Anteil, $\varepsilon_\infty + B/L$, und einem universellen Anteil, C/L^2 , zusammensetzt. Man erkennt in Abb. 5.3 sowohl den linearen Verlauf für große Kettenlängen als auch die Krümmung bei kleineren Werten von L .

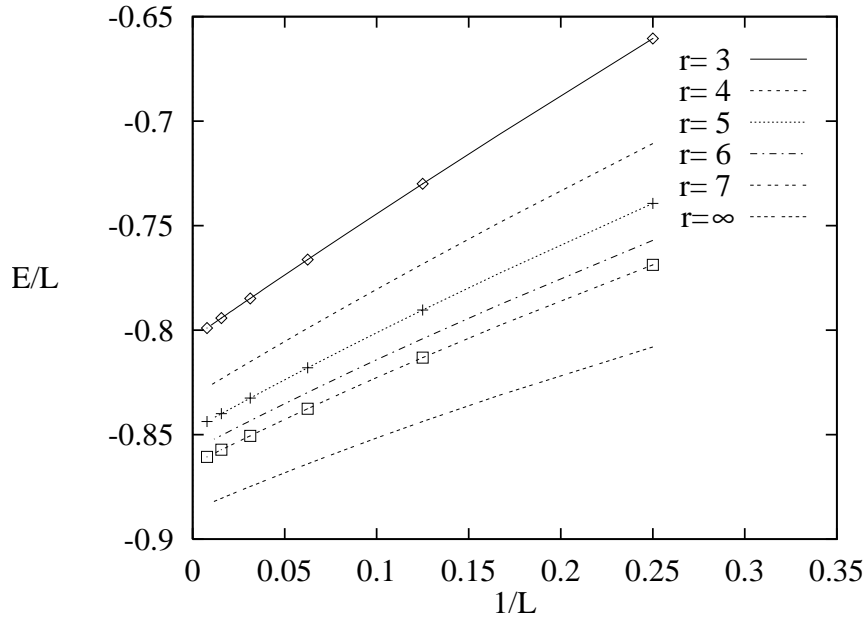


Abbildung 5.3: Grundzustandsenergien pro Platz für verschiedene Werte von r , berechnet mit 128 Zuständen (für $r = \infty$ mit 64 Zuständen). Die Symbole markieren Ergebnisse aus [80].

5.3 Korrelationsfunktionen und kritische Exponenten

5.3.1 Die g -Operatoren

Normalerweise sind die Spin-Spin-Korrelationsfunktionen in einer Quantenspinkette am kritischen Punkt die interessanten Größen. Für das q -symmetrische Heisenberg-Modell sind die herkömmlichen Zwei-Punkt-Spinoperatoren

$$g_{lm} = -\frac{1}{2}\sigma_l\sigma_m \quad (5.13)$$

(mit den Pauli-Matrizen $\sigma_i = (\sigma_i^x, \sigma_i^y, \sigma_i^z)$), die zur Berechnung von Korrelationsfunktionen herangezogen werden, aber keine Invarianten der Symmetrie $U_q[SU(2)]$ mehr. Man benötigt statt dessen q -symmetrische Verallgemeinerungen dieses Skalarprodukts [81]. Ausgehend von der Darstellung mittels Spinmatrizen erhält man sehr komplizierte Ausdrücke, die in einer praktischen Rechnung wenig nützlich sind. Diese verallgemeinerten g -Operatoren sind nichtlokale Objekte, die Strings von Spinoperatoren enthalten.

Nutzt man die Eigenschaften der Temperley-Lieb-Algebra, so lassen sich die g -Operatoren in einfacher Weise allein aus den e_i aufbauen. Man erhält [81]

$$g_{lm}^{\pm} = c_{lm}^{\pm} - \frac{1}{q + q^{-1}} \quad (5.14)$$

mit

$$c_{lm}^{\pm} = b_{m-1}^{\pm} b_{m-2}^{\pm} \cdots b_{l+1}^{\pm} e_l b_{l+1}^{\mp} \cdots b_{m-2}^{\mp} b_{m-1}^{\mp} \quad (5.15)$$

$$b_i^{\pm} = q^{\pm 1} - e_i. \quad (5.16)$$

Darüber hinaus lassen sie sich in jede beliebige Darstellung der zugrundeliegenden Algebra übersetzen. In den Fällen $r = 3$ und $r = 5$ sind solche alternativen Darstellungen durch das kritische transversale Ising-Modell und das Drei-Zustands-Potts-Modell mit $L/2$ Gitterplätzen und offenen Randbedingungen gegeben. In diesen Fällen gilt

$$\langle g_{lm}^+ \rangle = \langle g_{lm}^- \rangle, \quad (5.17)$$

so daß im folgenden der hochgestellte Index weggelassen werden kann. Außerdem sind die Erwartungswerte der g -Operatoren reell [82,83].

5.3.2 Der Ising-Fall

Für den Spezialfall $r = 3$ gibt es eine Darstellung mit Hilfe der Pauli-Matrizen in der Form [81]

$$e_{2i} = \frac{1}{\sqrt{2}} (1 + \sigma_i^x \sigma_{i+1}^x) \quad (5.18)$$

$$e_{2i-1} = \frac{1}{\sqrt{2}} (1 + \sigma_i^z). \quad (5.19)$$

Daraus ergibt sich nach (5.1)

$$H = -\frac{1}{\sqrt{2}} \left(\sum_{i=1}^{L/2-1} \sigma_i^x \sigma_{i+1}^x + \sum_{i=1}^{L/2} \sigma_i^z \right) - \frac{L-1}{\sqrt{2}}. \quad (5.20)$$

Das ist der Hamilton-Operator einer Ising-Kette mit $L/2$ Gitterplätzen in einem transversalen Feld. Dieser Operator einer eindimensionalen Quantenspinkette ist mit der Transfermatrix des zweidimensionalen klassischen Ising-Modells verknüpft [8].

Durch eine Jordan-Wigner-Transformation (siehe Anh. B) kann man von den Spinoperatoren σ_i^{α} , $\alpha = x, z$ zu Operatoren d_i und d_i^{\dagger} übergehen, die die fermionischen Vertauschungsrelationen erfüllen. Die g -Operatoren (5.14) schreiben sich dann

als Produkte aus diesen fermionischen Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren, und man erhält zum Beispiel

$$\langle g_{2i-1, 2k} \rangle = -\frac{1}{\sqrt{2}}(-1)^{i+k} \langle (d_i^\dagger + d_i)(d_k^\dagger - d_k) \rangle \quad (5.21)$$

$$\langle g_{2i, 2k-1} \rangle = -\frac{1}{\sqrt{2}}(-1)^{i+k} \langle (d_i^\dagger - d_i)(d_k^\dagger + d_k) \rangle. \quad (5.22)$$

Rechnet man die Korrelationsfunktionen explizit aus [64], so ergibt sich

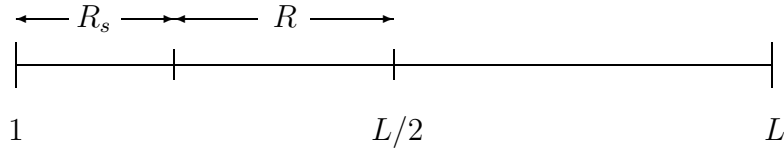
$$\langle g_{2j, 2k} \rangle = \langle g_{2j-1, 2k-1} \rangle = 0 \quad (5.23)$$

und

$$\langle g_{2j, 2k-1} \rangle = -\frac{2\sqrt{2}}{L+1} \sum_{n=0}^{L/2-1} \sin\left(\pi \frac{2n+1}{L+1} j\right) \cos\left(\pi \frac{2n+1}{L+1} \left(k - \frac{1}{2}\right)\right) \quad (5.24)$$

$$\langle g_{2j-1, 2k} \rangle = \frac{2\sqrt{2}}{L+1} \sum_{n=0}^{L/2-1} \sin\left(\pi \frac{2n+1}{L+1} k\right) \cos\left(\pi \frac{2n+1}{L+1} \left(j - \frac{1}{2}\right)\right). \quad (5.25)$$

Diese beiden Funktionen zeigen unterschiedliches Verhalten an den Rändern der Kette. Während (5.21) endlich bleibt, verschwindet (5.22) dort. Da es sich um ein kritisches System handelt, zeigen die Korrelationsfunktionen bei fester Kettenlänge einen algebraischen Abfall mit dem Abstand der beiden Gitterplätze. Sei g der Wert der Korrelationsfunktion im Kontinuums-Grenzfall und R, R_s der Abstand im Innern bzw. vom Rand der Kette,



so gilt im Innern (Vergleiche dazu auch die Diskussion im Abschnitt 3.3.)

$$g \sim R^{-2x} \quad (5.26)$$

und in der Nähe des Randes

$$g \sim \frac{R_s^{x_s-x}}{R^{x_s+x}}, \quad (5.27)$$

wobei x und x_s die kritischen Exponenten im Volumen bzw. an der Oberfläche sind. Geht man in den analytischen Resultaten (5.24) und (5.25) zur Kontinuumsbeschreibung über, so kann man die kritischen Exponenten bestimmen. Man bekommt

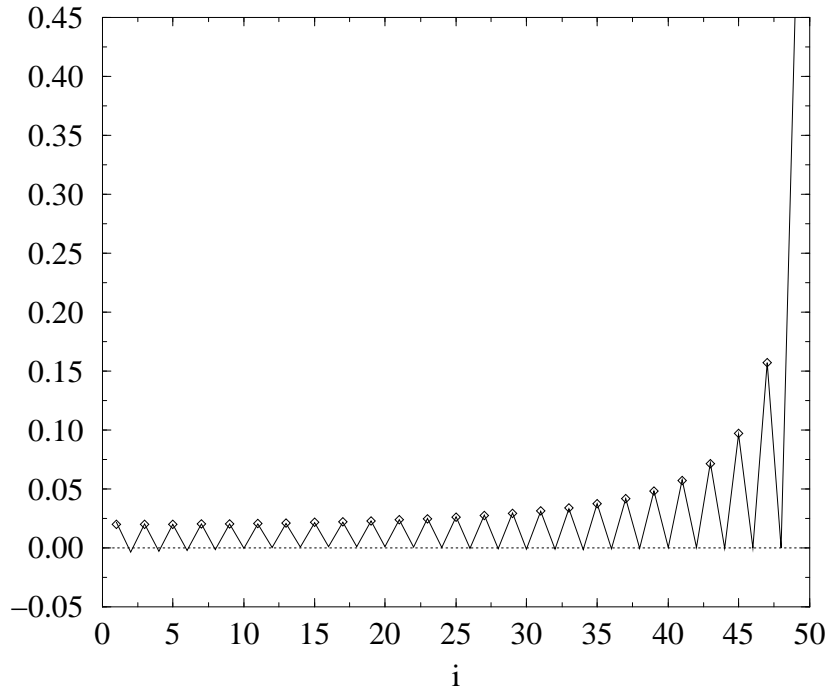


Abbildung 5.4: Zwei-Punkt-Korrelationsfunktion einer Kette von 100 Plätzen für $r = 3$ (Ising-Fall) als Funktion des Abstandes vom Rand, berechnet mit 200 Zuständen. Die Symbole kennzeichnen exakte Resultate nach (5.25).

$x = 1/2$ für beide Funktionen, sowie $x_s = 1/2$ und $x_s = 3/2$ für die Funktion (5.21) bzw. (5.22).

Wir haben nun aufwendige DMRG-Rechnungen ($m = 200$) für Systeme von maximal 100 Plätzen durchgeführt und Korrelationsprofile der Art $\langle g_{iL/2} \rangle$ mit $i = 1, \dots, L/2 - 1$ berechnet [32], um aus dem Verhalten dieses Profils in der Nähe der Oberfläche bzw. im Innern der Kette die beiden kritischen Exponenten zu bestimmen.² Abbildung 5.4 zeigt ein typisches Profil für eine Kette von 100 Plätzen als Funktion des Abstandes i vom Rand der Kette zusammen mit den exakten Werten. In Übereinstimmung mit (5.23) sollte an jedem zweiten Platz die Korrelationsfunktion verschwinden. Vergleicht man mit den exakten Werten, so sieht man, daß der Fehler in den Korrelationen am Rand der Kette von der Größenordnung 10^{-3} und

²Um in vertretbarer Zeit Resultate zu erhalten, konnten wir maximal 200 Zustände der Dichtematrix berücksichtigen. Das bedeutete, daß eine vollständige Rechnung zu einem festen Wert von r mehrere Wochen an CPU-Zeit auf modernen DEC-Alpha Workstations benötigte. Der Speicherbedarf für die zahlreichen Matrizen belief sich dabei auf 250-300 Megabyte Hauptspeicher und zeitweilig bis zu 500 Megabyte Festplatten-Speicher.

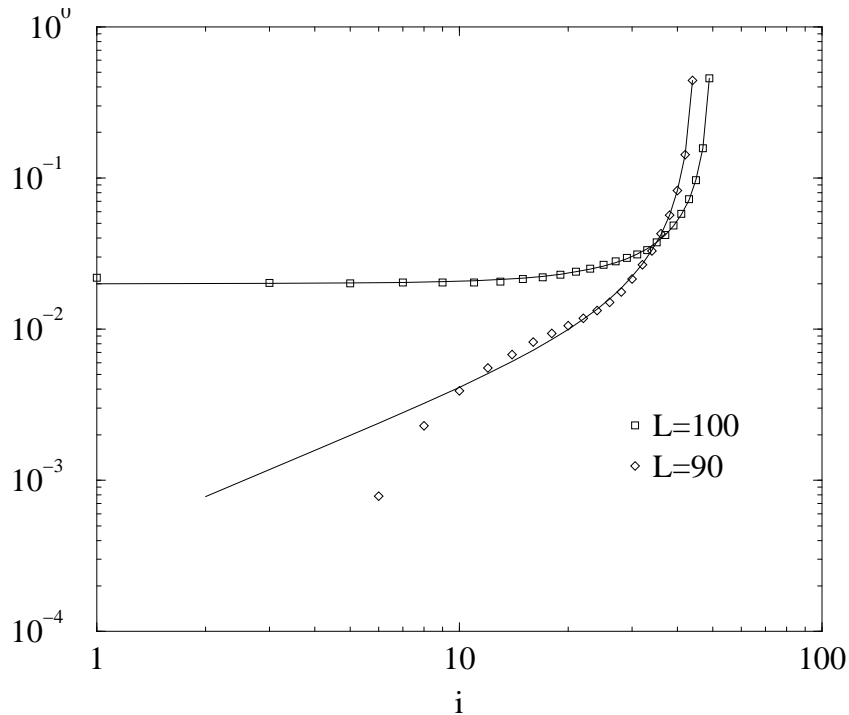


Abbildung 5.5: Doppelt logarithmische Darstellung der zwei Korrelationsfunktionen zweier unterschiedlich langer Ketten für $r = 3$ (Ising-Fall) als Funktion des Abstandes vom Rand, berechnet mit 200 Zuständen. Die Kurven kennzeichnen exakte Resultate nach (5.24) und (5.25).

im Innern 10^{-4} ist. Obwohl der Trunkierungsfehler wie in den Rechnungen zum herkömmlichen Heisenberg-Modell von der Größenordnung 10^{-14} bis 10^{-15} ist, ist der wirkliche Fehler in den Korrelationsfunktionen erheblich größer als im hermiteschen Fall. Noch besser sieht man die Güte der numerischen Ergebnisse in einer doppelt logarithmischen Darstellung wie in Abb. 5.5. Dort sind die Maxima des Profils für zwei verschiedene Kettenlängen zusammen mit exakten Werten dargestellt. An den Kurven, die den analytischen Resultaten entsprechen, erkennt man genau das unterschiedliche Verhalten der beiden Korrelationsfunktionen (5.21) und (5.22) in der Nähe der Oberfläche. Die numerischen Werte jedoch weichen am Rand so stark ab, daß eine Bestimmung des kritischen Exponenten der Oberfläche aus dieser Darstellung nicht möglich ist.

Da im Laufe der DMRG-Prozedur die Größen in der Nähe des Randes der Kette mehr Trunkierungsschritte durchlaufen haben, als die Größen im Volumen, sollten die Resultate im Innern der Kette besser sein. Abbildung 5.6 zeigt die numerischen

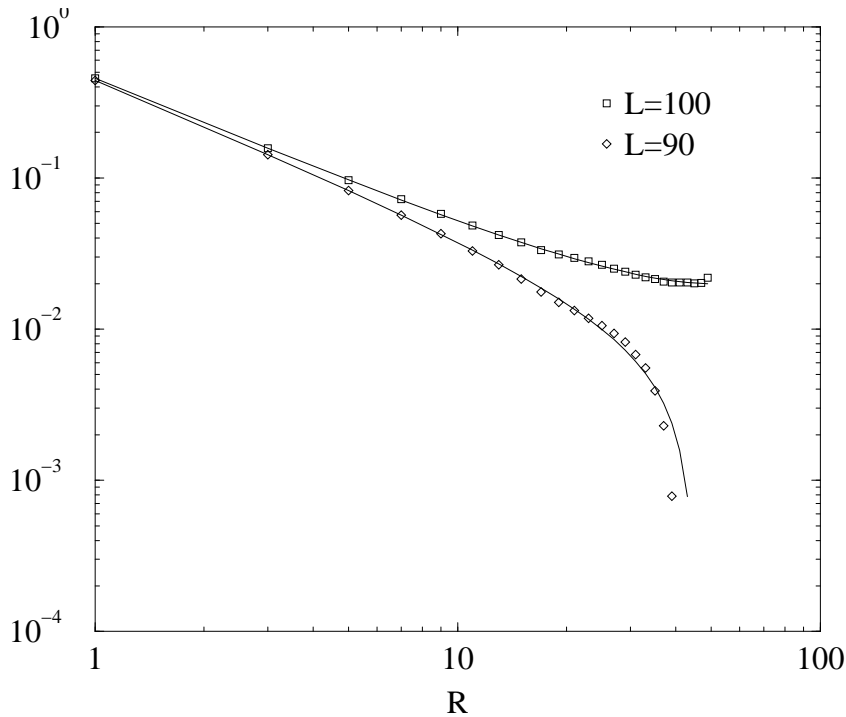


Abbildung 5.6: Wie Abb. 5.5 jedoch als Funktion des Abstandes von der Mitte ($R = L/2 - i$).

und die analytischen Resultate für die beiden Korrelationsfunktionen in Abhängigkeit vom Abstand von der Mitte der Kette. Diesmal ist die Übereinstimmung besser, ein linearer Fit an die numerischen Daten ergibt jedoch einen Volumenexponenten, der immer noch um etwa 5% vom exakten Wert $1/2$ abweicht. Um die Genauigkeit weiter zu verbessern, kann man die Skaleninvarianz der Korrelationsfunktion ausnutzen und eine Finite-Size-Scaling-Analyse durchführen. Da sich das System am kritischen Punkt befindet, ist die einzige typische Längenskala die Systemgröße. Wir schreiben darum in Übereinstimmung mit (5.26) die Korrelationsfunktion g im Kontinuums-Grenzfall in der Form

$$g(R, L) = \frac{1}{R^{2x}} F\left(\frac{R}{L}\right) \quad (5.28)$$

mit einer unbekanntem Skalenfunktion F mit der Eigenschaft $F(R/L) \rightarrow \text{const}$ für $R/L \rightarrow 0$. Den Exponenten bestimmt man nun, indem man Ergebnisse zu verschiedenen Systemgrößen zusammenfaßt und x so lange variiert, bis die Daten in einer Darstellung $\langle g_{i_{L/2}} \rangle R^{2x}$ gegen R/L so gut wie möglich auf einer Kurve zusammenfallen. Ein solcher Skalenplot ist in Abb. 5.7 für vier verschiedene Systemlängen darge-

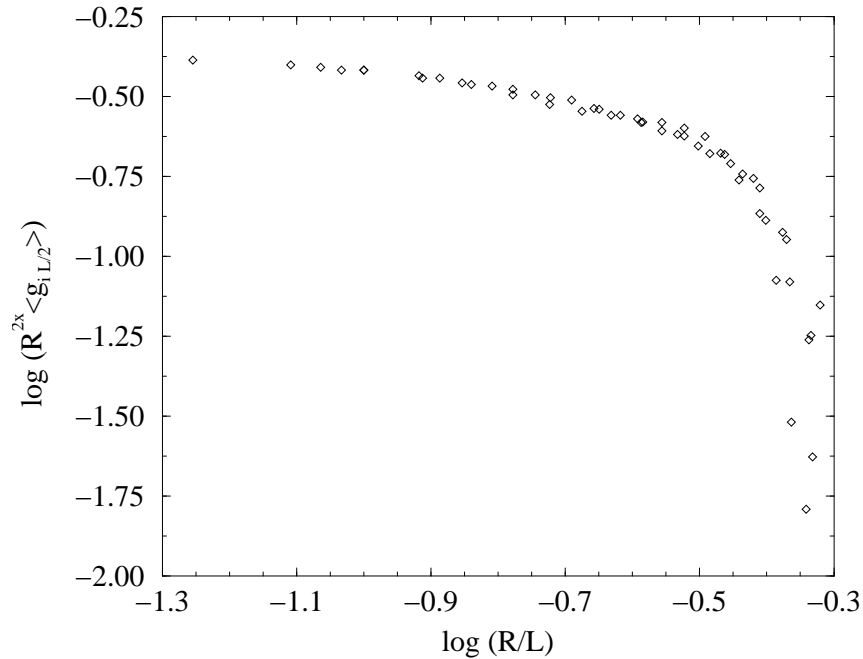


Abbildung 5.7: Skalverhalten der Maxima der Rand-Volumen-Korrelationsfunktion $\langle g_{i L/2} \rangle$ für $r = 3$ (Ising-Fall) im Innern der Kette ($R = L/2 - i$). Dargestellt sind Daten für vier verschiedene Systemgrößen, $L = 50, 54, 58$ und 90 , der Funktion (5.22).

stellt. In der Mitte der Kette ist die Skalenform (5.28) sehr gut erfüllt. In [83] wurde der Ising-Fall des q -symmetrischen Heisenberg-Modells für Kettenlängen bis zu 40 Spins durch exakte Diagonalisierung behandelt. Dabei konnten das oben beschriebene Skalverhalten und der exakt bekannte Volumenexponent $1/2$ reproduziert werden. Unsere Resultate stimmen mit den in [83] gefundenen sehr gut überein. Die Abweichungen unserer Ergebnisse am Rand erklären sich aus den großen Fehlern, mit denen die Daten für größere Werte von R behaftet sind.

Der aus dieser Darstellung ermittelte Exponent weicht nur noch um etwa 2% vom exakten Wert ab. Für den Volumenexponenten kann man die Resultate noch verbessern, indem man die Daten zu festen Werten von R sammelt und als Funktion von $1/L$ nach $L \rightarrow \infty$ extrapoliert. Durch einen Fit an die so erhaltenen Werte im thermodynamischen Grenzfall bekommt man $x = 0.502$ für die Funktion (5.21) und $x = 0.499$ für (5.22).

Für die Bestimmung des Oberflächenexponenten verwendet man eine andere

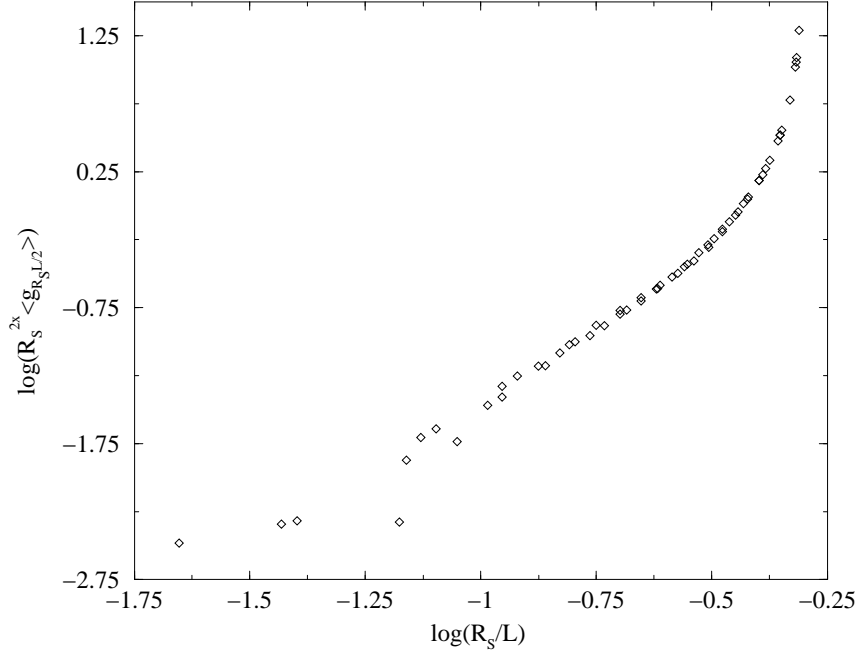


Abbildung 5.8: Wie Abb. 5.7 jedoch am Rand der Kette ($R_s = i$).

Skalenform gemäß (5.27). Mit $R \simeq L/2$ schreibt man

$$R_s^{2x} g(R_s, L) = \left(\frac{R_s}{L}\right)^{x_s+x} G\left(\frac{R_s}{L}\right) \quad (5.29)$$

mit einer anderen Skalenfunktion G mit der Eigenschaft $G(R_s/L) \rightarrow const$ für $R_s/L \rightarrow 0$. Verwendet man den Volumenexponenten, der oben bestimmt wurde, dann kann man nun x_s so lange variieren, bis das Skalenverhalten (5.29) erfüllt ist. Ein entsprechender Skalenplot ist in Abb. 5.8 dargestellt. Da die Daten in der Nähe der Oberfläche aber mit sehr großen Fehlern behaftet sind, führt diese Methode auf keine sehr genauen Werte für den Exponenten. Wir erhalten $x_s = 1.58$ (exakt $3/2$) für die Funktion (5.21) und $x_s = 0.56$ (exakt $1/2$) für (5.22).

Für den Ising-Fall lassen sich auch die herkömmlichen Spin-Spin-Korrelationsfunktionen $\langle \sigma_i^x \sigma_{i+j}^x \rangle$ über die Operatoren e_i gewinnen, indem man die Darstellung (5.18) und die Eigenschaft $(\sigma^x)^2 = 1$ benutzt. Man bekommt dann

$$\langle \sigma_i^x \sigma_{i+1}^x \rangle = \langle (\sqrt{2}e_{2i} - 1) \rangle \quad (5.30)$$

$$\langle \sigma_i^x \sigma_{i+2}^x \rangle = \langle (\sqrt{2}e_{2i} - 1) (\sqrt{2}e_{2i+2} - 1) \rangle \quad (5.31)$$

$$\begin{aligned} & \vdots \\ & \vdots \\ \langle \sigma_i^x \sigma_{i+j}^x \rangle &= \left\langle \prod_{k=i}^{i+j-1} (\sqrt{2}e_{2k} - 1) \right\rangle. \end{aligned} \quad (5.32)$$

Für diese Korrelationen sind die kritischen Exponenten bekannt [84]. Der exakte Wert lautet

$$x + x_s = \frac{1}{8} + \frac{1}{2} = \frac{5}{8} = 0,6125. \quad (5.33)$$

Mit Hilfe der DMRG ergab sich bei einer einfachen Rechnung mit 64 Zuständen der Dichtematrix

$$x + x_s \simeq 0,605. \quad (5.34)$$

5.3.3 Der Potts-Fall

Für den Spezialfall $r = 5$ kann man ebenfalls eine alternative Darstellung der Größen (5.2) finden [81]:

$$e_{2i} = \frac{1}{\sqrt{3}} (1 + \Gamma_i \Gamma_{i+1}^\dagger + \Gamma_i^\dagger \Gamma_{i+1}) \quad (5.35)$$

$$e_{2i-1} = \frac{1}{\sqrt{3}} (1 + \tau_i + \tau_i^\dagger), \quad (5.36)$$

mit

$$\tau = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \omega & 0 \\ 0 & 0 & \omega^2 \end{pmatrix}, \quad \Gamma = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (5.37)$$

Nach Summation gemäß (5.1) ergibt sich daraus der Hamilton-Operator eines Potts-Modells mit drei Zuständen und $L/2$ Gitterplätzen

$$H = -\frac{1}{\sqrt{3}} \left(\sum_{i=1}^{L/2-1} (\Gamma_i \Gamma_{i+1}^\dagger + \Gamma_i^\dagger \Gamma_{i+1}) + \sum_{i=1}^{L/2} (\tau_i + \tau_i^\dagger) \right) - \frac{L-1}{\sqrt{3}}. \quad (5.38)$$

Der Ausdruck unter der ersten Summe entspricht der Spin-Spin-Wechselwirkung, der unter der zweiten dem transversalen Feld im Ising-Modell (vgl. (5.20)).

Man kann nun analog zur Jordan-Wigner-Transformation beim Ising-Modell die Operatoren

$$\Pi_i = \left(\prod_{l=1}^{i-1} \tau_l \right) \Gamma_i \quad \text{und} \quad Q_i = \Gamma_i^\dagger \left(\prod_{l=1}^i \tau_l^\dagger \right) \quad (5.39)$$

einführen [85]. Dies entspricht dem Übergang von den Pauli-Matrizen zu den Fermi-Operatoren beim Heisenberg- oder Ising-Modell. Allerdings erfüllen die Π_i und Q_i kompliziertere Vertauschungsrelationen und werden als parafermionische Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren bezeichnet. Auf diese Weise werden aus den g -Operatoren (5.14) parafermionische Zwei-Punkt-Operatoren

$$g_{2i\ 2k} = \frac{1}{\sqrt{3}} (\omega Q_i Q_k^\dagger + \omega^2 Q_k Q_i^\dagger) \quad (5.40)$$

$$g_{2i\ 2k-1} = \frac{1}{\sqrt{3}} (Q_i \Pi_k + \Pi_k^\dagger Q_i^\dagger) \quad (5.41)$$

$$g_{2i-1\ 2k} = \frac{1}{\sqrt{3}} (\Pi_i Q_k + Q_k^\dagger \Pi_i^\dagger) \quad (5.42)$$

$$g_{2i-1\ 2k-1} = \frac{1}{\sqrt{3}} (\omega \Pi_i \Pi_k^\dagger + \omega^2 \Pi_k \Pi_i^\dagger). \quad (5.43)$$

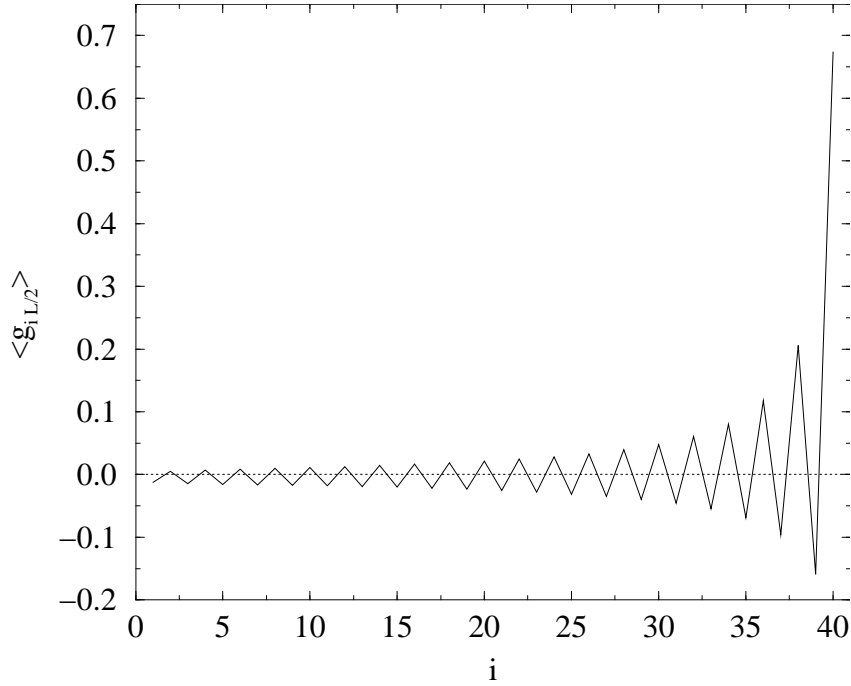


Abbildung 5.9: Zwei-Punkt-Korrelationsfunktion einer Kette von 82 Plätzen für $r = 5$ (Potts-Fall) als Funktion des Abstandes vom Rand, berechnet mit 200 Zuständen.

Im Gegensatz zum Ising-Fall ($r = 3$) lassen sich nun nicht die herkömmlichen Spin-Spin-Korrelationsfunktionen gewinnen, da die Matrizen Γ und τ nicht mehr

so einfache Eigenschaften wie die Pauli-Matrizen besitzen. Auch Profile des Ordnungsparameters, wie sie durch eine direkte DMRG-Rechnung für das Potts-Modell bestimmt wurden [86], können nicht erhalten werden. Allerdings sind auch die parafermionischen Korrelationen, die man aus (5.40) bis (5.43) berechnen kann, von Interesse. Man kann sie nämlich als Korrelationsfunktionen von Operatoren ansehen, die Spinoreigenschaften haben und die in der Literatur bereits diskutiert wurden [87].

Abbildung 5.9 zeigt ein typisches Profil der Korrelationsfunktion im Potts-Fall. Man sieht, daß nun auch die Funktionen $\langle g_{2i} 2k \rangle$ und $\langle g_{2i-1} 2k-1 \rangle$ von null verschieden sind und so vier Funktionen mit unterschiedlichen Exponenten behandelt werden müssen. Als einen Genauigkeitstest kann man mit exakten Ergebnissen für eine kurze Kette von 24 Plätzen vergleichen [82]. Man findet dann Abweichungen kleiner als 10^{-5} für alle Plätze i .

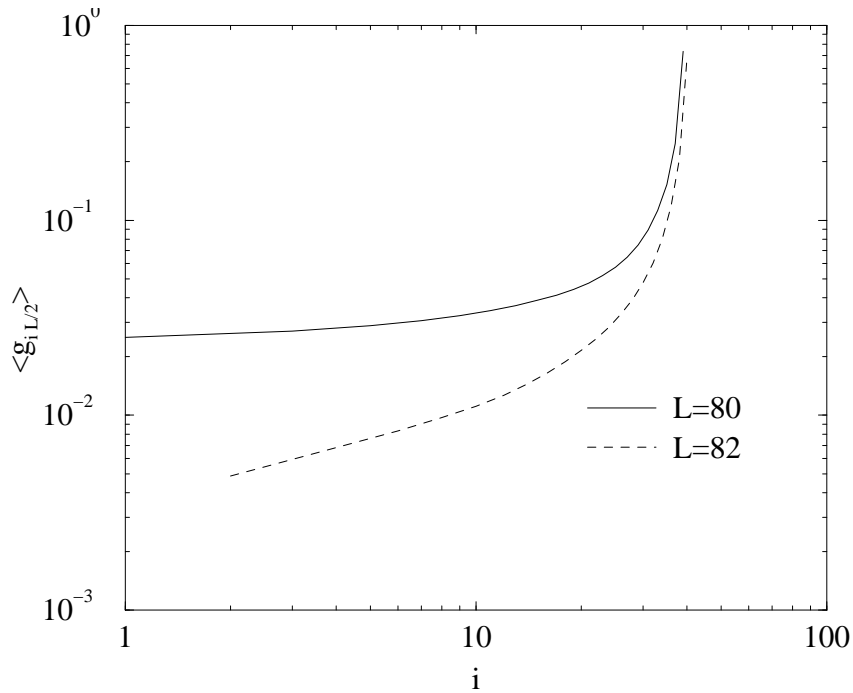


Abbildung 5.10: Doppelt logarithmische Darstellung der Maxima der Zwei-Punkt-Korrelationsfunktionen zweier unterschiedlich langer Ketten für $r = 5$ (Potts-Fall) als Funktion des Abstandes vom Rand, berechnet mit 200 Zuständen.

Um die kritischen Exponenten zu finden, kann man genauso vorgehen wie im Ising-Fall. Die Abb. 5.10 und 5.11 zeigen als Beispiel die Maxima der Korrelationsfunktionen jeweils als Funktion des Abstandes vom Rand der Kette bzw. von der Mitte. Man sieht deutlich das unterschiedliche Verhalten der Funktionen in der Nähe

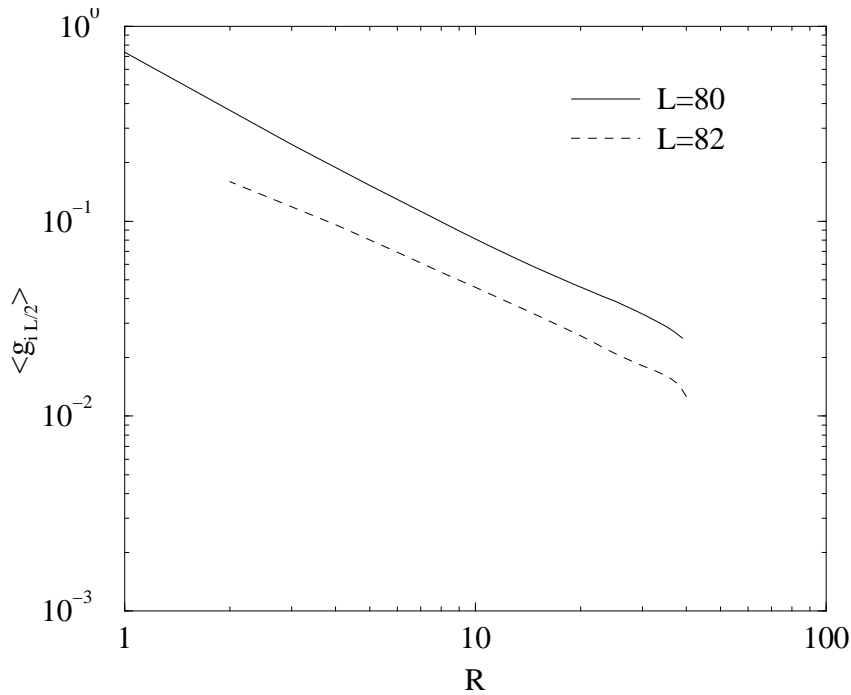


Abbildung 5.11: Wie Abb. 5.10 jedoch als Funktion des Abstandes von der Mitte ($R = L/2 - i$).

der Oberfläche. Wie im Ising-Fall hat man eine Funktion, die an der Oberfläche verschwindet, und eine, die einen endlichen Wert annimmt. Darüber hinaus ist zu erkennen, daß die Funktionen auch näher am Rand der Kette ihren algebraischen Abfall beibehalten. Das ist in Übereinstimmung mit dem Dichtematrixspektrum aus Abb. 5.1, nach dem der Fall $r = 5$ besser für die DMRG-Methode geeignet sein sollte als der Fall $r = 3$.

Verwendet man nun die Skalenformen (5.28) und (5.29), dann kann man durch eine Skalenanalyse die kritischen Exponenten bestimmen. In [83] konnten für $r = 5$ nur Ketten mit maximal 28 Spins behandelt werden. Da für diese kurzen Ketten der Einfluß der endlichen Kettenlänge zu groß ist, konnte dort das Skalenverhalten der Korrelationsfunktionen nicht bestätigt werden. Die Abb. 5.12 und 5.13, in denen die Resultate unserer DMRG-Rechnung dargestellt sind, beweisen, daß das Skalenverhalten der Korrelationsfunktionen tatsächlich sehr gut erfüllt ist. Die Daten fallen mit hoher Genauigkeit auf einer Kurve zusammen. Nach den Erfahrungen mit dem Ising-Fall $r = 3$ sollten sich die Werte für die Volumenexponenten noch verbessern, wenn man die Daten zu unendlichen Systemgrößen hin extrapoliert und dann aus einem Fit die Exponenten bestimmt. Man erhält schließlich die folgenden Werte:

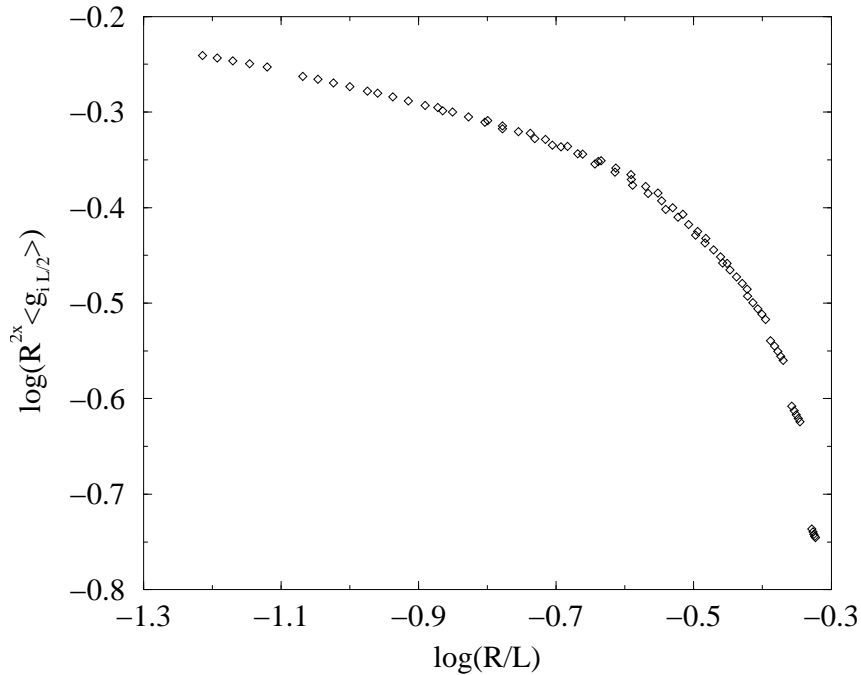


Abbildung 5.12: Skalverhalten der Maxima der Rand-Volumen-Korrelationsfunktion $\langle g_{i L/2} \rangle$ für $r = 5$ (Potts-Fall) im Innern der Kette ($R = L/2 - i$). Dargestellt sind Daten für fünf verschiedene Systemgrößen, $L = 66, 70, 74, 78$ und 82 .

	x
$\langle g_{2i 2k} \rangle$	0.397
$\langle g_{2i 2k-1} \rangle$	0.520
$\langle g_{2i-1 2k} \rangle$	0.508
$\langle g_{2i-1 2k-1} \rangle$	0.409

Die numerischen Daten legen vier verschiedene Exponenten für die verschiedenen Funktionen (5.40) bis (5.43) nahe. Die Interpretation dieses Resultats macht allerdings einige Schwierigkeiten. Nach der Theorie der konformen Invarianz ergibt sich der kritische Volumenexponent immer als Kombination $x = \Delta + \bar{\Delta}$, wobei Δ und $\bar{\Delta}$, die sogenannten konformen Dimensionen, aus der Kac-Tabelle entnommen werden können [8]. Für $r = 5$ enthält die Kac-Tabelle zehn verschiedene konforme Dimensionen, von denen einige Exponenten liefern, die in der Nähe der numerischen Werte liegen. Fixiert man jedoch den Spin s der untersuchten Operatoren, so sind nicht mehr alle Kombinationen konformer Dimensionen möglich. Zum Beispiel bleiben für einfache Spinwerte nur $x = 11/20$ ($s = 1/2$), $x = 7/15$ ($s = 1/3$) und $x = 2/3$ ($s = 2/3$) übrig. Aus der Form der parafermionischen Operatoren (5.39)

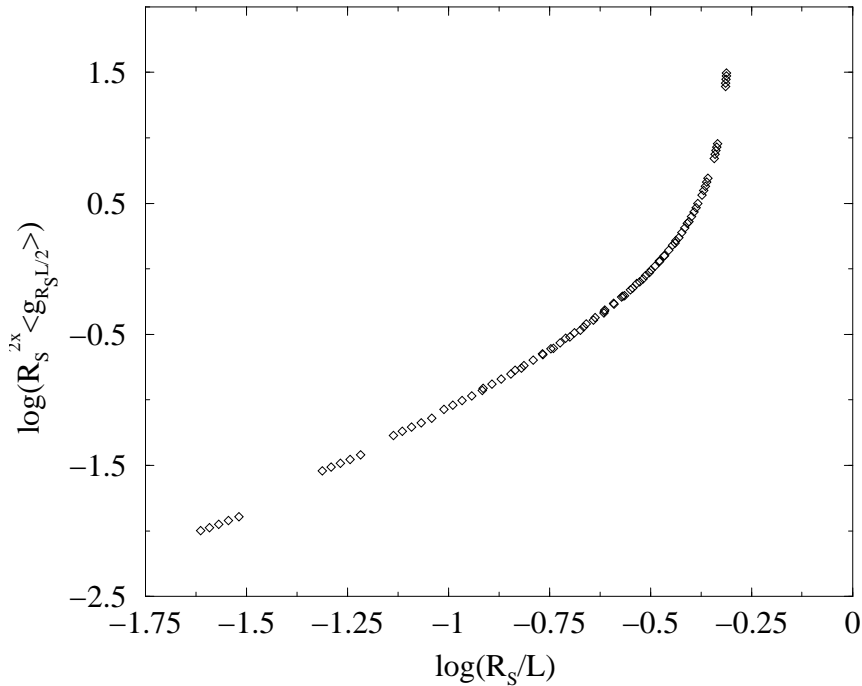


Abbildung 5.13: Wie Abb. 5.12 jedoch am Rand der Kette ($R_S = i$).

läßt sich ableiten, daß sie einen Spin $s = 1/3$ besitzen [87]. Darum würde man nur einen Exponenten $x = 0.467$ für alle vier Korrelationsfunktionen erwarten. Die numerischen Werte weichen jedoch um etwa 10% von diesem Wert ab. (Eine ähnliche Situation findet man für $r = 4$, was dem trikritischen Ising-Modell entspricht.)

Der Grund für diese Abweichungen ist nicht klar. Aus den Spektren der Dichtematrix und auch aus den Resultaten der Finite-Size-Scaling-Analyse würde man für den Potts-Fall eine höhere Genauigkeit der Resultate erwarten. Sollten die numerischen Werte jedoch tatsächlich zu ungenau sein, so ließe sich das durch die Anwendung des Finite-Size-Algorithmus der DMRG überprüfen. Eine solche Rechnung ist aber bisher noch nicht durchgeführt worden.

Die Oberflächenexponenten sind, wie bereits im Ising-Fall diskutiert wurde, ungenauer als die Volumenexponenten und werden daher hier nur mit zwei Dezimalstellen angegeben. Man erhält

	x_s
$\langle g_{2i\ 2k} \rangle$	0.81
$\langle g_{2i\ 2k-1} \rangle$	1.05
$\langle g_{2i-1\ 2k} \rangle$	0.63
$\langle g_{2i-1\ 2k-1} \rangle$	0.55

5.3.4 Abschließende Bemerkungen

Neben den beiden interessantesten Fällen $r = 3$ und $r = 5$ haben wir auch die Korrelationsfunktionen und die dazugehörigen kritischen Volumenexponenten für einige andere Werte des Parameters r berechnet. In der folgenden Tabelle sind alle Volumenexponenten noch einmal zusammengestellt.

r	$\langle g_{2j\ 2k} \rangle$	$\langle g_{2j\ 2k-1} \rangle$	$\langle g_{2j-1\ 2k} \rangle$	$\langle g_{2j-1\ 2k-1} \rangle$
3	-	0.499	0.502	-
4	0.386	0.521	0.513	0.406
5	0.397	0.520	0.508	0.409
6	0.392	0.516	0.502	0.417
7	0.412	0.499	0.484	0.422

Die numerischen Daten für die Korrelationsfunktionen befinden sich im Anhang A.4. Die kritischen Exponenten nähern sich mit wachsendem r dem Wert für die isotrope Heisenberg-Kette, $x = 1/2$. Während jedoch die Exponenten für die Funktionen $\langle g_{2i\ 2k-1} \rangle$ und $\langle g_{2i-1\ 2k} \rangle$ fast immer über den Heisenberg-Werten liegen, nähern sie sich für die beiden anderen Funktionen von unten dem Grenzwert. Die genauen Werte im Grenzfall $q = 1$ ($r \rightarrow \infty$) sind wegen der logarithmischen Korrekturen, die in diesem Fall auftreten (siehe Abschnitt 3.3), nicht so leicht zu erhalten. Die Daten der Korrelationsfunktionen selbst stimmen für $q = 1$ mit Rechnungen an der gewöhnlichen Heisenberg-Kette überein.