

# Anwendung der Dichtematrix-Renormierung auf nichtthermitesche Probleme

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

vorgelegt von  
MATTHIAS KAULKE  
aus Eisenhüttenstadt

Berlin 1999

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

# Inhaltsverzeichnis

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

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

# Danksagung

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

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

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

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

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

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

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

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

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

