„Niño, niño – dijo con voz alta a esta sazón don Quixote – seguid vuestra historia en línea recta, y no os metáis en las curvas y transversales.“

M. de Cervantes

Kapitel 1

Einleitung

Eindimensionale Systeme sind theoretisch und experimentell interessant. Auf theoretischer Seite liegt ihre Bedeutung darin, daß es zahlreiche exakt lösbare Modelle gibt wie zum Beispiel das einfache Heisenberg-Modell. Sie sind aber auch experimentell interessant geworden, seit man viele reale Materialien, nicht zuletzt seit Entdeckung der Hochtemperatursupraleitung, finden konnte, die sich durch eindimensionale Modelle beschreiben lassen [1]. Sie stellen daher einen Bereich dar, der intensiv untersucht wurde und wird.

Seit der Lösung des einfachen Heisenberg-Modells durch Bethe [2] hat man verschiedene analytische Verfahren entwickelt, um Systeme in einer Dimension zu behandeln. Neben dem Bethe-Ansatz, der sich auf integrable Systeme anwenden läßt, kann man zum Beispiel Spinsysteme auf fermionische Systeme abbilden [3]. Fermionensysteme wiederum können auf bosonische Systeme abgebildet werden [4]. Andere Möglichkeiten ergeben sich durch die Renormierungsgruppentheorie [5,6] und Methoden aus der konformen Feldtheorie [7,8]. Die Zahl der Modelle, die sich auf diese Weise einfach analytisch lösen läßt, ist aber beschränkt. Darüber hinaus erlauben es die Bethe-Ansatz-Wellenfunktionen kaum, Erwartungswerte wie zum Beispiel Korrelationsfunktionen zu berechnen. Die Korrelationsfunktionen sind aber gerade interessant, da sie das physikalische Verhalten eines Systems charakterisieren. Ein Teil der Quantenketten besitzt zum Beispiel einen Grundzustand ohne weitreichende Ordnung aber mit algebraisch abfallenden Korrelationen, d.h. mit kritischem Verhalten. Darum wurden mit steigender Leistungsfähigkeit der Computer zunehmend numerische Methoden eingesetzt, um diese Systeme zu behandeln.

Für kurze Kettenlängen kann man den Hamilton-Operator numerisch exakt diagonalisieren. Da der Hilbert-Raum aber exponentiell mit der Systemgröße wächst, lassen sich so nur sehr kleine Systeme behandeln. Selbst mit den heute zur Verfügung stehenden leistungsstarken Computern kann man zum Beispiel Spin-1/2-Systeme selten für mehr als etwa 30 Spins exakt diagonalisieren. Interessiert man sich jedoch gerade für das Verhalten des Systems im Grenzfall unendlicher Kettenlängen, so bieten Verfahren zur exakten Diagonalisierung nur Ausgangspunkte für Extrapolationen.

Große Systeme kann man mit Monte-Carlo- [9,10] oder Quanten-Monte-Carlo-Methoden [11] behandeln. Diese Methoden sind jedoch bei langen Systemen mit merklichen statistischen Fehlern behaftet, die nur durch einen großen Aufwand an Rechenzeit kompensiert werden können. Darüber hinaus scheitert die Quanten-Monte-Carlo-Methode in einzelnen Fällen, insbesondere bei der Anwendung auf fermionische Systeme. Diese Probleme konnten bis heute nicht geklärt werden.

Zu diesen Methoden, die schon seit längerem bekannt sind, ist in jüngster Zeit ein neues Verfahren hinzugekommen. Ausgehend von den Ideen der Ortsraum-Renormierung von Wilson entwickelte White 1992 die Dichtematrix-Renormierung [12], DMRG[1]. Wie in der herkömmlichen Ortsraum-Renormierung wird auch in der DMRG das System in Blöcke zerlegt und dann in jedem Block ein reduzierter Satz von Basiszuständen erzeugt (vgl. Abschnitt 2.1). Die Dichtematrix-Renormierung stellt jedoch eine entscheidende Verbesserung dar, da sie von vornherein das Zusammenspiel eines Blockes mit seiner Umgebung zur Konstruktion der neuen Basiszustände berücksichtigt. Diese Konstruktion erfolgt mit Hilfe der quantenmechanischen Dichtematrix, woher die Methode ihren Namen hat. Die DMRG erlaubt es, Größen mit unglaublicher Genauigkeit (bis zu *zehn* Dezimalstellen in der Grundzustandsenergie!) für Systeme von bis zu mehreren hundert Gitterplätzen zu berechnen und vereint damit in gewissem Sinne die Vorteile von Verfahren zur exakten Diagonalisierung und von Monte-Carlo-Methoden.

Seit ihrer Erfindung hat sich die DMRG-Methode rasant weiterentwickelt. Allein 1997 sind etwa sechzig Artikel erschienen, die sich mit der Methode selbst oder ihrer Anwendung befassen. Von August bis September 1998 fand im Max-Planck-Institut für Physik komplexer Systeme in Dresden das allererste Treffen (ein Seminar kombiniert mit einem Workshop) statt, das sich ausschließlich mit der DMRG befaßte. Einen sehr guten Überblick über die Methode selbst und über ihre Anwendungen findet man in dem im Anschluß an das Treffen entstandenen Buch [13]. Darin befindet sich auch eine interessante persönliche Darstellung von White, wie es zur Entstehung der DMRG kam.

Bisher wurde die Dichtematrix-Renormierung hauptsächlich auf Quantensysteme oder Systeme mit fermionischen Wechselwirkungen (z.B. Hubbard-Modell) angewandt. Ein kurzer Überblick über das Anwendungsspektrum befindet sich im Abschnitt 2.7. Es gibt aber auch andere interessante Modelle in einer Dimension, die formal durch einen Hamilton-Operator dargestellt werden können, aber keine quan-

[1] In Anlehnung an die Bezeichnung Renormierungsgruppe der Theorie von Wilson bezeichnete White seine Methode als Dichtematrix-Renormierungsgruppe (DMRG). Da die DMRG jedoch (genausowenig wie die herkömmliche Renormierungstheorie) keine Gruppe im mathematischen Sinn darstellt, bezeichnen wir die Methode im folgenden nur als Dichtematrix-Renormierung. Wir behalten aber die Abkürzung DMRG bei, da sie in der Literatur ausschließlich so verwendet wird.

tenmechanischen Modelle sind, da der Operator hier nicht mehr hermitesch ist. Zu solchen Systemen gehören zum einen nichthermitesche Verallgemeinerungen von Quantenspinketten wie sie in den Kap. 4 und 5 diskutiert werden, aber auch klassische Systeme wie zum Beispiel Modelle, die das Hüpfen von klassischen Teilchen auf einer Kette beschreiben. Solche Hüpfmodelle kann man in eine Formulierung mittels Spinvariablen bringen, bei der zum Beispiel ein leerer Platz auf der Kette durch einen abwärts gerichteten Spin, ein besetzter Platz dagegen durch einen aufwärts gerichteten Spin dargestellt wird. Die zeitliche Entwicklung, die in diesen Systemen interessant ist, wird dann durch eine sogenannte Mastergleichung beschrieben, in der ein Zeitentwicklungsoperator auftritt, der formal einem Hamilton-Operator entspricht (vgl. Abschnitt 6.2). Der stationäre Zustand des klassischen Systems, korrespondiert dann zum Grundzustand dieses Hamilton-Operators. Aufgrund dieser Analogie zwischen den klassischen Hüpfmodellen und herkömmlichen Quantensystemen ist es naheliegend, die DMRG auch auf sie anzuwenden, um den stationären Zustand zu berechnen. Die Behandlung von nichthermiteschen Systemen mit Hilfe der DMRG ist Gegenstand dieser Arbeit.

Die vorliegende Arbeit ist aus drei Teilen aufgebaut. Im ersten Teil, bestehend aus den Kapiteln 2 und 3, wird die Methode selbst und ihre numerische Umsetzung erläutert und am Beispiel der antiferromagnetischen Heisenberg-Kette ihre Effizienz demonstriert. Die Heisenberg-Kette gilt oft als archetypisches Modell für die DMRG, da die Methode hier extrem genaue Resultate bei vergleichsweise geringem numerischen Aufwand liefert. Die Heisenberg-Kette ist damit ein gutes Modellsystem, um sich in die DMRG einzuarbeiten und mit den numerischen Einzelheiten vertraut zu werden. Sie war übrigens auch in der ersten Arbeit zur DMRG [12] Ausgangspunkt für die Beschäftigung mit der Methode. Ungeachtet dieser Tatsache können wir im Abschnitt 3.4 interessante neue Resultate für den Spezialfall des uniaxialen Heisenberg-Modells präsentieren. In diesem Fall, in dem die Kopplung zwischen den Spins in z-Richtung größer ist als in x- und y-Richtung, besitzt das Modell eine spontane Magnetisierung. Diese Magnetisierung wird über die Berechnung von geeignet gewählten Korrelationsfunktionen bestimmt. Diese Funktionen zeigen ein überraschendes und interessantes Verhalten.

Im uniaxialen Fall kann auch das Spektrum der Dichtematrix analytisch angegeben werden. Wie das geschieht, wird kurz im Abschnitt 3.4.1 diskutiert. Die Kenntnis des Dichtematrixspektrums ist für die DMRG von entscheidender Bedeutung, da der Abfall der Eigenwerte die Genauigkeit des Verfahrens bestimmt. Ein anderer Fall, in dem das Spektrum analytisch bekannt ist, ist der des ferromagnetischen Heisenberg-Modells, der im Abschnitt 6.3 diskutiert wird.

Der zweite Teil der Arbeit (Kap. 4 und 5) beschäftigt sich dann mit der Anwendung der DMRG auf nichthermitesche Probleme. Das Testmodell ist eine einfache nichthermitesche Verallgemeinerung der Heisenberg-Kette ohne z-Kopplung aber mit imaginären Feldern, die an den beiden Enden der Kette wirken, siehe Kap. 4. Im Kap. 5 sind dann Rechnungen zu einer anderen Verallgemeinerung des Heisenberg-Modells, der q-symmetrischen Heisenberg-Kette, dargestellt. Diese Kette ist wie das herkömmliche Heisenberg-Modell in einer Spin-1/2-Darstellung formuliert, enthält aber in Abhängigkeit von einem Parameter q eine ganze Reihe anderer Systeme, die normalerweise mit Hilfe größerer Spinwerte dargestellt werden. Es bietet sich also die Möglichkeit, eine Vielzahl von verschiedenen Modellen in ein und derselben Formulierung zu behandeln. Hier sind zum ersten Mal die verallgemeinerten Korrelationsfunktionen dieses Modells für große Kettenlängen und daraus ihre kritischen Exponenten berechnet worden.

Der dritte Teil der Arbeit,Kapitel 6, beschäftigt sich dann mit einem anderen Aspekt der DMRG, nämlich der Beziehung zwischen dem Auftreten von speziellen Grundzuständen und der Gestalt des Spektrums der Dichtematrix. Zunächst wird der Grundzustand im Ferromagneten am Beispiel der q-symmetrischen Kette diskutiert. Diese Kette kann zur Beschreibung eines klassischen Modells dienen, bei dem Teilchen mit einer Vorzugsrichtung in einer Dimension hüpfen. Führt man zusätzliche Terme ein, die es ermöglichen, daß Teilchen am Anfang der Kette in das System eindringen und es am Ende wieder verlassen können, so führt das Wechselspiel zwischen diesen Prozessen bei bestimmten Werten der verwendeten Parameter zur Ausbildung von speziellen Grundzuständen, sogenannten Matrixproduktzuständen (siehe Abschnitt 6.4), die im Spektrum der Dichtematrix zu sehen sind. Die Anwendung auf Nichtgleichgewichtsmodelle ist die neueste Erweiterung der DMRG-Methode.

In Kap. 7 sind die Ergebnisse der Arbeit noch einmal zusammenfassend dargestellt. Daran anschließend findet man im Anhang A eine Auswahl von numerischen Daten, die in den anderen Kapiteln verwendet wurden, und im Anhang B die analytische Lösung des Modells aus Kap. 4.