

# Kapitel 4

## Das nichthermitesche $XX$ -Modell

### 4.1 Das Modell

Nachdem in den vorangegangenen Kapiteln ausschließlich hermitesche Hamilton-Operatoren mit Hilfe der DMRG behandelt wurden, soll die Methode nun auch auf nichthermitesche Operatoren erweitert werden. Als ein erster Schritt bietet sich an, ein Modell zu berechnen, das sich noch analytisch lösen läßt. Wir betrachten dazu den Hamilton-Operator einer  $XX$ -Heisenberg-Kette mit imaginären Randfeldern

$$H = \sum_{j=1}^{L-1} \left( \sigma_j^x \sigma_{j+1}^x + \sigma_j^y \sigma_{j+1}^y + ih(\sigma_1^z - \sigma_L^z) \right), \quad (4.1)$$

wobei  $h$  eine beliebige positive reelle Zahl ist. Die  $\sigma_j^\alpha$ ,  $\alpha = x, y, z$ , sind die herkömmlichen Pauli-Spinmatrizen. Diese Kette ist eine der einfachsten nichthermiteschen Verallgemeinerungen einer gewöhnlichen Quantenspinkette. Für  $h = 0$  erhält man das hermitesche  $XX$ -Modell, das sich durch Abbildung auf ein Modell nicht wechselwirkender Fermionen [3] analytisch lösen läßt. Die Lösung des hermiteschen Modells kann man aber ohne weiteres auch auf den nichthermiteschen Fall  $h \neq 0$  verallgemeinern (siehe Anh. B) und erhält dann für die Grundzustandsenergie

$$E = \sum_{q \leq \pi/2} 2 \cos q, \quad (4.2)$$

wobei die erlaubten Werte für  $q$  aus der Gleichung

$$\sin [q(L + 1)] + h^2 \sin [q(L - 1)] = 0 \quad (4.3)$$

bestimmt werden müssen. Auf diese Weise hat man exakte Vergleichswerte, um die Genauigkeit der DMRG-Prozedur zu testen.

Das  $XX$ -Modell mit allgemeinen Randtermen, das als Spezialfall auch den Operator (4.1) enthält, ist vor kurzem im Detail studiert worden [75], wobei auch Korrelationsfunktionen und Erwartungswerte der Magnetisierung berechnet worden sind. In diesem Kapitel soll aber nur die Grundzustandsenergie betrachtet und mit den exakten Werten verglichen werden.

## 4.2 DMRG bei nichthermiteschen Matrizen

### 4.2.1 Wahl der Dichtematrix

Bei nichthermiteschen Operatoren ist der linke Eigenvektor  $\langle\Phi_L|$ , der aus der Beziehung

$$\langle\Phi_L|H = \langle\Phi_L|E \quad (4.4)$$

folgt, nicht hermitesch konjugiert zum rechten Eigenvektor  $|\Phi_R\rangle$ . Darum führt auch die Konstruktion der Dichtematrix auf analoge Art und Weise wie im hermiteschen Fall, nämlich aus linkem und rechtem Eigenvektor,

$$\tilde{\varrho} = |\Phi_R\rangle\langle\Phi_L| \quad (4.5)$$

auf eine nichthermitesche Matrix, die im allgemeinen komplexe Eigenwerte besitzt. Man kann die Matrix (4.5) also nicht mehr als statistischen Operator interpretieren, und die Eigenwerte sind nicht mehr die Gewichte, mit denen die zugehörigen Eigenvektoren zur Darstellung des Grundzustandes beitragen. Folglich ist die Matrix  $\tilde{\varrho}$  nicht für die DMRG bei nichthermiteschen Matrizen geeignet.

Darüber hinaus beruht die DMRG nicht auf speziellen Eigenschaften des Hamilton-Operators, sondern lediglich auf einer Prozedur zur Optimierung eines Grundzustandsvektors, z.B.  $|\Phi_R\rangle$  (siehe Kap. 2). Das bedeutet, daß unabhängig von den quantenmechanischen Eigenschaften der Dichtematrix diese nur eine Methode liefert, um relevante Zustände aus dem Hilbert-Raum auszuwählen. Darum verwenden wir die hermitesche Dichtematrix

$$\varrho = |\Phi_R\rangle\langle\Phi_R| \quad \langle\Phi_R| = |\Phi_R\rangle^\dagger, \quad (4.6)$$

um den rechten Grundzustandsvektor  $|\Phi_R\rangle$  anzunähern. Das Verfahren verläuft nun genauso wie im hermiteschen Fall: Aus (4.6) bildet man durch Summation über die Zustände des Teils 2 der Kette die reduzierte Dichtematrix  $\varrho_1$  (vgl. (2.16)). Ebenso verfährt man zur Konstruktion von  $\varrho_2$ . Die Eigenvektoren der reduzierten Dichtematrizen zu den  $m$  größten Eigenwerten dienen als neue Basisvektoren für die beiden Teile der Kette. Alle relevanten Operatoren werden dann in diese neuen Basen transformiert und das System um zwei Plätze vergrößert.

Die genaue Wahl der Dichtematrix ist jedoch immer noch ein Diskussionspunkt. In Rechnungen für Transfermatrizen [26,25] hat sich herausgestellt, daß die Wahl der hermiteschen Dichtematrix (4.6) schlechtere Ergebnisse liefert als die Verwendung von (4.5). Allerdings legen dort die numerischen Resultate nahe, daß das Spektrum von  $\varrho_1$  reell ist. Eventuell auftretende Imaginärteile sind auf numerische Fehler bzw. auf den Einfluß der Trunkierung infolge der DMRG-Prozedur zurückzuführen [25]. Ein analytischer Beweis für die Realität des Spektrums steht aber noch aus. Möglicherweise ist der Vorteil der nichthermiteschen Dichtematrix bei den Transfermatrix-Rechnungen darauf zurückzuführen, daß nicht direkt Eigenzustände optimiert werden, sondern Spuren, die in Erwartungswerten auftreten:

$$\langle \hat{O} \rangle = \langle \Phi_L | \hat{O} | \Phi_R \rangle = \text{Sp}(\tilde{\varrho} \hat{O}). \quad (4.7)$$

Eine genaue Begründung, warum die Transfermatrix-DMRG auch mit der Wahl (4.5) gut funktioniert, ist aber noch nicht erbracht worden.

Eigene Rechnungen am Hamilton-Operator (4.1) und am  $q$ -symmetrischen Heisenberg-Modell aus Kap. 5 haben ergeben, daß die Dichtematrix (4.5) komplexe Eigenwerte besitzt, wobei die Imaginärteile weder bei exakten Diagonalisierungen verschwinden noch vernachlässigbar klein sind. Auch Untersuchungen an Nichtgleichgewichtssystemen, die mit Hilfe eines Hamilton-Operators formuliert sind, [33] und Kap. 6, ergaben, daß nur die Wahl einer hermiteschen Dichtematrix sinnvolle Ergebnisse liefert.

Hermitesche Dichtematrizen analog zu (4.6) wurden ebenfalls in Rechnungen zum Quanten-Hall-Effekt [31,34] verwendet und lieferten sehr gute Ergebnisse.

## 4.2.2 Erwartungswerte

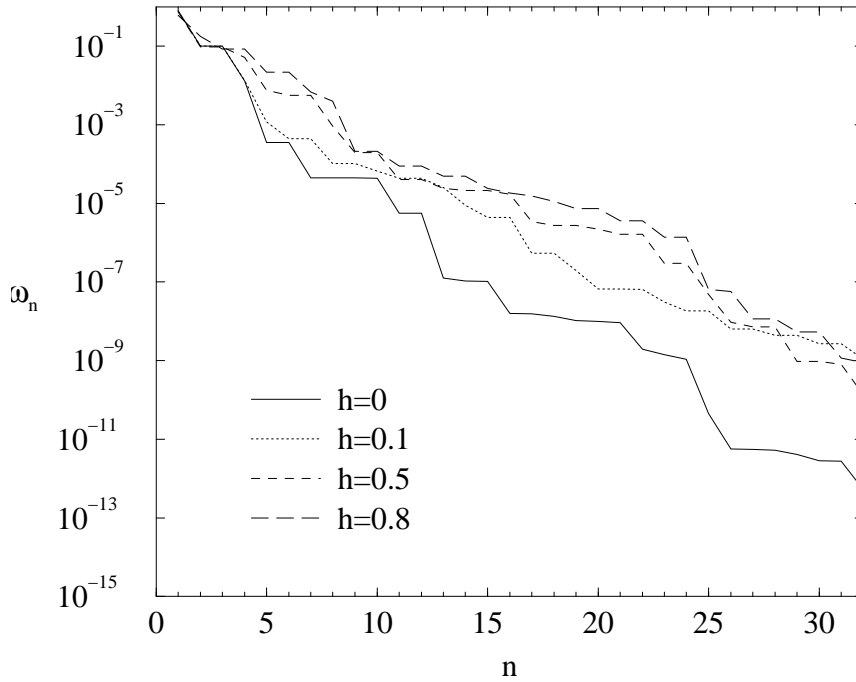
Erwartungswerte sind für beliebige Operatoren über die Beziehung

$$\langle \hat{O} \rangle = \langle \Phi_L | \hat{O} | \Phi_R \rangle \quad (4.8)$$

definiert. Gleichung (4.8) bedeutet, daß im Gegensatz zu hermiteschen Operatoren im allgemeinen sowohl der rechte als auch der linke Eigenvektor Zielzustand der DMRG sein müssen. Das kann man am einfachsten erreichen, indem man eine gemischte Dichtematrix (vgl. (2.29) ) der Form

$$\varrho_1 = \frac{1}{2} \sum_{ii'} \left\{ \Phi_{Lij} \Phi_{L'j}^* + \Phi_{Rij} \Phi_{R'j}^* \right\} |i\rangle_{11} \langle i'| \quad (4.9)$$

verwendet. Solche Dichtematrizen fanden zum Beispiel in [31,33,34] Verwendung. Es ist auch denkbar, die DMRG getrennt für den linken und den rechten Eigenvektor durchzuführen und in jedem Schritt den Überlapp zwischen den Basisvektoren der

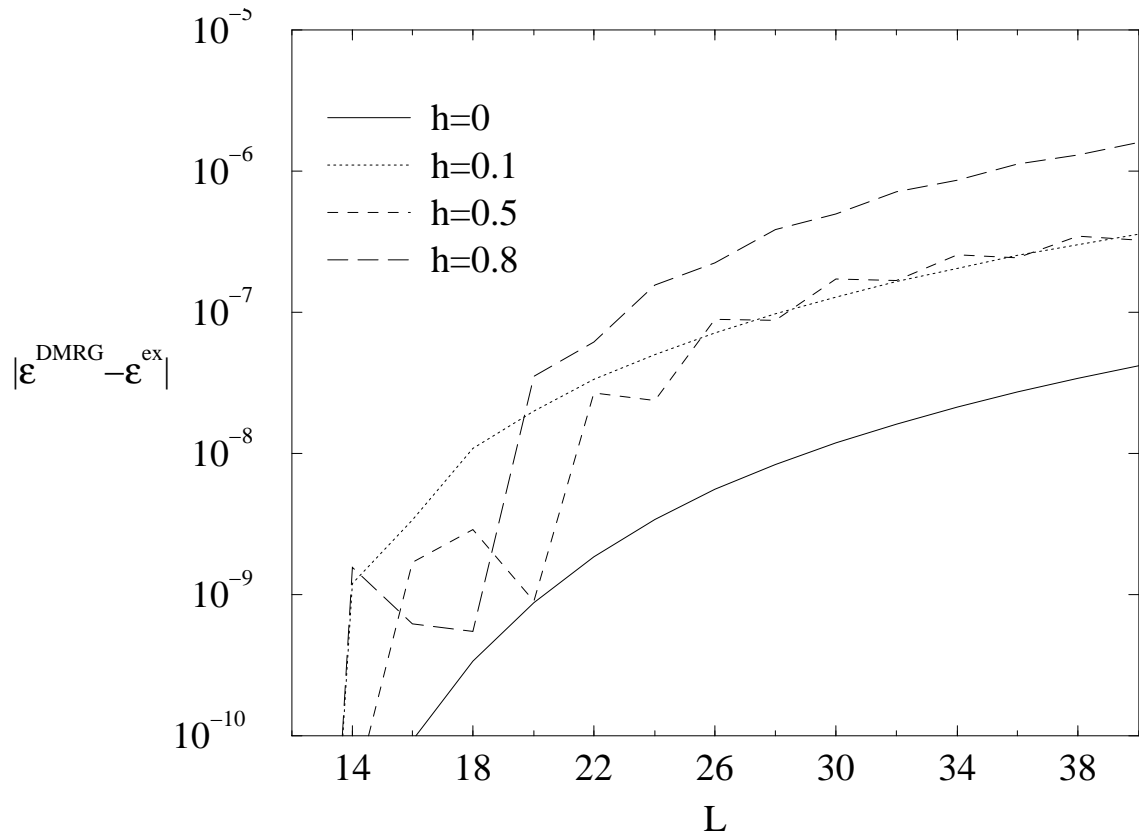


**Abbildung 4.1:** Eigenwertspektrum der Dichtematrix  $\varrho_1$  eines nichthermiteschen XX-Modells von 16 Plätzen für verschiedene Werte von  $h$ , berechnet mit 16 Zuständen.

beiden Rechnungen zu speichern, um den Erwartungswert (4.8) zu berechnen. In einigen Systemen vereinfacht sich die Prozedur, weil der linke Eigenvektor entweder explizit bekannt ist oder aus der Kenntnis des rechten Eigenvektors bestimmt werden kann. So ist in Reaktions-Diffusions-Modellen der linke Eigenvektor mit dem Erhalt der Wahrscheinlichkeit verknüpft und daher bekannt (vgl. Kap. 6). Ist der Hamilton-Operator symmetrisch, wie es in (4.1) und bei der  $q$ -symmetrischen Heisenbergkette (5.1) der Fall ist, so sind der linke und der rechte Eigenvektor transponiert zueinander.

### 4.3 DMRG-Prozedur

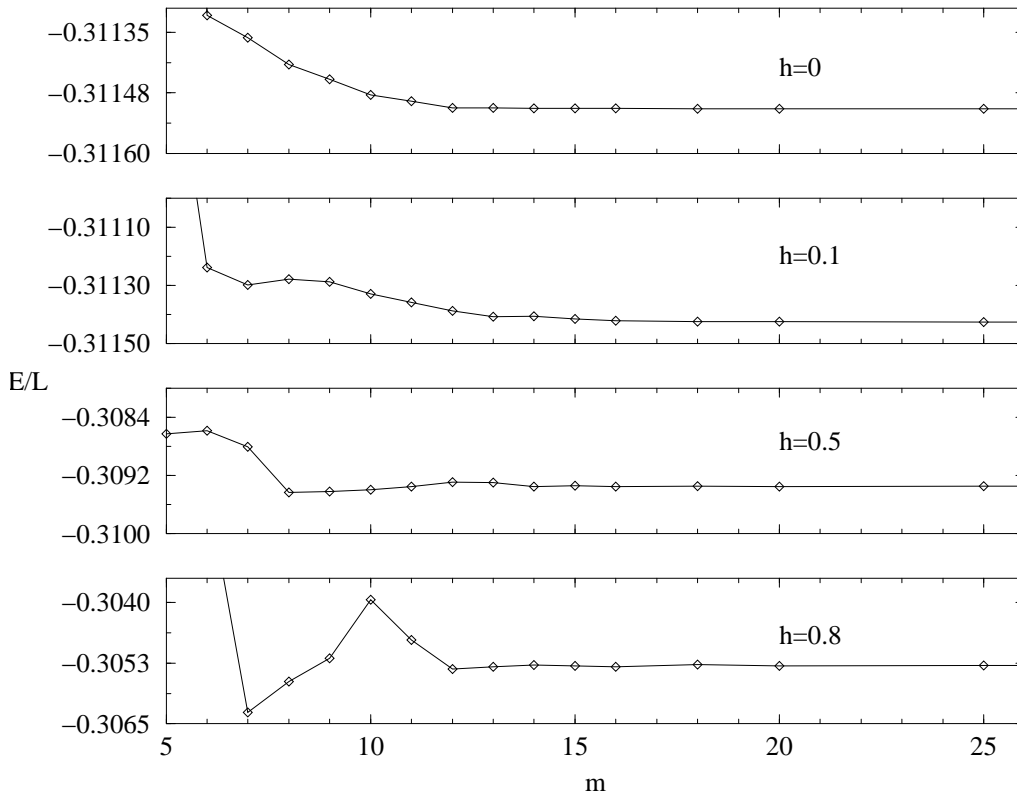
Abbildung 4.1 zeigt die Spektren der Dichtematrix  $\varrho_1$  einer Kette von 16 Plätzen für vier verschiedene Werte des Randfeldes  $h$ , wie sie mit der im vorigen Abschnitt beschriebenen DMRG-Methode ermittelt wurden. Der Fall  $h = 0$  entspricht dem herkömmlichen XX-Modell, einem Spezialfall des Hamilton-Operators (3.1). Man erkennt deutlich, daß das Spektrum ungünstiger wird, sobald das Randfeld wirkt.



**Abbildung 4.2:** Abweichungen der DMRG-Resultate von den exakten Grundzustandsenergien pro Platz als Funktion der Systemgröße  $L$  für verschiedene Werte des Randfeldes  $h$  und 32 Zustände.

Die Eigenwerte von  $\varrho_1$  liegen bis zu drei Größenordnungen über denen der  $XX$ -Kette. Das schlägt sich in einem größeren Trunkierungsfehler und in ungenaueren Resultaten für die Grundzustandsenergie nieder. In Abb. 4.2 ist die Abweichung der numerischen Daten von den exakten Werten als Funktion der Kettenlänge für  $m = 32$  dargestellt. Für  $h = 0.8$  weichen die numerischen Resultate von den exakten in der sechsten Nachkommastelle ab. Bei äquivalenten Rechnungen zum hermiteschen  $XX$ -Modell treten die Abweichungen dagegen erst in der achten Stelle auf. Wie beim herkömmlichen Heisenberg-Modell gibt auch hier der Trunkierungsfehler die Größenordnung des realen Fehlers in der Grundzustandsenergie an.

Ein anderer wichtiger Punkt bei der Behandlung von nichthermiteschen Matrizen ist die Konvergenz des Verfahrens mit zunehmender Zahl  $m$  der berücksichtigten Eigenzustände der Dichtematrix. Da die DMRG nun nicht mehr als Variationsver-



**Abbildung 4.3:** Grundzustandsenergien pro Spin als Funktion der Zahl  $m$  der berücksichtigten Zustände für 26 Plätze und verschiedene Randfelder  $h$ .

fahren angesehen werden kann, sind die approximativen Werte der Grundzustandsenergie im allgemeinen keine obere Schranke mehr für die exakten Werte. Das ist deutlich in Abb. 4.3 zu erkennen, wo die Grundzustandsenergien pro Platz als Funktion von  $m$  für verschiedene Werte von  $h$  dargestellt sind. Im Fall  $h = 0$  nähern sich die numerischen Werte monoton von oben dem exakten Wert. Für kleine Werte des Randfeldes ( $h < 0.4$ ) verhält sich die Energie nicht mehr monoton in  $m$ , die numerischen Werte liegen aber immer noch oberhalb des exakten. Bei größeren Werten von  $h$  jedoch, d.h. bei stärkerer Nichthermitizität des Hamilton-Operators, können die genäherten Werte auch deutlich unterhalb des exakten liegen.