

Kapitel 6

Nichtgleichgewichtsmodelle und spezielle Grundzustände

6.1 Einleitende Bemerkungen

Normalerweise verwendet man die DMRG-Methode, um Näherungen zu Grundzuständen zu finden, über deren Struktur wenig oder gar nichts bekannt ist. Man kann aber auch die Information, die über den Grundzustand in der Dichtematrix enthalten ist, benutzen, um relativ einfache Grundzustände aufzuspüren. Die Struktur des Zustandes spiegelt sich dann im Eigenwertspektrum der reduzierten Dichtematrix wider und sollte in einer DMRG-Rechnung zu beobachten sein.

In den folgenden Abschnitten werden solche speziellen Grundzustände am Beispiel des Grundzustandes des ferromagnetischen q -symmetrischen Heisenberg-Modells und am Beispiel von Matrixproduktzuständen als stationäre Zustände in Nichtgleichgewichtsmodellen diskutiert. Die DMRG bietet somit die Möglichkeit, gezielt nach einfach strukturierten Grundzuständen in noch ungelösten Modellen zu suchen und könnte als Pfadfinder für analytische Betrachtungen dienen.

6.2 q -symmetrische Diffusion

Es ist bekannt, daß man das Hüpfen von klassischen Teilchen auf einem Gitter der Länge L ohne Vorzugsrichtung und unter Ausschluß von Doppelbesetzungen mit Hilfe des isotropen ferromagnetischen Heisenberg-Modells mit Spin $1/2$ beschreiben kann [88]. In dieser Formulierung wird ein leerer Platz durch einen abwärts gerichteten, ein besetzter durch einen aufwärts gerichteten Spin charakterisiert. Ein fester Wert der Teilchenzahl N korrespondiert dann zu einem Sektor mit fixiertem Spinwert $S_{tot}^z = N - L/2$. Die Wahrscheinlichkeit $P(\mathbf{s}, t)$ für das Auftreten einer bestimmten Konfiguration $\mathbf{s} = \{s_1, s_2, \dots, s_L\}$, $s_i = \pm 1/2$, kann formal durch einen

Vektor dargestellt werden (siehe z.B. [89,90]):

$$|P(t)\rangle = \sum_{\mathbf{s}} P(\mathbf{s}, t) |\mathbf{s}\rangle, \quad (6.1)$$

wobei $|\mathbf{s}\rangle$ der zur Konfiguration \mathbf{s} gehörige Zustandsvektor ist. Die Gesamtheit der Vektoren $|\mathbf{s}\rangle$ bildet eine Basis im Zustandsraum. Die Mastergleichung, die die zeitliche Entwicklung des Wahrscheinlichkeitsvektors beschreibt, lautet dann

$$\frac{\partial}{\partial t} |P\rangle = -H|P\rangle, \quad (6.2)$$

wobei der Zeitentwicklungsoperator der Wahrscheinlichkeit durch den Hamilton-Operator H des Heisenberg-Modells repräsentiert wird. Der stationäre Zustand des Systems, der durch die zeitliche Konstanz des Wahrscheinlichkeitsvektors gekennzeichnet ist, ist dann der rechte Eigenzustand $|P_0\rangle$ von H zum niedrigsten Eigenwert im jeweiligen Spinunterraum S_{tot}^z . Aus (6.2) folgt dann, daß der Eigenwert von H im stationären Zustand verschwindet.

$$H|P_0\rangle = 0 \quad (6.3)$$

Das exakte Verschwinden der Grundzustandsenergie in einem Nichtgleichgewichtsmodell bietet einen ausgezeichneten Test für die Genauigkeit der DMRG-Methode. Ein weiterer Test ist die Tatsache, daß der Teilchenstrom im stationären Zustand an jedem Gitterplatz denselben Wert haben muß.

Da der Vektor $|P\rangle$ bereits die Wahrscheinlichkeit für eine Konfiguration darstellt und nicht die Wahrscheinlichkeitsamplitude wie in der Quantenmechanik, unterscheidet sich die Berechnung von Erwartungswerten von der in der Quantenmechanik üblichen. Der zeitabhängige Erwartungswert einer Größe $A(\mathbf{s})$ ist

$$\langle A \rangle = \sum_{\mathbf{s}} A(\mathbf{s}) P(\mathbf{s}, t). \quad (6.4)$$

Diese Beziehung kann man formal in die Form eines quantenmechanischen Erwartungswertes $\langle A \rangle = \langle 1|A\rangle$ bringen, indem man den Vektor

$$\langle 1| = \sum_{\mathbf{s}} \langle \mathbf{s}| \quad (6.5)$$

einführt. Man erhält dann

$$\langle A \rangle = \langle 1|A|P(t)\rangle. \quad (6.6)$$

Der Vektor $\langle 1|$ ist zugleich auch linker Eigenvektor von H mit Eigenwert null. Im stationären Zustand hat (6.6) daher die übliche Form eines Erwartungswertes, der allerdings mit zwei verschiedenen Eigenvektoren gebildet wird.

Betrachten wir nun ein Modell, bei dem eine Sorte von Teilchen mit unterschiedlichen Raten nach links oder rechts hüpfen kann, wobei Doppelbesetzungen von Plätzen vermieden werden sollen. Der Zeitentwicklungsoperator lautet dann [79]

$$H = \sum_{j=1}^{L-1} \left\{ \alpha_+ \sigma_j^- \sigma_{j+1}^+ + \alpha_- \sigma_j^+ \sigma_{j+1}^- - \alpha_+ (1 + \sigma_j^z) (1 - \sigma_{j+1}^z) - \alpha_- (1 - \sigma_j^z) (1 + \sigma_{j+1}^z) \right\}. \quad (6.7)$$

Die Ausdrücke in den σ^z beschreiben dabei die Verlustterme, d.h. die Abnahme der Besetzungswahrscheinlichkeit an einem Gitterplatz infolge des Forthüpfens eines Teilchens. Mit Hilfe der σ^\pm werden dagegen die Gewinnterme, also die Zunahme der Besetzungswahrscheinlichkeit an einem Gitterplatz, beschrieben. Die Parameter α_+ und α_- bezeichnen die Hüpfraten nach rechts bzw. links. Wendet man auf den Operator (6.7) die Transformation

$$\sigma_j^\pm \rightarrow q^{\pm j} \sigma_j^\pm, \quad q = \sqrt{\frac{\alpha_-}{\alpha_+}} \quad (6.8)$$

an und setzt $\alpha_+ \alpha_- = 1$, so bekommt man exakt den Ausdruck (5.1) mit dem ferromagnetischen Vorzeichen [79]. Der Parameter q gibt in dieser Formulierung

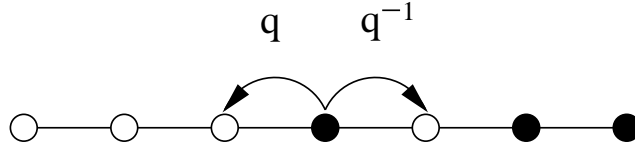


Abbildung 6.1: Schematische Darstellung des q -symmetrischen Hüpfmodells. Teilchen (leere Plätze) sind als schwarze (weiße) Kreise dargestellt.

die Asymmetrie des Hüpfens an. In Abb. 6.1 ist das q -symmetrische Hüpfmodell schematisch dargestellt.

Im Falle dieser q -symmetrischen Diffusion ist der Hamilton-Operator hermitesch, da die Randfelder nun durch die Hüpfraten α_+ und α_- bestimmt werden, die reell sind. Infolge der Vorzugsrichtung konzentrieren sich die Teilchen an einem Ende der Kette, und es entstehen so nichttriviale Dichteprofile. Durch Anwendung von Absteigeoperatoren S^- auf den stationären Zustand eines vollständig gefüllten Systems lassen sich die stationären Zustände mit weniger Teilchen rekursiv erzeugen und auf diese Weise analytische Formeln für die Verteilung der Teilchendichte erhalten. Die Konzentration n der Teilchen an einem Ort x einer Kette von L Plätzen

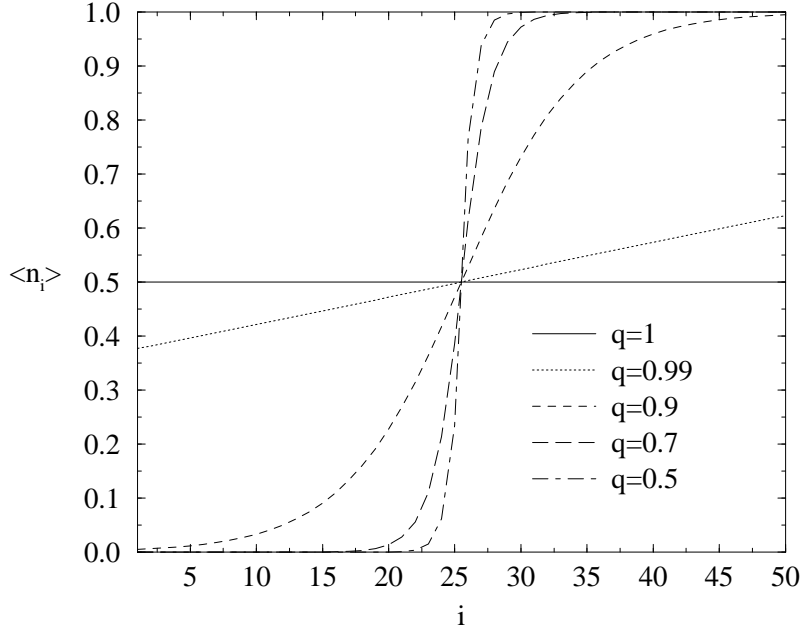


Abbildung 6.2: Profile der Teilchendichte des halbvollen q -symmetrischen Hüpfmodells von 50 Plätzen für verschiedene Werte des Parameters q , berechnet mit 32 Zuständen.

mit insgesamt N Teilchen ist gegeben durch [91]

$$n(x; N) = \binom{L}{N}_q^{-1} \sum_{k=0}^{N-1} (-1)^{N-k+1} q^{(N-k)(L+1-2x)} \binom{L}{k}_q. \quad (6.9)$$

Die verallgemeinerten Binomialkoeffizienten sind dabei durch

$$\binom{a}{b}_q = \frac{[a]!}{[b]![a-b]!}, \quad [a]! = [1]_q \cdot [2]_q \cdot \dots \cdot [a]_q \quad (6.10)$$

definiert (vgl. (5.4)). Für große Systeme mit einer großen Zahl von Teilchen kann man näherungsweise ein exponentielles Verhalten der Teilchendichte ableiten, wobei die typische Längenskala des Abfalls durch den Parameter q bestimmt ist.

Numerisch lassen sich Profile der Teilchendichte gewinnen, indem man den Erwartungswert der Magnetisierung $\langle \sigma_i^z \rangle$ für alle Gitterplätze i berechnet. Typische Profile für eine Kette von 50 Plätzen bei halber Füllung und für verschiedene Werte von q sind in Abb. 6.2 dargestellt. Für $q = 1$, also dem Fall isotroper Diffusion, hat die Konzentration an allen Gitterplätzen denselben Wert. Die Teilchen verteilen sich in diesem Fall gleichmäßig über das gesamte System, wie es bei Abwesenheit

einer Vorzugsrichtung zu erwarten ist. Ist q nur geringfügig kleiner als eins, so gibt es eine geringe Tendenz der Teilchen, sich im rechten Teil des Systems aufzuhalten. Das Profil ist dann nahezu linear. Für noch kleinere Werte von q jedoch überwiegt die Sprungrate α_+ deutlich und es bildet sich mehr und mehr ein scharfer Übergang zwischen einer dünn besetzten linken Hälfte und einer stark besetzten rechten heraus. Bereits für $q = 1/2$ ist die linke Systemhälfte nahezu leer und fast alle Teilchen halten sich im rechten Teil auf. Die numerischen Werte sind in ausgezeichnete Übereinstimmung mit der analytischen Formel (6.9).

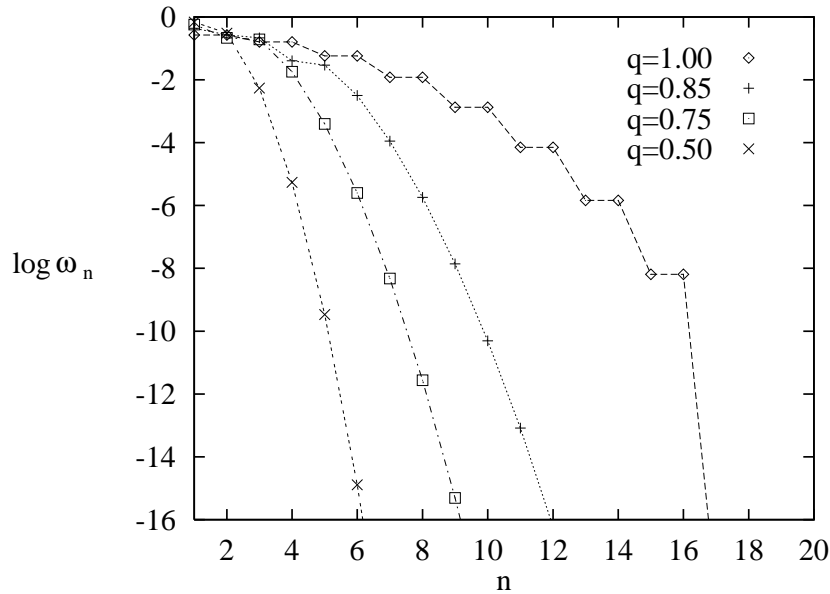


Abbildung 6.3: Eigenwertspektrum der Dichtematrix ρ_1 für ein halbvolles Hüpfmodell von 30 Plätzen für verschiedene Werte des Parameters q , berechnet mit 16 Zuständen.

Ein weiterer sehr interessanter Aspekt der q -symmetrischen Heisenberg-Kette ist das Spektrum der Dichtematrix. Rechnungen im Unterraum zu $S_{tot}^z = 0$, also dem halbvollen System, ergeben Dichtematrixspektren, wie sie in Abb. 6.3 für verschiedenen Werte des Parameters q dargestellt sind. Im Fall $q = 1$ sind alle auftretenden Eigenwerte zweifach entartet. Außerdem legen die numerischen Resultate nahe, daß nur endliche viele Eigenwerte der Dichtematrix (für die abgebildete Kette von 30 Plätzen sind es genau 16 Stück) von null verschieden sind. Alle anderen Eigenwerte liegen unterhalb der numerischen Genauigkeit. Man hat also einen Fall vor sich, in dem die DMRG mit einer kleinen Anzahl von Zuständen exakt ausgeführt werden kann.

Für $q < 1$ ist die Situation ähnlich, nur endlich viele Eigenwerte sind offenbar

von null verschieden. Im Gegensatz zum Fall $q = 1$ sind die Eigenwerte hier allerdings nicht mehr entartet. Entfernt man die Entartungen für $q = 1$, so weisen alle Spektren einen gaußförmigen Verlauf auf. Der Ursprung dieses sehr speziellen Eigenwertspektrums läßt sich leicht verstehen [32] und soll im folgenden Abschnitt diskutiert werden.

6.3 Der Grundzustand im Ferromagneten

Der Einfachheit halber betrachten wir zunächst das ferromagnetische Heisenberg-Modell

$$H = - \sum_{i=1}^{L-1} \mathbf{S}_i \mathbf{S}_{i+1}, \quad (6.11)$$

das dem Fall $q = 1$ entspricht. Der Grundzustand dieses Hamilton-Operators ist $|\Phi\rangle = |S, M\rangle$, wobei $S = L/2$ den totalen Spin und $M = S_{tot}^z$ seine z -Komponente bezeichnen. Wie bei den Rechnungen in den vorangegangenen Kapiteln wählen wir den Unterraum $M = 0$. Teilt man die Kette nun in zwei Teile, dann kann man den Zustand $|\Phi\rangle$ des ganzen Systems als Linearkombination von Zuständen in den beiden Teilen schreiben. Bezeichnen $s = S/2$ und m den Spin bzw. dessen z -Komponente in den Teilsystemen, so schreibt sich der Grundzustand

$$|S, 0\rangle = \sum_{m=-s}^{+s} c_m |s, m\rangle_1 |s, -m\rangle_2. \quad (6.12)$$

Die c_m sind die entsprechenden Clebsch-Gordan-Koeffizienten. Der Zustand $|\Phi\rangle$ ist damit eine Überlagerung von $(S + 1)$ Termen.

Die Dichtematrix der gesamten Kette ist $\varrho = |\Phi\rangle\langle\Phi|$. Setzt man (6.12) darin ein und summiert über alle Zustände des Teils 2, so bekommt man die reduzierte Dichtematrix für den Teil 1, wie sie in der DMRG benutzt wird.

$$\varrho_1 = \sum_m |s, m\rangle_1 c_m^2 \langle s, m| \quad (6.13)$$

Man sieht, daß ϱ_1 bereits diagonal ist und nur die nicht verschwindenden Eigenwerte

$$\omega_n = c_n^2, \quad n = 1, \dots, S + 1 \quad (6.14)$$

besitzt. Die Clebsch-Gordan-Koeffizienten lassen sich berechnen [92]

$$c_m = \frac{1}{\sqrt{(4s)!}} \frac{(2s)! \cdot (2s)!}{(s-m)!(s+m)!} \quad (6.15)$$

und man erhält schließlich eine analytische Form des Dichtematrixspektrums. Da (6.15) symmetrisch ist bezüglich des Austausches $m \leftrightarrow -m$, sind die Eigenwerte

von ϱ_1 zweifach entartet. Für eine Kette von 30 Plätzen erhält man so 16 von null verschiedene Eigenwerte. Das ist genau das Verhalten aus Abb. 6.3.

Die obige Vorgehensweise läßt sich auch anwenden, wenn man statt des herkömmlichen Heisenberg-Modells den q -symmetrischen Hamilton-Operator (5.1) aus Kapitel 5 untersucht. Man hat es dann mit einem Ferromagneten zu tun, bei dem an den Enden zusätzliche, entgegengesetzt gerichtete Randfelder in z -Richtung wirken. In diesem Fall gibt es analoge Zerlegungsformeln für den q -deformierten Drehimpuls [93]. Die Clebsch-Gordan-Koeffizienten lauten dann

$$c_m = \frac{1}{\sqrt{[4s]!}} \frac{[2s]! \cdot [2s]!}{[s-m]! [s+m]!} q^{2sm}, \quad (6.16)$$

wobei die verallgemeinerten Fakultäten durch den zweiten Ausdruck in (6.10) gegeben sind. Nun gibt es keine Symmetrie zwischen m und $-m$ mehr, und die Entartung im Spektrum der Dichtematrix ist aufgehoben.

Die numerischen Resultate, die in Abb. 6.3 dargestellt sind, stimmen mit den analytischen Ausdrücken (6.15) und (6.16) auf fünfzehn Dezimalstellen überein. Insbesondere genügt in einer DMRG-Rechnung bereits eine sehr kleine Zahl von Zuständen (nämlich $S+1 = L/2 + 1$ Stück) um exakte Resultate zu erhalten.

6.4 Matrixproduktzustände

Eine Verallgemeinerung eines einfachen Produktzustandes

$$|\Phi\rangle = \prod_n [a|+1\rangle_n + b|-1\rangle_n], \quad (6.17)$$

der sich auch schreiben läßt als

$$|\Phi\rangle = \sum_{\boldsymbol{\sigma}} [m(\sigma_1)m(\sigma_2)\dots m(\sigma_n)] |\boldsymbol{\sigma}\rangle \quad (6.18)$$

mit $m(+1) = a$, $m(-1) = b$, ist ein Zustand, der für eine offene Kette der Länge L die Gestalt

$$|\Phi\rangle = \sum_{\boldsymbol{\sigma}} [\mathbf{u}\mathbf{M}_1(\sigma_1)\mathbf{M}_2(\sigma_2)\dots\mathbf{M}_L(\sigma_L)\mathbf{v}] |\boldsymbol{\sigma}\rangle \quad (6.19)$$

hat. Dabei sind die \mathbf{M}_i in einem Hilfsraum definierte Matrizen. Die Vektoren \mathbf{u} und \mathbf{v} sorgen dafür, daß der Ausdruck in den eckigen Klammern tatsächlich eine Zahl ist. Auf diese Weise wird jedem Gitterplatz i mit der Spinvariablen σ_i eine Matrix $\mathbf{M}_i(\sigma_i)$ zugeordnet, wobei im allgemeinen die Matrizen zu verschiedenen Plätzen verschieden sein können. Das Produkt all dieser Matrizen, zusammen mit den Randvektoren \mathbf{u} und \mathbf{v} , stellt dann das Gewicht einer Konfiguration $\boldsymbol{\sigma} = \{\sigma_1 \dots \sigma_L\}$

dar. Auch der approximative Grundzustand nach der Trunkierung in der DMRG-Prozedur hat eine solche Struktur [94]. Erlaubt man, daß der Hilfsraum der Matrizen \mathbf{M}_i unendlich-dimensional wird, so kann man im Prinzip jeden Zustand in der Form (6.19) schreiben.

Wir betrachten jetzt den Fall des sogenannten homogenen Matrixproduktzustandes (MPZ), bei dem die Matrizen \mathbf{M}_i für alle Gitterplätze gleich sind. Desweiteren sollen sie p -dimensional, mit endlichem p , sein. Der Zustand schreibt sich dann einfach als

$$|\Phi\rangle = \sum_{\sigma} [\mathbf{u}\mathbf{M}(\sigma_1)\mathbf{M}(\sigma_2)\dots\mathbf{M}(\sigma_L)\mathbf{v}] |\sigma\rangle. \quad (6.20)$$

Solche MPZ treten als exakte Grundzustände in einer Reihe von Gleichgewichts- [95–97] und Nichtgleichgewichtsmodellen [98,99] auf.

Teilt man nun das System in zwei Teile, wie in der DMRG-Methode üblich, dann kann man das Matrixprodukt in (6.20) auftrennen und als das Produkt zweier p -dimensionaler Vektoren schreiben. Sind $|\sigma_1\rangle$ und $|\sigma_2\rangle$ die zwei Sätze von Basisvektoren für die beiden Untersysteme 1 und 2, dann kann man den Grundzustand $|\Phi\rangle$ in folgender Form schreiben:

$$\begin{aligned} |\Phi\rangle &= \sum_{\alpha=1}^p \underbrace{|\varphi_{\alpha}\rangle}_1 \otimes \underbrace{|\psi_{\alpha}\rangle}_2 \\ &= \sum_{\alpha} \varphi_{\alpha}(\sigma_1) \psi_{\alpha}(\sigma_2) |\sigma_1\rangle |\sigma_2\rangle \end{aligned} \quad (6.21)$$

mit

$$\varphi_{\alpha}(\sigma_1) = \left[\mathbf{u}\mathbf{M}(\sigma_1)\dots\mathbf{M}(\sigma_{L/2}) \right]_{\alpha} \quad (6.22)$$

$$\psi_{\alpha}(\sigma_2) = \left[\mathbf{M}(\sigma_{L/2+1})\dots\mathbf{M}(\sigma_L)\mathbf{v} \right]_{\alpha}. \quad (6.23)$$

Die reduzierte Dichtematrix für den Teil 1 bekommt man dann durch Spurbildung über die Zustände im Teil 2 aus der Dichtematrix ϱ :

$$\begin{aligned} \varrho_1 &= \sum_{\sigma_2} \langle \sigma_2 | \varrho | \sigma_2 \rangle \\ &= \sum_{\alpha\beta} \sum_{\sigma_2} \langle \sigma_2 | \varphi_{\alpha} \rangle |\psi_{\alpha}\rangle \langle \varphi_{\beta} | \langle \psi_{\beta} | \sigma_2 \rangle \\ &= \sum_{\alpha\beta} C_{\alpha\beta} |\varphi_{\alpha}\rangle \langle \varphi_{\beta} | \end{aligned} \quad (6.24)$$

mit der Überlappmatrix

$$C_{\alpha\beta} = \sum_{\sigma_2} \langle \sigma_2 | \psi_{\alpha} \rangle \langle \psi_{\beta} | \sigma_2 \rangle = \sum_{\sigma_2} \psi_{\alpha}(\sigma_2) \psi_{\beta}^*(\sigma_2) = \langle \psi_{\beta} | \psi_{\alpha} \rangle. \quad (6.25)$$

Im Gegensatz zum einfachen Produktzustand im Ferromagneten ist die Dichtematrix noch nicht diagonal. Der Vektor

$$|\omega\rangle = \sum_{\gamma} a_{\gamma} |\varphi_{\gamma}\rangle \quad (6.26)$$

sei ein Eigenvektor von ϱ_1 zum Eigenwert ω . Weiterhin sei

$$S_{\alpha\beta} = \langle \varphi_{\beta} | \varphi_{\alpha} \rangle \quad (6.27)$$

die Überlappmatrix der Zustände im Teil 1 der Kette. Setzt man nun in das Eigenwertproblem der Dichtematrix

$$\varrho_1 |\omega\rangle = \omega |\omega\rangle \quad (6.28)$$

die Beziehungen (6.24) und (6.26) ein, so ergibt sich

$$\sum_{\alpha\beta\gamma} C_{\alpha\beta} |\varphi_{\alpha}\rangle \langle \varphi_{\beta} | \varphi_{\gamma}\rangle a_{\gamma} = \omega \sum_{\gamma} a_{\gamma} |\varphi_{\gamma}\rangle. \quad (6.29)$$

Multipliziert man diese Gleichung von links mit einem Vektor $\langle \varphi_{\delta} |$ und berücksichtigt (6.25) und (6.27), denn erhält man

$$\begin{aligned} \sum_{\alpha\beta\gamma} \langle \varphi_{\delta} | \varphi_{\alpha}\rangle C_{\alpha\beta} \langle \varphi_{\beta} | \varphi_{\gamma}\rangle a_{\gamma} &= \omega \sum_{\gamma} \langle \varphi_{\delta} | \varphi_{\gamma}\rangle a_{\gamma} \\ \sum_{\alpha\beta\gamma} S_{\delta\alpha} C_{\alpha\beta} S_{\beta\gamma} a_{\gamma} &= \omega \sum_{\gamma} S_{\delta\gamma} a_{\gamma} \end{aligned} \quad (6.30)$$

oder in Matrixnotation

$$\begin{aligned} \mathbf{SCSa} &= \omega \mathbf{Sa} \\ (\mathbf{SC} - \omega \mathbf{1})\mathbf{Sa} &= 0. \end{aligned} \quad (6.31)$$

Die Eigenwerte der reduzierten Dichtematrix ϱ_1 ergeben sich also aus der Gleichung

$$\det(\mathbf{SC} - \omega \mathbf{1}) = 0. \quad (6.32)$$

Da jedoch der Raum der Matrizen \mathbf{M} und damit auch die Matrizen \mathbf{C} und \mathbf{S} nur p -dimensional sind, kann es nur p von null verschiedene Eigenwerte geben. Diese Tatsache muß in einer numerischen Rechnung zu beobachten sein.

Im folgenden Abschnitt werden Resultate aus DMRG-Rechnungen zu einem Modell vorgestellt, von dem bereits bekannt ist, daß für bestimmte Werte der Modellparameter der Grundzustand als MPZ endlicher Dimension geschrieben werden kann.

6.5 Diffusionsmodell mit Vorzugsrichtung

Das zu untersuchende Modell, eine Erweiterung des q -symmetrischen Hüpfmodells aus Abschnitt 6.2 [98], ist schematisch in Abb. 6.4 dargestellt. In der Kette diffundieren die Teilchen mit einer Vorzugsrichtung, die durch den Parameter q gesteuert wird. Am linken Rand der Kette können Teilchen mit der Rate α in das System gelangen, am rechten Ende können sie es mit der Rate β verlassen. Der Zeitentwick-

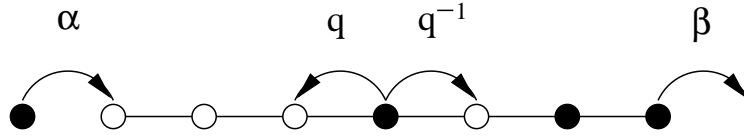


Abbildung 6.4: Das Diffusionsmodell mit Vorzugsrichtung, elementare Prozesse und Raten. Teilchen (leere Plätze) sind als schwarze (weiße) Kreise dargestellt.

lungsoperator schreibt sich in der Form

$$H = H_q + H_b, \quad (6.33)$$

wobei

$$H_q = -\frac{1}{4} \sum_{n=1}^{L-1} \left[q^{-1} \sigma_n^- \sigma_{n+1}^+ + q \sigma_n^+ \sigma_{n+1}^- + (q + q^{-1}) (\sigma_n^z \sigma_{n+1}^z - 1) + (q - q^{-1}) (\sigma_n^z - \sigma_{n+1}^z) \right] \quad (6.34)$$

das Hüpfen auf der Kette beschreibt. Der zweite Term

$$H_b = -\frac{\alpha}{2} (\sigma_1^+ + \sigma_1^z - 1) - \frac{\beta}{2} (\sigma_L^- - \sigma_L^z - 1), \quad (6.35)$$

der nichthermitesch ist, entspricht den Randprozessen.

Dieses Modell besitzt drei verschiedene Phasen mit unterschiedlichen Profilen für die Teilchendichte und unterschiedlichem Strom, die bei festem q durch die Randraten α und β bestimmt werden. Außerdem ist aus der allgemeinen Lösung des Problems bekannt, daß bei bestimmten Kombinationen der Randraten endlichdimensionale Matrixproduktzustände als Grundzustände auftreten [98,100]¹. Diese Zustände entstehen durch das Zusammenspiel der drei Raten α , β und q . Die Bedingungsgleichung für einen p -dimensionalen MPZ lautet

$$\left[\alpha + (q - q^{-1}) \right] \left[\beta + (q - q^{-1}) \right] = \alpha \beta q^{2(1-p)} \quad q < 1. \quad (6.36)$$

¹Der Fall paralleler Dynamik wurde in [101] behandelt.

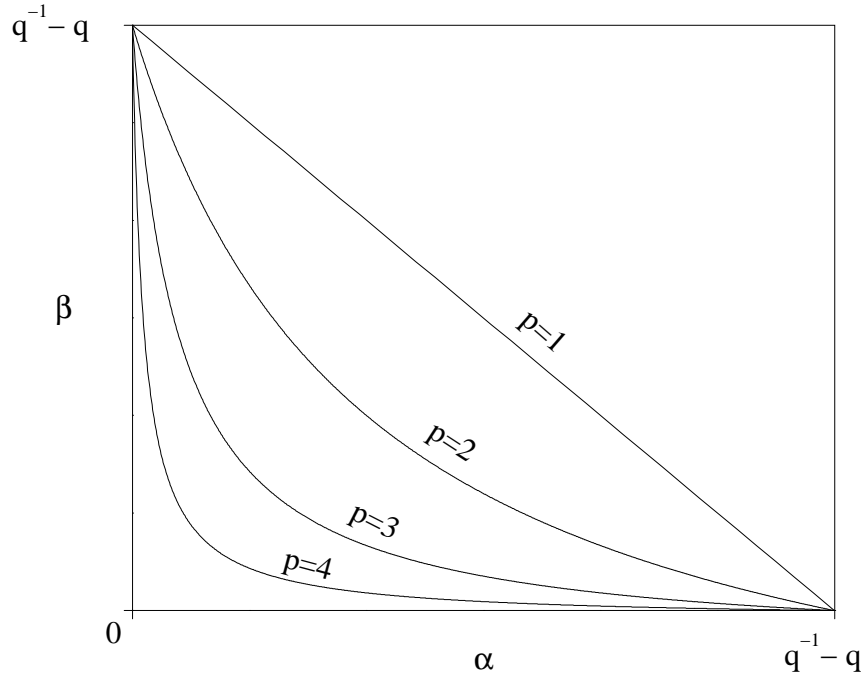


Abbildung 6.5: Schematische Darstellung der Linien endlich-dimensionaler Matrixproduktzustände im Diffusionsmodell mit Vorzugsrichtung.

In Abb. 6.5 sind die Kurven, auf denen p -dimensionale MPZ auftreten schematisch in der α - β -Ebene dargestellt.

Wir haben nun DMRG-Rechnungen für kurze Ketten entlang Linien $\beta = k\alpha$ mit verschiedenen Werten für k in der α - β -Ebene durchgeführt und für jede Kombination der Randraten das Spektrum der Dichtematrix berechnet. Solche Linien schneiden die Kurven, auf denen endlich-dimensionale MPZ auftreten, was in den Eigenwerten von ρ_1 zu erkennen sein sollte. Abbildung 6.6 zeigt das Ergebnis einer solchen Rechnung. Dargestellt sind die Eigenwerte der Dichtematrix als Funktion der Rate α für $k = 2$, $q = 0.25$ und eine Kette von 10 Plätzen. Der größte Eigenwert liegt sehr dicht bei eins und fällt daher in der Abbildung mit der oberen Achse zusammen. Man sieht deutlich, daß nur eine geringe Anzahl der maximal 32 möglichen Eigenwerte größer als 10^{-15} ist, so daß sich das System für eine DMRG-Rechnung mit nur wenigen Zuständen eignen sollte. Dies wurde auch in [102] bemerkt. Bei bestimmten Werten von α vereinfacht sich das Spektrum jedoch noch erheblich mehr. Für $\alpha_1 = 1.25$ verschwinden alle Eigenwerte bis auf den obersten. Dies ist genau die Stelle, an der nach (6.36) der eindimensionale Matrixproduktzustand auftritt. Auch der zwei- und der dreidimensionale MPZ an den Stellen $\alpha_2 \simeq 0.5224$ und

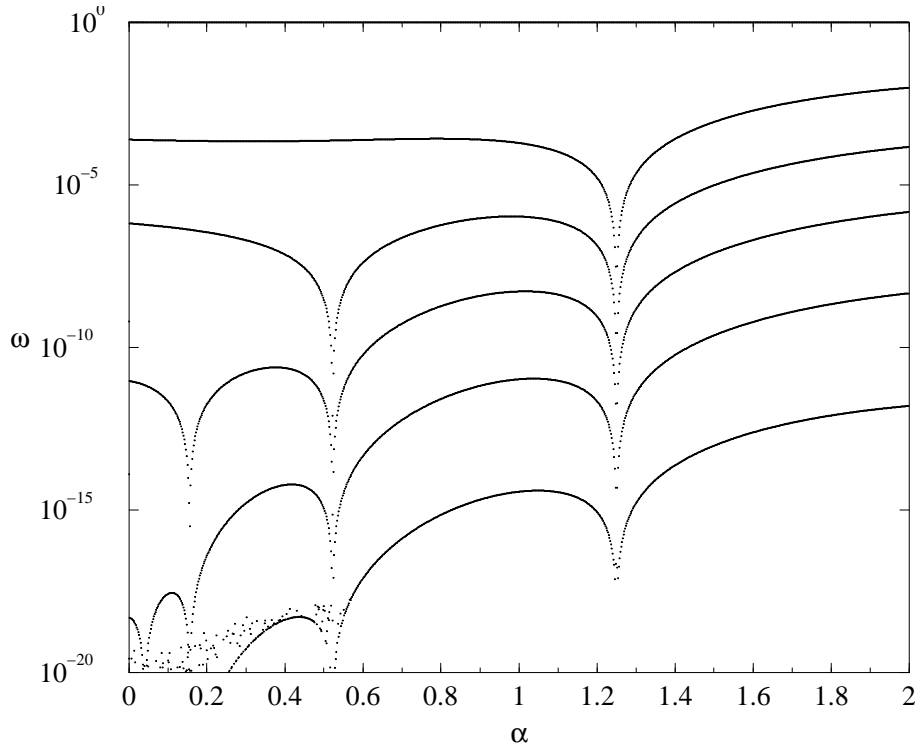


Abbildung 6.6: Dichtematrixspektrum eines Diffusionsmodells mit Vorzugsrichtung von 10 Plätzen, berechnet mit 8 Zuständen für $q = 0.25$, $\beta = 2\alpha$.

$\alpha_3 \simeq 0.1554$ können leicht aufgefunden werden.

Es ist wichtig zu betonen, daß diese Struktur auch bei größeren Kettenlängen erhalten bleibt. Nur dann kann man sicher sein, daß der MPZ auch im thermodynamischen Grenzfall $L \rightarrow \infty$ der Grundzustand ist und nicht nur ein Effekt aufgrund der endlichen Systemgröße.

Es ist auch möglich, die gesamte α - β -Ebene nach solchen endlich-dimensionalen MPZ abzusuchen und auf diese Weise Abb. 6.5 zu reproduzieren. Das Ergebnis einer solchen Rechnung für eine sehr kurze Kette von 4 Plätzen ist in Abb. 6.7 zu sehen, wo der dritte Eigenwert der reduzierten Dichtematrix ϱ_1 als Funktion der Parameter α und β dargestellt ist. Die zwei Kerben in der Kontourdarstellung entsprechen den beiden Linien, entlang derer der Grundzustand ein ein- bzw. zweidimensionaler homogener Matrixproduktzustand ist.

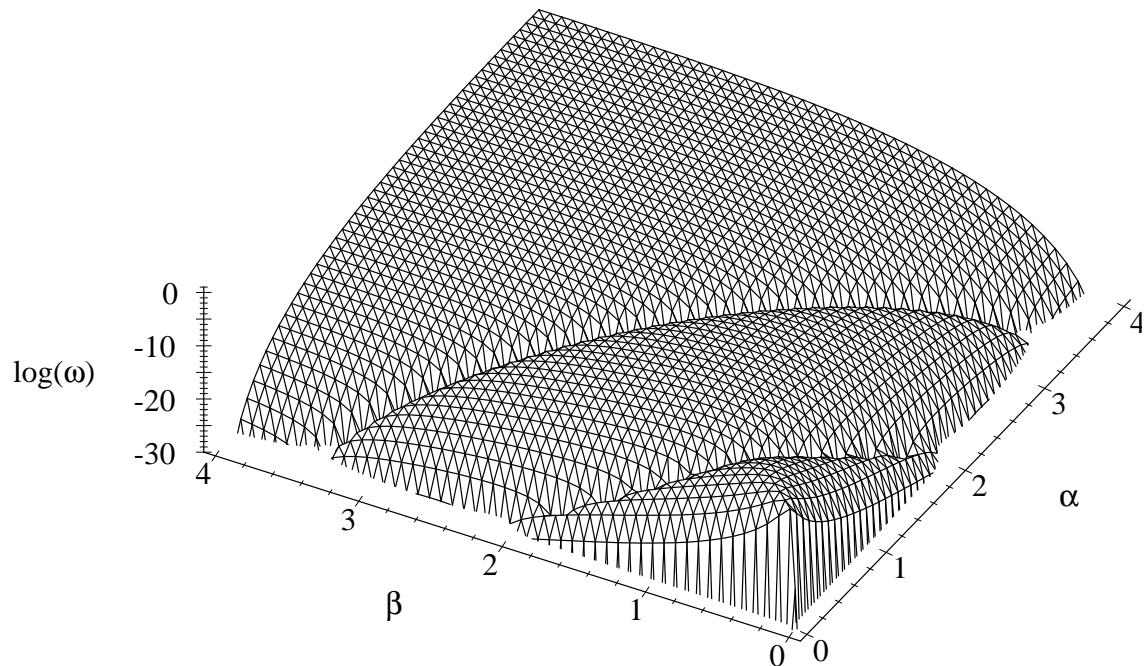
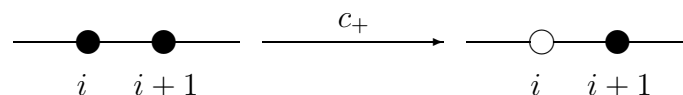


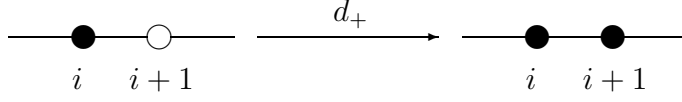
Abbildung 6.7: Dritter Eigenwert der Dichtematrix ϱ_1 in einem Diffusionsmodell mit Vorzugsrichtung von 4 Plätzen, $q = 0.25$.

6.6 Modell mit Koagulation und Dekoagulation

Man kann das im vorigen Abschnitt diskutierte Diffusionsmodell mit Vorzugsrichtung sehr leicht durch das Einführen von weiteren elementaren Prozessen verallgemeinern. Dazu wollen wir im folgenden zwei Prozesse betrachten, die die Teilchenzahl verändern und somit in Konkurrenz zu den bereits vorhandenen Raten stehen – Koagulation und Dekoagulation. Im allgemeinsten Fall kann man die Raten für diese Vorgänge nach rechts bzw. nach links unterschiedlich wählen. Die Koagulation von zwei Teilchen auf den Gitterplätzen i und $i + 1$ nach rechts



erfolgt mit der Rate c_+ . Analog erfolgt die Koagulation nach links mit der Rate c_- . Die Dekoagulation eines Teilchens am Gitterplatz i nach rechts



ist durch die Rate d_+ gegeben und entsprechend die Dekoagulation nach links durch die Rate d_- .

Das Einfügen dieser Terme führt auf den Hamilton-Operator

$$H = H_q + H_b + H_{cd}, \quad (6.37)$$

wobei die Operatoren H_q und H_b durch die Beziehungen (6.34) und (6.35) gegeben sind. Der Koagulations-Dekoagulations-Anteil lautet

$$\begin{aligned} H_{cd} = -\frac{1}{4} \sum_{n=1}^{L-1} \{ & (c_+ \sigma_n^- + d_- \sigma_n^+) (1 + \sigma_{n+1}^z) + (1 + \sigma_n^z) (c_- \sigma_{n+1}^- + d_+ \sigma_{n+1}^+) \\ & - (c_- + c_+ - d_- - d_+) \sigma_n^z \sigma_{n+1}^z - (c_- + c_+) (\sigma_n^z + \sigma_{n+1}^z) \\ & + (d_- - d_+) (\sigma_n^z - \sigma_{n+1}^z) - (c_- + c_+ + d_- + d_+) \}. \end{aligned} \quad (6.38)$$

Für spezielle Werte der Parameter kann man dieses Modell analytisch behandeln [99,103–105]. Eine allgemeine Lösung ist jedoch nicht bekannt.

Aufgrund des hochdimensionalen Parameterraums ist es nicht möglich, mit der DMRG systematisch nach speziellen Grundzuständen zu suchen. Wir haben deshalb verschiedene Kombinationen der Raten gebildet und das Spektrum der Dichtematrix dann als Funktion von nur wenigen Parametern untersucht.

Ein spezieller Fall liegt vor, wenn das Verhältnis der Raten nach rechts und links für alle Prozesse gleich ist [105]. Wählt man z.B.

$$\begin{aligned} \frac{\alpha_+}{\alpha_-} = \frac{c_+}{c_-} = \frac{d_+}{d_-} &= 2 \\ \alpha_- = d_+ &= 1 \\ \alpha &= 10^{-5} \\ \beta &= 0 \end{aligned}$$

so ist der einzige freie Parameter die Koagulationsrate c_+ . Für die Hüpfraten gilt nach (6.8) $\alpha_+ = q^{-1}$ und $\alpha_- = q$. Die Randraten sind effektiv null. Der gering von null abweichende Wert von α ist nur aus numerischen Gründen gewählt worden, um eine Entartung des Grundzustandes zu vermeiden. In Abb. 6.8 ist das Spektrum für eine Kette von 10 Plätzen als Funktion der Koagulationsrate aufgezeichnet. Man

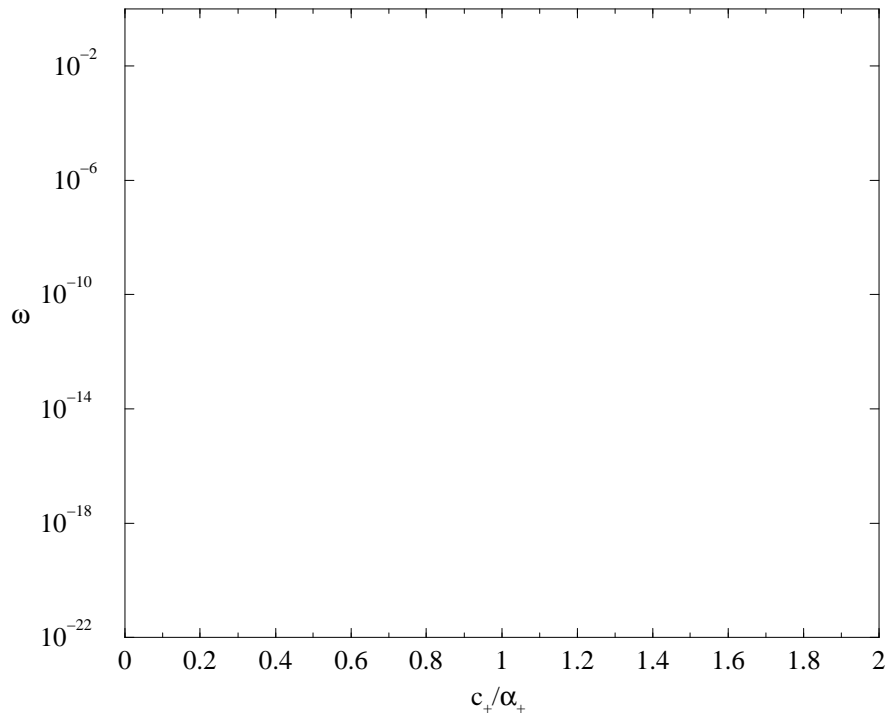


Abbildung 6.8: Spektrum der Dichtematrix ϱ_1 im Diffusionsmodell mit Vorzugsrichtung und Koagulation-DeKoagulation als Funktion der Koagulationsrate c_+/α_+ . Berechnet wurde das Spektrum für 10 Plätze mit 8 Zuständen der Dichtematrix. Die Parameter sind: $\alpha = 10^{-5}$, $\beta = 0$, $\alpha_- = d_+ = 1$ und $\alpha_+/\alpha_- = c_+/c_- = d_+/d_- = 2$.

erkennt zwei spezielle Grundzustände, die durch endlich-dimensionale Matrixproduktzustände geschrieben werden können. Ein Zustand liegt bei $c_+ = 0$ und ist ein einfacher Produktzustand. Hierbei handelt es sich um den trivialen Grundzustand, bei dem das System vollständig gefüllt ist. Aufgrund der verschwindenden Koagulationsrate überwiegen die Prozesse, die Teilchen erzeugen, und das System füllt sich, so daß der Grundzustand ein skalarer (eindimensionaler) Produktzustand aus den vollständig besetzten Zuständen der beiden Systemteile ist

$$|\Phi\rangle = |11 \dots 11\rangle_1 \otimes |11 \dots 11\rangle_2. \quad (6.39)$$

Der andere Zustand, der für $c_+/\alpha_+ = 1$ auftritt, ist ein vierdimensionaler MPZ. Es handelt sich hier tatsächlich um einen echten Matrixproduktzustand und kein Artefakt aufgrund der endlichen Kettenlänge, weil die unteren Eigenwerte auch für größere Systeme noch verschwinden. Dieser Zustand wurde bereits in [99] analytisch gefunden und diskutiert.

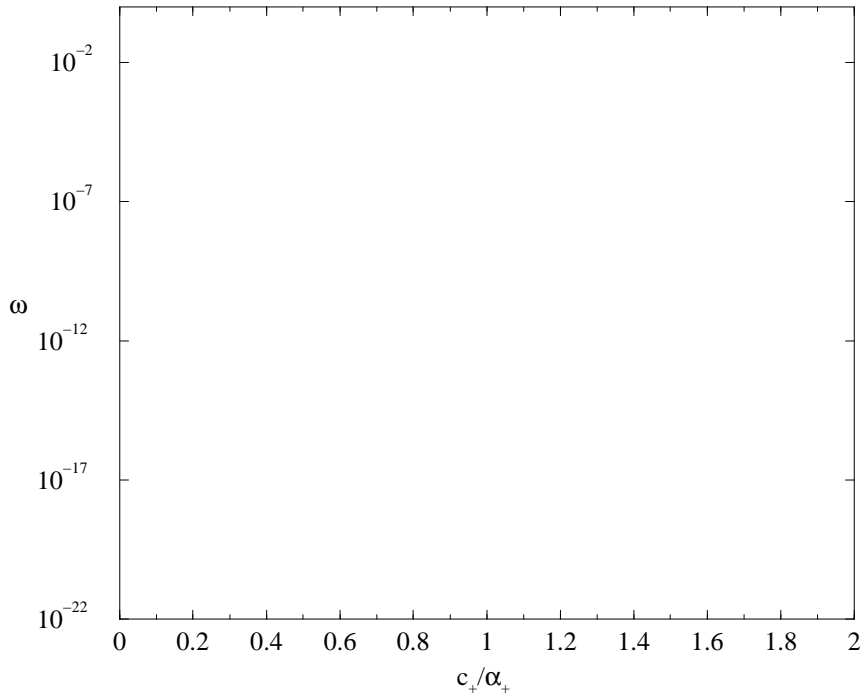


Abbildung 6.9: Eigenwertspektrum der Dichtematrix ϱ_1 im Diffusionsmodell mit Vorzugsrichtung und Koagulation-Dekoagulation als Funktion der Koagulationsrate c_+/α_+ . Berechnet wurde das exakte Spektrum für 6 Plätze mit 8 Zuständen der Dichtematrix. Die Parameter sind: $\alpha = \beta = 0.1$, $\alpha_- = d_+ = 1$ und $\alpha_+/\alpha_- = c_+/c_- = d_+/d_- = 2$.

Für die gleichen Parameter im Innern, diesmal jedoch mit endlichen Randraten, sind die Eigenwerte der Dichtematrix ϱ_1 für ein System von 6 Plätzen als Funktion der Koagulationsrate in Abb. 6.9 dargestellt. Das Spektrum hat im Vergleich zu den Abb. 6.6 und 6.8 eine sehr komplizierte Struktur. An einigen Stellen verschwindet der unterste Eigenwert und läßt vermuten, daß für diese Wahl der Parameter das Modell durch einen 7-dimensionalen MPZ dargestellt werden kann. Es zeigt sich jedoch, daß dieses Verhalten für größere Kettenlängen wieder verloren geht. Das unendliche System besitzt offenbar keine nichttrivialen endlich-dimensionalen Matrixproduktzustände als stationäre Zustände. Nur für $c_+ = 0$ tritt ein echter MPZ auf. An dieser Stelle können die Teilchen nicht koagulieren und der Zustand ist wieder durch (6.39) gegeben.

Eine auffallende Irregularität in diesem Spektrum ist die Existenz von gerade noch vermiedenen Kreuzungen von Eigenwerten. Solch ein Merkmal wird typischerweise in nichtintegrablen Systemen beobachtet und scheint auch hier im Zusammen-

hang mit der Nichtintegrität des Modells zu stehen.

6.7 Abschließende Bemerkungen

In den vorangegangenen Abschnitten über Nichtgleichgewichtsmodelle wurden ausschließlich die Dichtematrixspektren diskutiert. Die Gestalt dieser Spektren macht Aussagen über die Struktur des Grundzustandes, man kann ihnen aber nicht entnehmen, wie genau der Zustand berechnet wurde. Schaut man in den DMRG-Rechnungen genauer auf die Grundzustandsenergie, die nach (6.3) exakt null sein muß, so erkennt man, daß die alleinige Anwendung der Infinite-Size-Methode bereits für kurze Ketten sehr schlechte Ergebnisse liefert. Dasselbe wurde auch beim Strom beobachtet. Abgesehen von den Strukturen in den Dichtematrixspektren kann man auf diese Weise weder die Energie noch andere Erwartungswerte mit zufriedenstellender Genauigkeit berechnen. Dies scheint eine typische Eigenschaft der Nichtgleichgewichtsmodelle zu sein und unterscheidet sie damit deutlich von Quantenspinsystemen wie der Heisenberg-Kette, wo so etwas nicht beobachtet werden konnte.² Erst durch Anwendung der Finite-Size-Methode kann man eine genauere Approximation des Grundzustandsvektors erreichen [33]. Auch die Zahl der Sweeps, die nötig ist, liegt deutlich höher als im hermiteschen Fall, wo bereits ein bis zwei Sweeps ausreichend sind.

Es ist möglich, die oben beschriebenen Modelle durch Einführen weiterer Terme, wie zum Beispiel Paarvernichtung zweier benachbarter Teilchen oder Paarerzeugung auf zwei benachbarten leeren Plätzen noch weiter zu verallgemeinern. Die Dichtematrixspektren dieser Modelle sind allerdings äußerst komplex und zeigen keine deutlichen Hinweise auf endlich-dimensionale Matrixproduktzustände als stationäre Zustände.

Auch das Hüpfen von zwei verschiedenen Teilchensorten ist in den letzten Jahren untersucht worden [79,106–108]. In diesem Fall können die Variablen an jedem Gitterplatz einen von drei möglichen Werten annehmen: leer, besetzt mit einem Teilchen der Sorte 1 oder besetzt mit einem Teilchen der Sorte 2. Das führt auf ein Quantenspinsystem mit Spin-1-Variablen. Die Untersuchungen mit Hilfe der DMRG an stochastischen Modellen mit mehr als einer Teilchensorte haben gerade erst begonnen.

Obwohl es also das Eigenwertspektrum der reduzierten Dichtematrix ϱ_1 ermöglicht, gezielt nach einfach strukturierten Grundzuständen zu suchen, ist es noch nicht gelungen, einen solchen Zustand neu zu entdecken.

²In Rechnungen an drei gekoppelten Heisenberg-Spinketten wurde eine ähnliche Diskrepanz zwischen dem Trunkierungsfehler und dem Fehler in der Grundzustandsenergie beobachtet. Der Unterschied ist jedoch nicht so extrem wie in den hier betrachteten Nichtgleichgewichtsmodellen [65].

Dies trifft auch auf Gleichgewichtssysteme zu. Dort wurde das Heisenberg-Modell mit Spin 1 und zusätzlicher biquadratischer Wechselwirkung mit DMRG untersucht [109]. Der dabei auftretende zweidimensionale MPZ ist jedoch analytisch bekannt [95].