Kapitel 7

Zusammenfassung

Die Dichtematrix-Renormierung ist eine neue und sehr leistungsfähige numerische Prozedur zur Berechnung von Grundzustandseigenschaften von eindimensionalen Systemen. Das Ziel dieser Arbeit war es, diese Methode, die bisher hauptsächlich auf herkömmliche Quantensysteme angewandt worden ist, auch zur Berechnung der Eigenschaften von eindimensionalen Systemen anzuwenden, die nur formal quantenmechanischen Modellen entsprechen, deren Hamilton-Operator jedoch nicht länger hermitesch ist.

Um sich in die Methode einzuarbeiten und einen Anhaltspunkt über ihre Genauigkeit zu bekommen, haben wir die antiferromagnetische Heisenberg-Kette mit Spin 1/2 untersucht (Kap. 3). Wir haben sowohl die Grundzustandsenergien als auch Korrelationsfunktionen für verschiedenen Werte der z-Kopplung berechnet. Durch den Vergleich mit exakt lösbaren Spezialfällen und Resultaten aus exakten Diagonalisierungen kurzer Ketten haben wir die Genauigkeit des Verfahrens abgeschätzt. Trotz des vergleichsweise geringen numerischen Aufwandes konnte die Grundzustandsenergie auf acht bis neun Dezimalstellen genau bestimmt werden. Dies ist auch die Größenordnung des Trunkierungsfehlers. Für die Korrelationsfunktionen betrug die Genauigkeit drei bis vier Dezimalstellen für Systeme von etwa einhundert Spins. Aus dem asymptotischen Verhalten der Korrelationsfunktionen konnten die kritischen Exponenten in sehr guter Übereinstimmung mit den theoretisch vorhergesagten Werten ermittelt werden. Im vollständig isotropen Fall war die Genauigkeit aufgrund logarithmischer Korrekturterme geringer.

Im uniaxialen Fall $\Delta > 1$, bei dem sich das System in einer geordneten Phase befindet, wurden die Oberflächen- und die Volumenmagnetisierungen aus dem Verhalten von Spin-Spin-Korrelationsfunktionen berechnet (Abschnitt 3.4). Dabei hat sich gezeigt, daß diese Funktionen ein unerwartetes nichtmonotones Verhalten zeigen, das der Intuition widerspricht. Dieses Verhalten war vorher nicht bekannt und wurde in dieser Arbeit das erste Mal diskutiert.

Im uniaxialen Fall konnte zusätzlich das Spektrum der Dichtematrix analytisch bestimmt werden, indem eine Analogie zwischen der Dichtematrix und Ecken-Transfermatrizen ausgenutzt wurde. Die numerisch gefundenen Eigenwerte stimmen sehr gut mit den analytischen Vorhersagen überein.

Die DMRG-Methode wurde dann an einem XX-Modell mit rein imaginären Randfeldern getestet (Kap. 4). Dieses Modell ist eine sehr einfache nichthermitesche Verallgemeinerung der Heisenberg-Kette und durch Transformation auf ein System wechselwirkungsfreier Fermionen lösbar. Da bei nichthermiteschen Matrizen rechte und linke Eigenzustände nicht konjugiert komplex zueinenader sind, mußte zuerst die genaue Wahl der Dichtematrix geklärt werden. Da die DMRG jedoch nicht auf besonderen Eigenschaften des Hamilton-Operators beruht, sondern nur eine Prozedur zur Konstruktion eines reduzierten Satzes von Basiszuständen ist, wurde die Methode in ihrer ursprünglichen Fassung auch auf diesen nichthermiteschen Operator angewandt. Dabei wurde gezeigt, daß nur die Wahl einer hermiteschen Dichtematrix, die aus dem rechten Grundzustandsvektor und aus dem dazu konjugiert komplexen Vektor gebildet wird, vernünftige Ergebnisse liefern konnte. Wir haben für dieses Modell die Grundzustandsenergien berechnet und mit den exakten Werten verglichen. Die Abweichungen waren von der gleichen Größenordnung wie der Trunkierungsfehler. Dabei hat sich jedoch als Besonderheit herausgestellt, daß der Näherungswert der Energie keine monoton fallende Funktion der Zahl der berücksichtigten Zustände mehr ist. Das hängt damit zusammen, daß die DMRG im nichthermiteschen Fall kein Variationsverfahren mehr darstellt.

Nach diesem überzeugenden Test wurde ein physikalisch interessanteres Modell, nämlich die q-symmetrische Heisenberg-Kette berechnet (Kap. 5). Dieses Modell enthält in einer Spin-1/2-Formulierung zahlreiche Quantensysteme, von denen wir uns auf zwei Fälle, den Ising-Fall und den Potts-Fall, konzentriert haben. Für den Ising-Fall sind die verallgemeinerten Korrelationsfunktionen (die fermionischen Korrelationen) und ihre kritischen Exponenten analytisch bekannt. Im Potts-Fall sind die verallgemeinerten Korrelationen durch parafermionische Korrelationsfunktionen gegeben. Wir haben Profile dieser Korrelationen berechnet und durch lineare Fits sowie durch Skalenanalysen die Exponenten ermittelt. Im Ising-Fall konnten die Exponenten mit hoher Genauigkeit bestimmt werden, was durch Vergleich mit den analytischen Werten überprüft werden konnte. Im Potts-Fall jedoch bestehen noch Unklarheiten in Bezug auf die Resultate. Obwohl sowohl das Spektrum der Dichtematrix als auch die Skalenanalysen nahelegen, daß die Resultate im Potts-Fall genauer sind als im Ising-Fall, stehen die errechneten Exponenten im Widerspruch zu den Spinoreigenschaften der untersuchten Operatoren.

Verwendet man die q-symmetrische Kette mit ferromagnetischen Wechselwirkungen, so kann sie zur Beschreibung eines klassischen Modells dienen, bei dem sich Teilchen mit einer Vorzugsrichtung auf einer Kette bewegen. Da dieses Modell bereits studiert wurde und interessante Eigenschaften wie zum Beispiel das Profil der Teilchenkonzentration analytisch bekannt sind, bot sich eine Möglichkeit hier erstmalig ein stochastisches System mit DMRG zu untersuchen. Dabei wurde der Zusammenhang zwischen dem Spektrum der Dichtematrix, das die Genauigkeit des Verfahrens bestimmt, und der Struktur des Grundzustandes aufgeklärt.

Durch Hinzufügen von Randtermen, die die Erhaltung der Teilchenzahl zerstören, bekommt man Diffusionsmodelle, von denen bereits bekannt war, daß ihr Grundzustand für bestimmmte Werte der Parameter eine spezielle Form annimmt. Es handelt sich dabei um endlich-dimensionale Matrixproduktzustände. Es wurde gezeigt, daß diese Zustände im Eigenwertspektrum der Dichtematrix zu sehen sind. Durch Variation der Parameter konnten so in diesen Modellen die bereits theoretisch vorhergesagten Matrixproduktzustände aufgefunden werden. Die DMRG hat sich damit als eine Methode erwiesen, gezielt nach solchen Zuständen zu suchen (Kap. 6).

Es ist zwar noch nicht gelungen, einen bisher unbekannten Grundzustand, der sich als endlich dimensionaler Matrixproduktzustand schreiben läßt, mit Hilfe der DMRG zu finden. Jedoch hat die Untersuchung des Spektrums der Dichtematrix und der Verbindung zwischen diesem und der Struktur des Grundzustandes erst begonnen.

Auch lassen sich die erwähnten Modelle auf Systeme mit mehreren Teilchensorten verallgemeinern. Das führt dann auf Hamilton-Operatoren von Spinsystemen mit höheren Werten für den Spin. Auch hier steht die DMRG noch am Anfang.

Die Nichtgleichgewichtsmodelle unterscheiden sich von den herkömmlichen Spinketten erheblich in der Genauigkeit, mit der die DMRG Grundzustandsenergien liefert. Da in stochastischen Systemen die Grundzustandsenergie exakt null ist, bekommt man so in jedem DMRG-Schritt unmittelbar den realen Fehler der Methode. Dabei hat sich herausgestellt, daß die Methode unbeschränkt großer Systeme allein keine verläßlichen Resultate liefert. Im Gegensatz zu Spinsystemen ist hier die Anwendung der Methode fester Systemgröße unabdingbar. Der Grund für diese Besonderheit ist bisher noch nicht bekannt.