

Dissertation

Berechnungen spektraler Eigenschaften magnetischer
Moleküle
mittels DMRG Methode

von

Michael Czopnik, M.Sc

eingereicht an der

Universität Bielefeld
Fakultät für Physik

zur Erlangung des akademischen Grades
doctor rerum naturalium
(Dr. rer. nat)

am 25. Januar 2017

Betreuer & 1. Gutachter: Prof. Dr. Jürgen Schnack
2. Gutachter: Prof. Dr. Thomas Dahm

Inhaltsverzeichnis

Danksagung	5
1 Einleitung	7
2 Die Dichtematrix Renormierungsgruppen Theorie	9
2.1 Einleitung	9
2.2 Basistrunkierung	10
2.2.1 DMRG-Trunkierung	10
2.2.2 Reduzierte Dichtematrizen:	11
2.2.3 Zielzustände	15
2.3 DMRG-Algorithmus	17
2.3.1 Infinte-system Algorithmus	17
2.3.2 Finite-system Algorithmus	19
2.4 Implementierung und technische Details	21
2.4.1 Operatoren, Zustände und Quantenzahlen	23
2.4.2 Detaillierte Beschreibung der grundlegenden DMRG-Schritte .	25
2.4.3 Superblock Diagonalisierung	28
2.4.4 Berechnung der Erwartungswerte	31
2.4.5 Zielzustandstransformation	32
2.5 Beziehung zu Matrixproduktzuständen	34
2.6 Allgemeine Spingitter	36
3 $S = \frac{1}{2}$ Spinröhre	38
3.1 Modell und Methode	40
3.2 Ergebnisse	42
3.3 Vergleiche mit dem Dreiecksgitter	45
4 Alternierende Heisenbergkette mit zusätzlicher isotroper Dreiteilchen- Wechselwirkung	47

4.1	Klassische Betrachtung	48
4.2	Quantenphasendiagramm	50
4.2.1	Spin Liquid Phase	51
4.2.2	Spin Nematische Phase	52
4.3	Kurzreichweitige Wechselwirkungen	56
	Literaturverzeichnis	60
	Erklärung	71

Danksagung

Hiermit bedanke ich mich bei all jenen, die mich während meiner Promotion unterstützt haben. Im Besonderen danke ich

meiner Mutter und meinem verstorbenen Vater, die mich immer unterstützt und mir dieses Studium ermöglicht haben.

Prof. Dr. Jürgen Schnack für seine stets offene Tür und die Zeit, die er in die Betreuung dieser Arbeit investiert hat.

Prof. Nedko Ivanov für seine Hilfe im Bereich nematischer Spinsysteme.

Christian Heesing für die vielen Gespräche und die angenehme Zeit im Büro.

Hanne Litschewsky für die fabelhafte Betreuung.

Melanie Schell für ihre liebevolle Unterstützung und Geduld.

1 Einleitung

Frustrierte Spinsysteme wurden in den letzten Jahren kontinuierlich erforscht, angetrieben durch die Rolle der Frustration, die unkonventionelle magnetische Ordnungen oder sogar Störungen induziert [Sch09]. Insbesondere sind quasi eindimensionale Spinsysteme, bestehend aus Kette, Leiter und mehr beteiligten magnetischen Strukturen ein aktives Forschungsgebiet, das auf einem ständigen Austausch zwischen Materialsynthese, experimentellen Untersuchungen und theoretischen Vorhersagen beruht.

Typischerweise, wenn diese Systeme einem Magnetfeld ausgesetzt werden, treten unterschiedliche Verhaltensweisen auf, die von der Existenz von Magnetisierungsplateaus oder der Bose-Einstein-Kondensation von Magnonen bis zu der möglichen Existenz des Spinäquivalents einer suprasoliden Phase reichen. Von besonderem Interesse sind quasi eindimensionale Systeme als Leitern und Röhren, da sie einen interessanten und nicht trivialen Schritt von 1D zu 2D darstellen.

Als repräsentativ für geometrisch frustrierte homogene Spinketten kann man die antiferromagnetische Spin-1/2-Zickzackkette betrachten, für die Verbindungen wie CuGeO_3 oder SrCuO_2 ideale Beispiele sind [BR96, MK95]. Geometrisch frustrierte Spinnröhren sind Röhren mit einer ungeraden Anzahl von Beinen und nur benachbartem antiferromagnetischen Austausch.

Motiviert durch diese Erkenntnisse, behandeln wir in dieser Arbeit eine hexagonale Spinnröhre und untersuchen ihre magnetischen Eigenschaften sowie Auffälligkeiten. Als Methode unserer Wahl, verwenden wir die Dichtematrix Renormierungsgruppentheorie (DMRG), die uns erlaubt große Systeme mit großen Hilberträumen zu untersuchen. Diese numerische Methode basiert auf einer effizienten Trunkierung des Hilbertraums und erlaubt uns Informationen über das Energiespektrum zu erhalten, welche durch andere Methoden nicht zu erhalten sind [Whi92]. Obwohl die DMRG Methode auf beliebige Spinsysteme angewendet werden kann, liefert diese Methode die genauesten Ergebnisse für eindimensionale Modelle (Grundzustandseigenschaften). Durch ihre hohe Effizienz, ist diese Methode über Jahre zur Stan-

ardtechnik geworden, um eindimensionale Modelle zu untersuchen. Immer mehr wird dabei der Fokus auf magnetische Moleküle gesetzt. Da in den meisten Fällen die Spins in magnetischen Molekülen nicht eindimensional angeordnet sind, besteht eine weitere Herausforderung darin, das System in ein äquivalentes eindimensionales Modell zu umschreiben [USL13]. Wir verwenden die DMRG um statische Eigenschaften von Hexagonalröhren zu erhalten. Daneben untersuchen wir auch eine alternierende Heisenbergkette ($S = 1, \sigma = 1/2$) mit zusätzlicher isotroper Dreiteilchen-Wechselwirkung. Die DMRG erlaubt uns dabei, einen tiefen Blick in das Energiespektrum zu werfen.

Diese Arbeit ist dabei wie folgt aufgebaut: In Kapitel zwei beschäftigen wir uns im Detail mit der Dichtematrix Renormierungsgruppentheorie. Dabei geben wir einen detaillierten Einblick in das mathematische Konzept und in die Implementierung, die nötig ist, um diese Systeme zu untersuchen. In Kapitel 3 beschreiben wir unser erstes Modell, die hexagonale Spinröhre. Hier untersuchen wir das System auf seine magnetischen Eigenschaften und vergleichen dieses mit dem Modell des Dreieckgitters. Anschließend beschäftigen wir uns in Kapitel 4 mit der alternierenden Heisenbergkette mit zusätzlicher isotroper Dreiteilchen-Wechselwirkung. Nach einer detaillierten Einführung in das Modell untersuchen wir dieses Modell ebenfalls auf interessante magnetische Eigenschaften.

2 Die Dichtematrix Renormierungsgruppen Theorie (DMRG)

2.1 Einleitung

Dieses Kapitel soll dazu dienen, einen ersten Überblick in die Dichtematrix Renormierungsgruppentheorie (DMRG) zu geben. Entwickelt wurde die DMRG Methode im Jahre 1992 von S. White [Whi92] als eine Weiterentwicklung der Numerischen Renormierungsgruppen Theorie (NRG) [Wil75, BCP08]. Bei der Dichtematrix Renormierungsgruppentheorie handelt es sich um eine äußerst effektive, numerische Methode für eindimensionale Quantensysteme. Seit ihrer Einführung durch White, hat sich diese Methode zu einer häufig verbreiteten Methode für eindimensionale Systeme entwickelt [Sch05, PWKH99].

Berechnungen zu Eigenschaften wie der Grundzustandsenergie, Grundzustands Erwartungswerten oder Energielücken in Quantengittermodellen (z.B. des Heisenberg -Modell oder des Hubbard -Modell) erweisen sich durch die exponentiell wachsende Dimension des zugrunde liegenden Hilbert-Raumes als schwierig. Für eine Spinkette beispielsweise, (mit offenen Randbedingungen) bestehend aus L Spins mit einer individuellen Spinquantenzahl s und einer Kopplungskonstante die zu Eins gesetzt wird, lautet der Hamiltonian

$$H_{\text{Kette}} = \sum_{i=1}^{L-1} \tilde{s}_i \cdot \tilde{s}_{i+1}. \quad (2.1)$$

Im weiteren Verlauf dieser Arbeit wird dieses Modell zur Veranschaulichung über die Funktionsweise der DMRG genutzt. Die Dimension des Hilbertraumes beträgt $(2s + 1)^L$. Diese exponentielle Abhängigkeit von der Anzahl der Spins macht es schwierig selbst kleine Modelle zu untersuchen [SS10]. Eine Lösung dieses Problems können Monte Carlo Methoden sein. Diese leiden jedoch unter dem so genannten negative-sign Problem für fermionische oder frustrierte Spinsysteme [TW05]. Eine Lösung dieses Problems bieten hier die NRG und die DMRG Technik, denn diese sind approximative numerische Methoden, die auf der Trunkierung des Hilbertrau-

mes basieren und somit auf sehr große Systeme angewendet werden können.

Im folgendem Abschnitt werden einige Grundsätze der Basistrunkierung bei der NRG- und DMRG-Technik erläutert und miteinander verglichen. In den Unterkapiteln 2.3 und 2.4 wird der DMRG Algorithmus und die Implementierung eingeführt. In Abschnitt 2.5 werden die Matrixproduktzustände kurz erläutert. Abschnitt 2.6 befasst sich mit der Realisierung der DMRG Technik auf mehrdimensionale Spinsysteme. Im letzten Abschnitt werden die ersten Ergebnisse des DMRG Algorithmus präsentiert.

2.2 Basistrunkierung

Die Dichtematrix Renormierungsgruppe basiert auf einem numerischen Verfahren, welches auf einer Reduzierung des Hilbertraumes von Quantengittermodellen basiert. Das Variationstheorem besagt, dass die Grundzustandsenergie, die in einem reduzierten Hilbertraum berechnet wird immer größer oder gleich der exakten Grundzustandsenergie ist [Bal98]. Das bedeutet, dass die untere berechnete Grundzustandsenergie innerhalb des reduzierten Raumes die bessere Annäherung ist.

2.2.1 DMRG-Trunkierung

Angenommen, wir sind am Grundzustand eines Quantengittersystems interessiert, in unserem Beispiel eine einfache Spinkette wie sie in (2.1) beschrieben wurde. Unterteilen wir nun unser System in zwei Untersysteme, die wir “Block A ” und “Block B ” nennen. Für jeden dieser Blöcke existiert dann eine komplette Orthonormalbasis, $\{|i\rangle\}$ für Block “ A ” und $\{|j\rangle\}$ für Block B (siehe Abb. 1). Die Dimension der Basis der Blöcke bezeichnen wir mit D_A bzw. D_B .

Ein normierter Zustand $|\psi\rangle$ des kompletten System, auch “Superblock” genannt, kann wie folgt erweitert werden:

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^{D_A} \sum_{j=1}^{D_B} \psi_{ij} |i\rangle |j\rangle, \quad \sum_{i,j} |\psi_{ij}|^2 = 1. \quad (2.2)$$

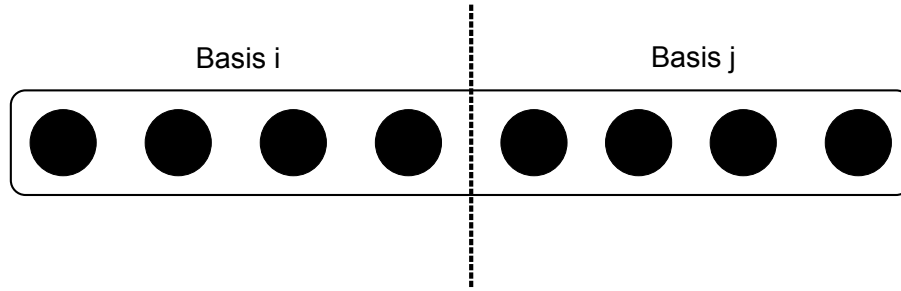


Abbildung 1: Unterteilung des Systems in zwei Blöcke. Die roten Kreise beschreiben die Spins [Umm12].

Der Zustand $|\psi\rangle$ kann z.B. den Grundzustand des Systems beschreiben. Im folgenden erläutern wir zunächst kurz das Konzept der reduzierten Dichtematrizen [BP02].

2.2.2 Reduzierte Dichtematrizen:

Teilt man ein System in zwei Blöcke A und B und das System befindet sich in einem allgemeinen gemischten Zustand ϱ , sind die reduzierten Dichtematrizen ϱ_A und ϱ_B definiert als [BP02]

$$\varrho_A \equiv \text{Tr}_B \varrho \quad \text{und} \quad \varrho_B \equiv \text{Tr}_A \varrho, \quad (2.3)$$

wobei Tr_B eine Spur über alle Basiszustände $|j\rangle$ von Block B beschreibt, z.B. $\text{Tr}_B\{\cdot\} \equiv \sum_j \langle j| \cdot |j\rangle$, und ebenfalls für Tr_A . Mit diesem Vorgang erhalten wir einen Operator, der nur auf den Hilbertraum der Teilsysteme wirkt. ϱ_A und ϱ_B haben dabei beide die Standardeigenschaften einer Dichtematrix [Blu12]. Der Erwartungswert eines Operators Q , der nur auf eines der beiden Teilsysteme wirkt, z.B. Teilsystem A kann geschrieben werden als [BP02]

$$\text{Tr}\{\varrho Q\} = \text{Tr}_A\{\varrho_A Q\}. \quad (2.4)$$

Befindet sich unser System in einem reinen Zustand $|\psi\rangle = \sum_{i,j} \psi_{i,j} |i,j\rangle$ mit $|i,j\rangle \equiv |i\rangle |j\rangle$, so dass $\varrho = |\psi\rangle \langle\psi| = \sum_{i,i',j,j'} \psi_{i,j} \psi_{i',j'} |i,j\rangle \langle i',j'|$, dann können wir die redu-

zierte Dichtematrix wie folgt schreiben:

$$\begin{aligned}\varrho_A &= \text{Tr}_B\{|\psi\rangle\langle\psi|\} = \sum_{i,i',j} \psi_{ij}\psi_{i'j} |i\rangle\langle i'|, \\ \varrho_B &= \text{Tr}_A\{|\psi\rangle\langle\psi|\} = \sum_{i,j,j'} \psi_{ij}\psi_{i,j'} |j\rangle\langle j'|.\end{aligned}\tag{2.5}$$

Beide Dichtematrizen haben hierbei von Null verschiedene Eigenwerte.

Die Aufgabe, die nun vor uns steht, ist eine Approximation für folgendes Problem zu finden:

$$|\tilde{\psi}\rangle = \sum_{a=1}^m \sum_{j=1}^{D_B} \tilde{\psi}_{aj} |a\rangle |j\rangle\tag{2.6}$$

mit $|\psi\rangle$ und $m < D_A$ für Block A . Vom Standpunkt der Mathematik ist eine Lösung des folgenden Problems: Wir benötigen eine Transformation U_{ai} zu orthonormalen Zuständen

$$|a\rangle = \sum_i U_{ai} |i\rangle \equiv \sum_i \langle i|a\rangle |i\rangle, \quad \langle a|a'\rangle = \delta_{aa'}\tag{2.7}$$

und Koeffizienten $\tilde{\psi}_{aj}$, so dass das Quadrat der Distanz

$$||\psi\rangle - |\tilde{\psi}\rangle|^2\tag{2.8}$$

minimal wird. Einsetzen von (2.2), (2.6) und (2.7) liefert

$$||\psi\rangle - |\tilde{\psi}\rangle|^2 = 1 + \sum_{a,j} \tilde{\psi}_{aj}^2 - 2 \sum_{a,i,j} \tilde{\psi}_{aj} U_{ai} \psi_{ij}.\tag{2.9}$$

Minimierung dieses Ausdrucks im Bezug auf $\tilde{\psi}_{aj}$ führt zu der Bedingung $\tilde{\psi}_{aj} = \sum_i U_{ai} \psi_{ij}$, so dass

$$||\psi\rangle - |\tilde{\psi}\rangle|^2 = 1 - \sum_{a,j} \tilde{\psi}_{aj}^2.\tag{2.10}$$

Das Minimum dieses Ausdrucks zu finden ist äquivalent zur Berechnung des Maximums von

$$\sum_{a,j} \tilde{\psi}_{aj}^2 = \sum_{a,i,i',j} U_{ai} U_{ai'} \psi_{ij} \psi_{i'j} \equiv \sum_{a,i,i'} U_{ai} U_{ai'} (\varrho_A)_{ii'},\tag{2.11}$$

wobei $(\varrho_A)_{ii'}$ die Matrixelemente der reduzierten Dichtematrix von Block A in der Basis $\{|i\rangle\}$ beschreibt. Die Eigenwerte w_A von ϱ_A haben nun die Eigenschaften $0 \leq w_a \leq 1$ und $\sum_{a=1}^{D_A} w_a = 1$. Umschreiben dieser Gleichung unter Zuhilfenahme von $U_{ai} = \langle i|a\rangle$ liefert

$$\sum_{a,j} \tilde{\psi}_{aj}^2 = \sum_{a=1}^m \langle a|\varrho_A|a\rangle. \quad (2.12)$$

Dieser Ausdruck wird maximal, wenn wir $|a\rangle$ als die Eigenvektoren von ϱ_A mit den größten Eigenwerten wählen [Sch05, Whi93]. Wenn wir also nur m Basiszustände für Block A behalten möchten, ist $|\psi\rangle - |\tilde{\psi}\rangle$ minimal und damit unsere Wellenfunktionsapproximation optimal, wenn wir wie folgt nähern:

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^{D_A} \sum_{j=1}^{D_B} \psi_{ij} |i\rangle |j\rangle \quad (2.13)$$

durch

$$|\tilde{\psi}\rangle = \sum_{a=1}^m \sum_{j=1}^{D_B} \tilde{\psi}_{aj} |a\rangle |j\rangle, \quad (2.14)$$

mit $\tilde{\psi}_{aj} = \sum_i \langle i|a\rangle \psi_{ij}$ und $|a\rangle$ den m Eigenvektoren von ϱ_A mit den größten Eigenwerten w_a . Der Fehler dieser Annäherung beträgt

$$|\psi\rangle - |\tilde{\psi}\rangle|^2 = 1 - \sum_{a=1}^m w_a \equiv \Delta w. \quad (2.15)$$

Δw ist hierbei das “trunkierte Gewicht” [Sch05] und bezeichnet ein Maß für den Fehler der Trunkierung. Bei vielen Systemen ist der Fehler der Energie pro Spin in einer trunkierten Basis, unter der Verwendung der DMRG, in etwa proportional zum trunkierten Gewicht [Sch05, LF96]. Unter Verwendung der Schmidt-Zerlegung [BP02, NC10, BB06] führt dies zu einer direkten Herleitung des optimalen Trunkierungsverfahrens. Beginnen wir ausgehend von (2.2) führt die Einzelwertzerlegung der Matrix ψ_{ij} zur Schmidt-Zerlegung von ψ [Sch05, BP02, NC10]:

$$|\psi\rangle = \sum_{\alpha=1}^{D_{\text{Schmidt}}} \sqrt{w_\alpha} |\alpha_A\rangle |\alpha_B\rangle, \quad (2.16)$$

mit $|\alpha_A\rangle$ und $|\alpha_B\rangle$ den Eigenvektoren der reduzierten Dichtematrix von Block A bzw. Block B und w_α den Eigenwerten, z.B.,

$$\varrho_A = \sum_{\alpha=1}^{D_{\text{Schmidt}}} w_\alpha |\alpha_A\rangle \langle \alpha_A|, \quad \varrho_B = \sum_{\alpha=1}^{D_{\text{Schmidt}}} w_\alpha |\alpha_B\rangle \langle \alpha_B|, \quad (2.17)$$

mit $D_{\text{Schmidt}} \leq \min(D_A, D_B)$. Beide reduzierten Dichtematrizen haben jetzt die gleichen Eigenwerte ($\neq 0$). Da $0 \leq \sqrt{w_\alpha} \leq 1$, tragen nur die Eigenvektoren der reduzierten Dichtematrix mit ihren größten Eigenwerten der Blockbasiszustände zum Zustand $|\psi\rangle$ bei. Die Schmidt-Zerlegung gibt weiterhin den Grad der Verschränkung zwischen den beiden Blöcken für den Zustand $|\psi\rangle$ an. Die von Neumann Entropie der reduzierten Dichtematrizen kann als Maß für die Verschränkung genutzt werden [BDSW96]:

$$S_{\text{vN}} = - \sum_{\alpha} w_\alpha \ln(w_\alpha). \quad (2.18)$$

Befindet sich der Superblock in einem Produktzustand ist, ist nur einer der Eigenwerte der reduzierten Dichtematrix von Null verschieden und die Verschränkung verschwindet. Wenn alle Eigenwerte der reduzierten Dichtematrix den selben Wert haben, ist die Verschränkung maximal [BP02]. Die maximale Anzahl an Verschränkungen zwischen den Blöcken [Sch05] erhalten wir, wenn wir die m Eigenvektoren mit den größten Eigenwerten behalten. Die trunkierte Entropie kann als

$$\Delta S = - \sum_{\alpha=m+1}^{D_{\text{Schmidt}}} w_\alpha \ln(w_\alpha), \quad (2.19)$$

definiert werden und ist ein Maß für die Genauigkeit unserer Berechnung [SS07, LNST08, Küc09]. Eine Reduktion auf m normierte Dichtematrix Eigenvektoren führt zu einem Zustand $|\tilde{\psi}\rangle$ der nicht normiert ist, da $\sum_{\alpha,j} \tilde{\psi}_{\alpha j}^2 = 1 - \Delta w$. Da jedoch $\Delta w \ll 1$ gilt, ist die Abschätzung des Fehlers in (2.15) noch immer für den normierten Zustand geeignet.

$$|\phi\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{1 - \Delta w}} |\tilde{\psi}\rangle = \sum_{\alpha=1}^m \frac{\sqrt{w_\alpha}}{\sqrt{1 - \Delta w}} |\alpha_A\rangle |\alpha_B\rangle \quad (2.20)$$

Eine explizite Rechnung zeigt:

$$\begin{aligned} \|\psi\rangle - |\phi\rangle\|^2 &= \sum_{\alpha=1}^m \left(\sqrt{w_\alpha} - \frac{\sqrt{w_\alpha}}{\sqrt{1-\Delta w}} \right)^2 + \sum_{\alpha=m+1}^{D_{\text{Schmidt}}} \frac{w_\alpha}{1-\Delta w} \\ &= 2 - \Delta w - 2\sqrt{1-\Delta w} + \frac{\Delta w}{1-\Delta w}. \end{aligned} \quad (2.21)$$

Unter Ausnutzung von $\sqrt{1-\Delta w} = 1 - \Delta w/2$ und $\Delta w/(1-\Delta w) \approx \Delta w$, erhalten wir

$$\|\psi\rangle - |\phi\rangle\|^2 = \|\psi\rangle - \frac{1}{\sqrt{1-\Delta w}} |\tilde{\psi}\rangle\|^2 \approx \Delta w, \quad (2.22)$$

welches für kleine Δw gilt. Δw ist hierbei in unseren Berechnungen kleiner als 10^{-4} . Anwendungstechnisch nutzt man trunkierte Basen für beide Blöcke. Dies führt zu dem so genannten “enviromental error” [Sch05, LF96]. Dieser Fehler kann jedoch durch den Einsatz des Finite-Size-Algorithmus mit seinen “Sweeps” (s. nächstes Kapitel) minimiert werden. Bevor wir nun den DMRG-Algorithmus beschreiben, führen wir nun zunächst aber den Begriff der “Zielzustände” ein.

2.2.3 Zielzustände

Die Zustände, die es zu approximieren gilt, werden Zielzustände genannt. Ein Beispiel hierfür ist z.B. der Grundzustand oder der niedrigste Energieeigenzustand. Hierbei muss der Zielzustand kein Energieeigenzustand sein. Es ist möglich mehr als einen Zielzustand zur selben Zeit zu haben. In diesem Fall gibt es zwei Möglichkeiten die reduzierten Dichtematrizen aufzubauen. (mit $|\psi_K\rangle$ den Zielzuständen):

- Man könnte die reduzierten Dichtematrizen einzeln für den individuellen Zielzustand aufbauen und diagonalisieren und dann mehrere Eigenzustände der einzelnen Dichtematrizen als neue Basiszustände wählen [Jec02].
- Man könnte eine gewichtete Dichtematrix bauen

$$\varrho = \sum_k p_k |\psi_k\rangle \langle \psi_k|, \quad \sum_k p_k = 1, \quad (2.23)$$

welche zur Berechnung der reduzierten Dichtematrizen (2.5) verwendet wird. Anschließend werden die m Eigenvektoren der reduzierten Dichtematrizen mit den größten Eigenwerten gewählt [Whi93]. Diese Zustände $|\psi_k\rangle$ müssen nicht orthogonal sein [Blu12].

In unserer Implementierung verwenden wir den zweiten Ansatz. Die Gewichte werden identisch gewählt, wenn $|\psi_k\rangle$ Energieeigenzustände sind.

2.3 DMRG-Algorithmus

Der DMRG-Algorithmus läuft in zwei unterschiedlichen Schritten ab: Die “Aufwärmphase”, auch “infinite-system algorithm” genannt, und dem so genannten “finite-system” Algorithmus [Whi93]. Beginnend in der Aufwärmphase wird das System (z.B. der Superblock) stetig vergrößert, bis die gewünschte Systemgröße erreicht ist. Danach beginnt der finite-system Algorithmus. Während dieses Algorithmus wird die Systemgröße konstant gehalten und die Basis eines Blockes optimiert.

2.3.1 Infinte-system Algorithmus

Der infinite-system Algorithmus besteht aus folgenden Schritten, die so lange wiederholt werden bis das gewünschte System der Länge L erreicht wird [Whi93].

1. Beginne mit kleinen Blöcken A und B , jeder bestehend aus nur einer Seite. Die Hamiltonians werden mit H_A und H_B dargestellt (mit der Blocklänge $l_A = l_B = 1$).
2. Vergrößere beide Blöcke um jeweils eine Stelle. Für die Spinkette mit offenen Randbedingungen, benötigt dieser Schritt die Berechnung $H_A^{\text{neu}} = H_A^{\text{alt}} + s_{l_A}^z s_{l_{A+1}}^z + \frac{1}{2} s_{l_A}^+ s_{l_A}^- + \frac{1}{2} s_{l_A}^- s_{l_{A+1}}^+$, und in der selben Weise für H_B^{neu} .
3. Baue den Superblock, bestehend aus den erweiterten Blöcken A und B und berechne die Zielzustände und die Erwartungswerte in der Superblock-Basis.
4. Konstruiere und diagonalisiere die reduzierten Dichtematrizen für Block “A” und “B” unter der Verwendung der im vorherigen Schritt erhaltenen Zustände.
5. Wenn nötig, trunkiere beide Basen auf m Zustände und transformiere die Block-Hamiltonians sowie die Blockoperatoren unter Verwendung der m Dichtematrix Eigenvektoren mit der größten Gewichtung als neue Basiszustände.
6. Gehe zu Schritt 2.

Der infinite-system Algorithmus ist in Abb. 2 dargestellt. Eine detailliertere Darstellung einer einzelnen Iteration ist in Abb. 3 skizziert. Es ist wichtig anzumerken, dass beide Blockbasen unvollständig sind. Dies bedeutet, dass der Trunkierungsfehler (gemessen am trunkierten Gewicht Δw) der einzige Fehler ist. Es gibt noch einen zusätzlichen “environmental error” Fehler der nicht vom trunkierten Gewicht Δw erfasst wird [Sch05, LF96].

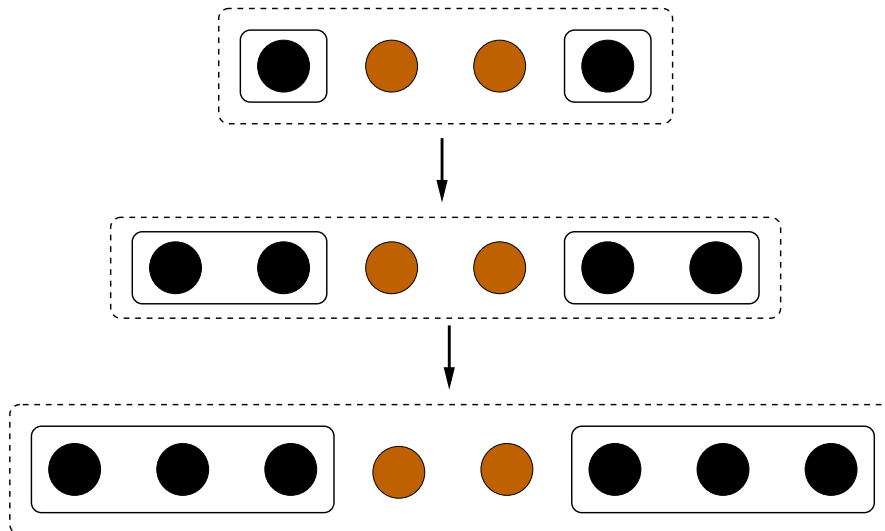


Abbildung 2: Schematische Darstellung des infinite system Algorithmus: Zwei exakte Stellen (rote Kreise) werden dem existierenden Block bei jedem Schritt hinzugefügt. Danach sind beide Blockbasen trunkiert. Die blauen Kreise repräsentieren Stellen, die bereits in den Blöcken enthalten sind.

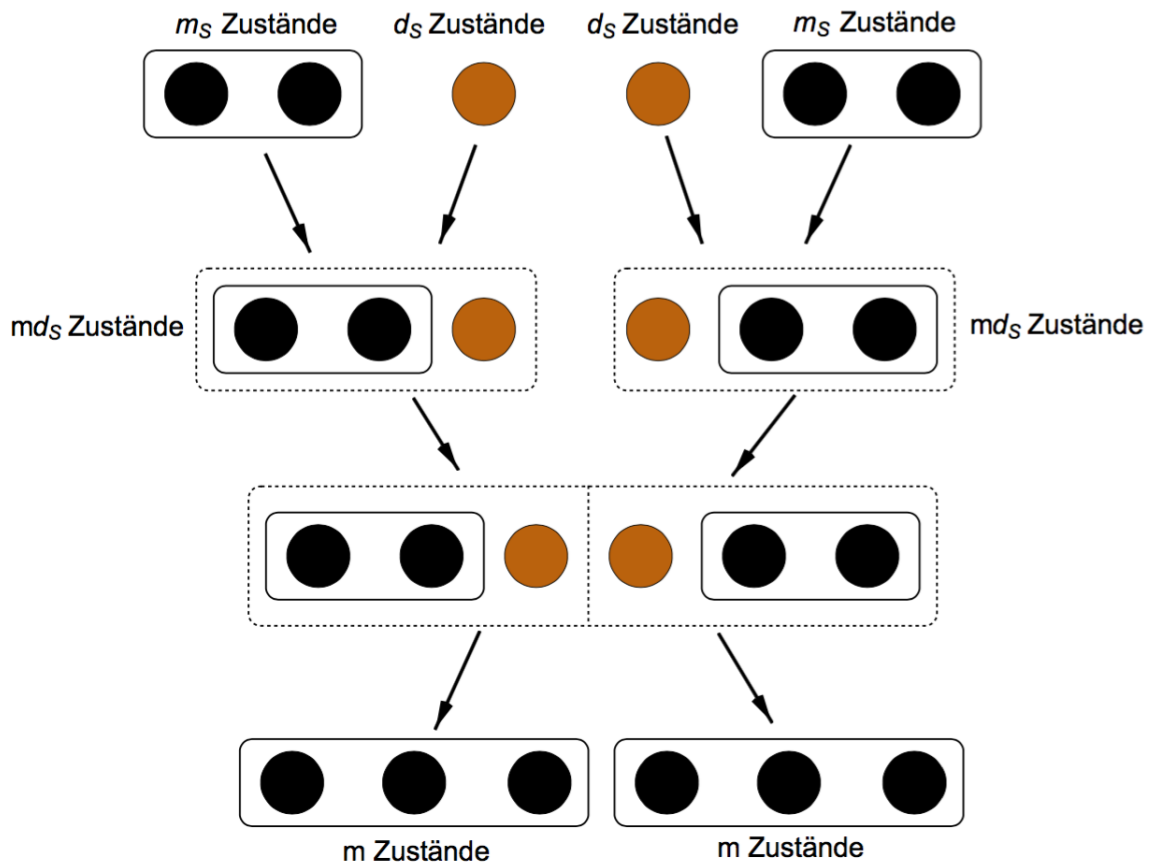


Abbildung 3: Detaillierte grafische Darstellung einer einzelnen Iteration im infinite-system Algorithmus: Die Blöcke A und B (jeweils mit m Basiszuständen) werden beide um eine Stelle vergrößert. Die erweiterten Blöcke bilden dann den Superblock. Die Zustände die von Interesse sind werden berechnet. Anschließend werden die reduzierten Dichtematrizen berechnet. Beide Blöcke werden wieder zu m Zuständen trunziert. Die resultierenden Blöcke werden dann für die nächste Iteration verwendet.

2.3.2 Finite-system Algorithmus

Der “environmental error” kann durch die Durchführung von so genannten “sweeps” reduziert werden. Dabei wird ebenfalls die Blockbasis optimiert [Whi93]. Die Systemgröße beim finite-system Algorithmus wird, anders als beim infinite-system Algo-

rithmus, beibehalten. Wiederum sind zwei Stellen des Systems exakt dargestellt. Bevor der finite-system Algorithmus gestartet wird, wird zunächst der infinite-system Algorithmus so lange wiederholt bis die gewünschte Systemlänge erreicht ist. Die Darstellungen von Block A und Block B müssen dabei für jede Blockgröße gespeichert werden. Die folgenden Schritte für den finite-system Algorithmus müssen so lange wiederholt werden, bis Konvergenz für die gesuchten Größen auftritt:

1. Block A wird um eine Stelle vergrößert, so dass die Systemgröße l_A zu $l_A + 1$ ansteigt. Ein zuvor gespeicherter Block B mit der richtigen Anzahl an Stellen wird aus dem Speicher geholt und ebenfalls um eine Stelle erweitert. Unter "richtige" Anzahl an Stellen versteht man, dass die Gesamtzahl an Stellen, $l_A + l_B + 2$, gleich der vordefinierten Systemgröße L ist.
2. Bilde den Superblock, bestehend aus den erweiterten Blöcken A und B . Anschließend werden die gewünschten Erwartungswerte (z.B. die Grundzustandsenergie) berechnet.
3. Erstelle und diagonalisiere die reduzierte Dichtematrix für Block A unter Verwendung der Zustände aus dem vorangegangenen Schritt.
4. Trunkiere die Basis von Block A und konstruiere den Block-Hamiltonian sowie die Blockoperatoren durch Ausnutzung der m Dichtematrix Eigenvektoren mit ihrem größten Gewicht. Speicher den Block. Wenn Block A nun weniger als $L - 2$ Stellen enthält, kehre zu Schritt 1 zurück. Andererseits fahre mit Schritt 5 fort.
5. Wiederhole die Schritte 1-4 mit vertauschten Rollen für Block A und B . Wenn Block B seine maximale Größe erreicht hat, wiederhole die Schritte 1-4 mit dem erneuten Anwachsen von Block A , so lange bis die Blöcke A und B die gleiche Größe haben. Nun wurde ein kompletter "sweep" durchgeführt. Für den nächsten sweep, starte wieder bei Schritt 1.

Einen kompletter sweep ist in Abb. 4 skizziert. Hierbei wurde das so genannte “two-side” Schema vorgestellt, d.h. das zwei Stellen exakt dargestellt werden bevor die Zustände des Superblocks berechnet werden. In unserer Implementierung, wählen wir die minimale Blockgröße derart, dass die Hilbertraum Dimension dieses minimalen Blocks so groß wie möglich ist, mit der Einschränkung kleiner als der m -Wert zu sein, der für den Aufwärmersweep genutzt wird. Man sucht daher das größte l_{min} , so dass $(2s + 1)^{l_{min}} \leq m$ weiterhin aufrecht erhalten wird. Auf diese Weise kann Rechenzeit eingespart werden. Wie bereits zuvor beschrieben, verläuft der Fehler der Grundzustandsenergie oft linear zum trunkierten Gewicht, so dass eine Extrapolation zu $\Delta w \rightarrow 0$ (oder $m \rightarrow \infty$) möglich ist. Jedoch ist für Systeme mit langreichweitigen Wechselwirkungen oder variierenden Kopplungsstärken das trunkierte Gewicht positionsabhängig, d.h. es hängt von der Positionierung der exakten Stellen ab. Ein Lösungsvorschlag wäre über die trunkierten Gewichte eines gesamten sweeps zu summieren um einen von der aktuellen Position unabhängigen Wert zu erhalten [McC02].

2.4 Implementierung und technische Details

In diesem Kapitel werden einige technischen Details des Algorithmus und einige Teile der DMRG Implementierung beschrieben, die für diese Arbeit wichtig sind. Die Implementierung wurde in C++ durchgeführt [Str]. Der Begriff der Blöcke, Plätze und der Begriff des Superblocks ist ein wichtiger Teil der DMRG Technik. Ein Block ist eine Sammlung von Matrizen und wird durch eine Klasse in C++ dargestellt. Gespeichert werden die Blockhamiltonian Darstellung und die Darstellung der s_i^z und s_i^+ für alle Positionen, die im Block enthalten sind. Die Darstellungen der Matrizen für s_i^z und s_i^+ werden für die Konstruktion der vergrößerten Blöcke und des Superblocks benötigt. Um eine S^z Symmetrie auszunutzen, müssen die Matrizen eine besondere Form haben, diese wird später noch diskutiert. Die Block-Klasse liefert uns einige sinnvolle Funktionen, die uns erlauben eine Position zum Block hinzuzufügen. Des weiteren, wenn andere Observablen außer der totalen Energie berechnet

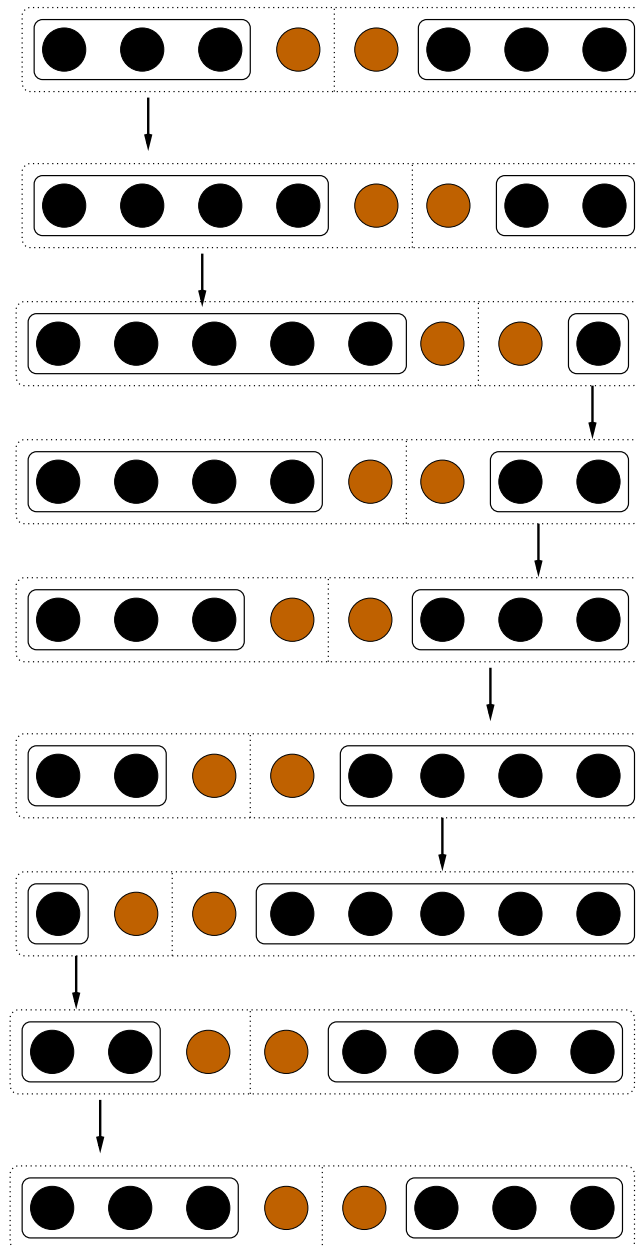


Abbildung 4: Schematische Darstellung eines kompletten Sweeps im finite-system Algorithmus. In jeder Superblockkonfiguration sind zwei Stellen exakt dargestellt (rote Kreise). Ein Block wird aus dem vorhergehenden Schritt genommen, während der andere aus dem Speicher verwendet wird. Die Trunkierung wird nur auf einen Block angewendet.

werden sollen, müssen die zugehörigen Operator Darstellungen ebenfalls gespeichert werden. Ein Superblock besteht aus Blöcken und die zugehörigen darstellenden Klassen bieten die Funktionen für die Berechnung von Zuständen und der reduzierten Dichtematrix.

2.4.1 Operatoren, Zustände und Quantenzahlen

Für das isotrope Heisenberg-Modell kommutiert $S^z = \sum_{i=1}^L s_i^z$ mit dem Hamiltonian. Dies bedeutet, dass alle Eigenzustände des Heisenberg-Hamiltonians nach der magnetischen Quantenzahl M gekennzeichnet werden können. Der Hamiltonian des kompletten Systems, sowie die “Block-Hamiltonians” und die Operatoren $s_i^z, s_i^{+/-}$ weisen jetzt eine Blockstruktur auf (s. Abb. 5). Unter Ausnutzung dieser Symmetrie führt dies zu einer starken Verringerung unseres Speicherbedarfs und zu einer Beschleunigung der Rechnung. Deweiteren können zusätzlich direkt die Energie-Eigenzustände in S^z Unterräumen berechnet werden. Die M Quantenzahl eines Blockzustands $|a\rangle$ wird mit $M(a)$ bezeichnet. Danach sind der Block-Hamiltonian H_A und die s_i^z Operatoren für alle Plätze Block-Diagonal, d.h. $\langle a|H_a|a'\rangle = 0$ und $\langle a|s_i^z|a'\rangle = 0$ für $M(a) \neq M(a')$. Da $s_i^- = (s_i^+)^{\dagger}$, besteht somit keine Notwendigkeit die s_i^- Operator-Darstellungen zu speichern. Für die s_i^+ Operatoren haben wir die Auswahlregel $\langle a|s_i^+|a'\rangle = 0$ für $M(a) \neq M(a') - 1$, welche zu einer nicht-diagonalen Blockstruktur führt (falls die Basis Zustände entsprechend ihren M Quantenzahlen geordnet werden). Die gleichen Überlegungen gelten natürlich auf für Block B .

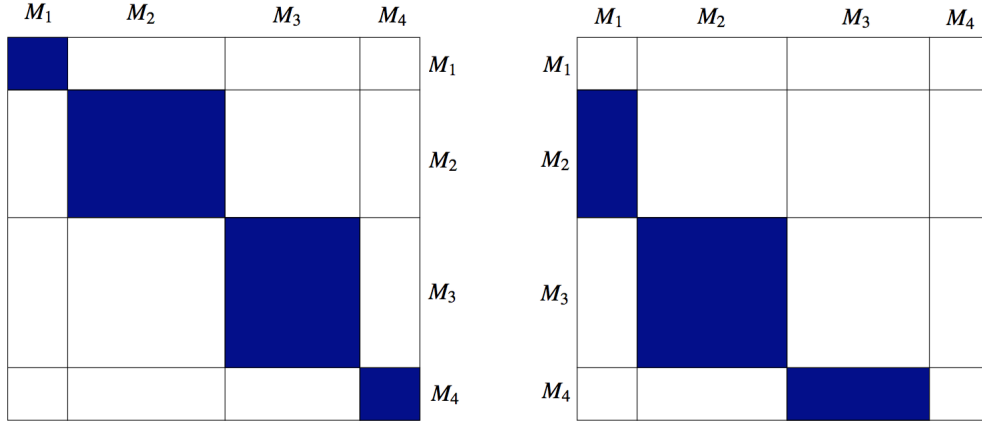


Abbildung 5: Schematische Darstellung der Blockstruktur der Operator Darstellungen. Untermatrizen die von null verschiedene Elemente enthalten sind blau dargestellt. Links: Block-Diagonal Struktur (s_i^z , $H_{A/B}$ und $\rho_{A/B}$) Rechts: Nicht-Diagonalstruktur mit den von Null verschiedenen Untermatrizen unter der Hauptdiagonalen (s_i^+). Die Werte M_i bezeichnen die M Quantenzahlen der S^z Unterräume und sind so geordnet, dass $M_i < M_{i+1}$.

Das Anfügen einer Position zum Block führt folglich zu einer Vergrößerung von dessen Basis. Die Blockstruktur, wie oben erwähnt, besteht aber weiterhin für die vergrößerten Blöcke, wenn die Basiszustände richtig geordnet sind. Die Zuführung eines Platzes mit der Basis $\{|a\rangle\}$ zum Block A mit der Basis $\{|\alpha\rangle\}$ liefert uns die Produktbasis $\{|a\rangle|\alpha\rangle\}$ für den erweiterten Block. Da M additiv ist, hat der Zustand $|a\rangle|\alpha\rangle$ die Quantenzahl $M(a) + M(\alpha)$. Wenn ein Superblockzustand (zwei Blöcke mit zwei Stellen)

$$|\psi\rangle = \sum_{a,\alpha,b,\beta} \psi_{a,\alpha,b,\beta} |a\rangle|\alpha\rangle|b\rangle|\beta\rangle \equiv \sum_{i,j} \psi_{ij} |i\rangle|j\rangle \quad (|i\rangle \equiv |a\rangle|\alpha\rangle, |j\rangle \equiv |b\rangle|\beta\rangle) \quad (2.24)$$

ein S^z Eigenzustand mit der magnetischen Quantenzahl M_0 ist, dann besitzt dieser Zustand eine Blockstruktur, da $\psi_{a,\alpha,b,\beta} = 0$ für $M(a) + M(\alpha) + M(b) + M(\beta) \neq M_0$ (oder $\psi_{ij} = 0$ für $M(i) + M(j) \neq M_0$). Die reduzierten Dichtematrizen, unter Verwendung dieses Zustands, besitzen ebenfalls eine Blockstruktur. Die reduzierte Dichtematrix für Block A ist definiert als $\rho_{i'i'} = \sum_j \psi_{ij} \psi_{i'j}$. Von Null verschiedene Einträge

können nur auftreten, wenn $M(i) + M(j) = M_0$ ist und $M(i') + M(j) = M_0$. Eine Kombination dieser Bedingungen führt zu $M(i) = M(i')$. Daher sind die reduzierten Dichtematrizen auch Blockdiagonal, solange die vergrößerten Basen sortiert sind, so dass $M(i) \leq M(i+1)$ oder $M(i) \geq M(i+1)$.

Operatoren, Zustände und die reduzierten Dichtematrizen können effizient durch “Sparse Block-Matrizen” dargestellt werden. Hierfür speichert man nur die Untermatrizen für die die entsprechenden Auswahlregeln erfüllt sind (s. Abb. 5).

2.4.2 Detaillierte Beschreibung der grundlegenden DMRG-Schritte

Die wichtigsten Schritte die für den Ablauf des DMRG-Algorithmus sind:

1. Anfügen einer Position zum Block,
2. Aufbauen des Superblocks,
3. Berechnung der Zielzustände,
4. Trunkierung der Basis, d.h. Transformation der Operatoren nach $T^\dagger OT$, wobei T durch eine Rechtecksmatrix $md_S \times m$ dargestellt wird.

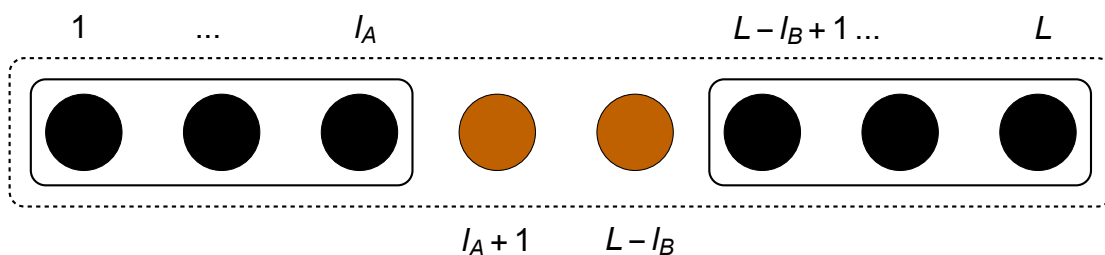


Abbildung 6: Nummerierung der Positionen im Superblock. Für den finite-system Algorithmus erhalten wir $l_A + l_B + 2 = L$, so dass $L - l_B = l_A + 2$. Andererseits wächst das System von beiden Enden und die Blöcke bleiben in der “Aufwärmphase” verbunden.

Die eben aufgeführten Schritte werden nun im Detail beschrieben:

1. Die Länge der Blöcke bezeichnen wir wieder vor der Addition einer Position weiterhin als l_A bzw. l_B . Die Operatoren hierzu lauten $s_{l_A+1}^z(s_{L-l_B}^z$ und $s_{l_A+1}^+(s_{L-l_B}^+)$ und die Basiszustände werden beschrieben als $|\alpha\rangle$ ($|\beta\rangle$). Die Basiszustände des erweiterten Blocks A können geschrieben werden als $|i\rangle \equiv |a\rangle |\alpha\rangle$. Wir wählen $i(a, \alpha)$, so dass die Zustände $|i\rangle$ nach der magnetischen Quantenzahl mit $M(i) \leq M(i+1) \forall i$ geordnet sind. Die Basiszustände des erweiterten Blocks B sind ebenfalls geordnet und können als $|j\rangle \equiv |\beta\rangle |b\rangle$ geschrieben werden. Unter Verwendung der Basistransformation $i(a, \alpha)$ und $j(\beta, b)$, können alle Operator Darstellungen auf die vergrößerten Basen transformiert werden, d.h. $O_{aa'} \rightarrow O_{aa'} \delta_{\alpha\alpha'} \rightarrow O_{ii'}$ für einen Blockoperator und $O_{\alpha\alpha'} \rightarrow \delta_{aa'} O_{\alpha\alpha'} \rightarrow O_{ii'}$ für einen Positionsoperator ($i' \equiv i(a', \alpha')$). Die Hamiltonians der vergrößerten Blöcke können nun wie folgt berechnet werden:

$$\begin{aligned} (H_A^{\text{neu}})_{i(a,\alpha)i(a',\alpha')} &= (H_A^{\text{alt}})_{aa'} \delta_{\alpha\alpha'} + (s_{l_A}^z)_{aa'} (s_{l_A+1}^z)_{\alpha\alpha'} \\ &+ \frac{1}{2} (s_{l_A}^+)_{aa'} (s_{l_A+1}^-)_{\alpha\alpha'} + \frac{1}{2} (s_{l_A}^-)_{aa'} (s_{l_A+1}^+)_{\alpha\alpha'} \end{aligned} \quad (2.25)$$

und

$$\begin{aligned} (H_B^{\text{neu}})_{j(\beta,b)j(\beta',b')} &= \delta_{\beta\beta'} (H_B^{\text{alt}})_{bb'} + (s_{L-l_B}^z)_{\beta\beta'} (s_{L-l_B+1}^z)_{bb'} \\ &+ \frac{1}{2} (s_{L-l_B}^+)_{\beta\beta'} (s_{L-l_B+1}^-)_{bb'} + \frac{1}{2} (s_{L-l_B}^-)_{\beta\beta'} (s_{L-l_B+1}^+)_{bb'} \end{aligned} \quad (2.26)$$

Für Systeme mit Langreichweitenwechselwirkung würden hierbei mehr Terme auftreten.

2. Der Superblock Hamiltonian wird nicht explizit konstruiert. Die Matrixelemente des Superblock Hamiltonians mit $J = 1$ können dargestellt werden als

$$\begin{aligned} (H_{\text{super}})_{ii'jj'} &= (H^{\text{neu}})_{ii'} \delta_{jj'} + \delta_{ii'} (H_B^{\text{neu}})_{jj'} + (s_{l_A+a}^z)_{ii'} (s_{L-l_B}^z)_{jj'} \\ &+ \frac{1}{2} (s_{l_A+1}^+)_{ii'} (s_{L-l_B}^-)_{jj'} + \frac{1}{2} (s_{l_A+1}^-)_{ii'} (s_{L-l_B}^+)_{jj'} \end{aligned} \quad (2.27)$$

Hier bezeichnet $l_A + 1$ den Index der zugefügten Seite zu Block A , und $L - l_B$ beschreibt den Index der zu Seite B hinzugefügt wurde, Abb. 6. Auch hier ist die Verallgemeinerung auf Systeme mit weitreichenden Wechselwirkungen ebenfalls problemlos möglich.

3. Der Lanczos Algorithmus [Saa03] wird jetzt benötigt um den Grundzustand und die untersten angeregten Zustände zu berechnen. Der Lanczos Algorithmus braucht, neben einigen einfachen Vektoroperationen, die Operation $|\phi\rangle = H|\psi\rangle$ für die Berechnung dieser Zustände. Der detaillierte Algorithmus ist im nächsten Unterkapitel beschrieben.
4. Die reduzierten Dichtematrizen für die beiden Blöcke sind wie folgt definiert

$$\begin{aligned} (\varrho_A)_{ii'} &= \sum_j \psi_{ij} \psi_{i'j} \\ (\varrho_B)_{jj'} &= \sum_i \psi_{ij} \psi_{ij'}, \end{aligned} \tag{2.28}$$

wobei $|\psi\rangle$ den Zielzustand beschreibt. Es kann hierbei mehr als einen Zielzustand geben. Dann berechnen sich die Dichtematrizen nach (2.23). Es handelt sich dabei um einfache Matrix-Matrix Produkte:

$$\begin{aligned} \varrho_A &= \psi \psi^T, \\ \varrho_B &= \psi^T \psi. \end{aligned} \tag{2.29}$$

Die Untermatrizen der Dichtematrizen werden unter Benutzung der *LAPACK* Routinen diagonalisiert [ABB⁺99], so dass $\varrho|\tilde{a}\rangle = w_{\tilde{a}}|\tilde{a}\rangle$ und $\varrho_B|\tilde{b}\rangle = w_{\tilde{b}}|\tilde{b}\rangle$. Die Eigenwerte sind dann so geordnet, dass $w_{\tilde{a}} \geq w_{\tilde{a}+1}$ und $w_{\tilde{b}} \geq w_{\tilde{b}+1}$. Die Transformationsmatrizen der Basistrunkierung von Block A und B haben die Elemente

$$T_{i\tilde{a}}^A = \langle i|\tilde{a}\rangle \quad \text{und} \quad T_{j\tilde{b}}^B = \langle j|\tilde{b}\rangle, \tag{2.30}$$

mit $1 \leq \tilde{a} \leq m$ und $1 \leq \tilde{b} \leq m$, d.h. die m Eigenvektoren der reduzierten Dichtematrizen mit den größten Eigenwerten stehen in den Spalten der $md_S \times m$

Transformationsmatrizen. Die Block Hamiltonians und die Blockoperatoren mit den trunkierten Basen werden wieder nach $O := T^T O T$ transformiert. dabei ist darauf zu achten, dass die Operationen in dem Sinne vollzogen werden, dass die Blockstrukturen erhalten bleiben, und die Listen mit den M Quantenzahlen dementsprechend aktualisiert werden.

2.4.3 Superblock Diagonalisierung

Der Lanczos Algorithmus [Saa03] wird für die Berechnung des Grundzustandes und der niedrig liegenden angeregten Zustände (und deren entsprechenden Eigenwerten) verwendet. Das Lanczos Verfahren ist ein effektives numerisches Verfahren zur Berechnung von extremalen Eigenwerten und der entsprechenden Eigenvektoren einer Matrix, beispielsweise die Darstellung eines Hamiltonians H . Beginnend mit einem Startvektor $|\phi_0\rangle$, generiert der Lanczos Algorithmus einen Krylov Unterraum $K_i(H, |\phi_0\rangle) \equiv \text{span}\{|\phi_0\rangle, H|\phi_0\rangle, H^2|\phi_0\rangle, H^3|\phi_0\rangle, \dots, H^{i-1}|\phi_0\rangle\}$. In diesem Unterraum ist H durch eine $i \times i$ dargestellt, die auch Lanczos Matrix genannt wird. Die extremalen Eigenwerte dieser Matrix sind Näherungen der extremalen Eigenwerte von H . Diese Näherungen sind schon sehr gut für einen Wert von i der viel kleiner ist als die Dimension des darunter liegenden Hilbertraums.

Im Lanczos Verfahren behält man ebenso die Vektoren aus den vorherigen Schritten. Dies führt zu einer viel schnelleren Konvergenz des Lanczos Algorithmus. Der Lanczos Algorithmus ist sehr einfach zu implementieren, da die orthonormierten Basisvektoren des Krylov Unterraums mit einer einfachen Drei-Term-Rekursion erzeugt werden können, so dass nur drei Zustände gespeichert werden müssen [Saa03]:

$$\beta_{i+1} |\phi_{i+1}\rangle = H |\phi_i\rangle - \alpha_i |\phi_i\rangle - \beta_i |\phi_{i-1}\rangle, \quad \alpha_i = \langle \phi_i | H | \phi_i \rangle. \quad (2.31)$$

Darüber hinaus ist die durch dieses Verfahren erzeugte Matrix (die ‐Lanczos Matrix‐

L_i) tridiagonal:

$$L_i = \begin{pmatrix} \alpha_0 & \beta_1 & 0 & \dots & & 0 \\ \beta_1 & \alpha_1 & \beta_2 & & & \\ 0 & \beta_2 & \alpha_2 & \ddots & & \\ \vdots & & \ddots & \ddots & \beta_{i-2} & \\ & & & \beta_{i-2} & \alpha_{i-2} & \beta_{i-1} \\ 0 & & & & \beta_{i-1} & \alpha_{i-1} \end{pmatrix}. \quad (2.32)$$

Unsere Implementierung des Algorithmus funktioniert nach [Saa03], beginnend mit einem normierten Startvektor $|\phi_0\rangle$ und $i = 0$ ($|\phi_{-1}\rangle \equiv 0, \beta_0 \equiv 0$). Die folgenden Schritte werden durchgeführt, bis Konvergenz erreicht ist:

1. $|\tilde{\phi}_i\rangle = H|\phi_i\rangle - \beta_i|\phi_{i-1}\rangle$.
2. $\alpha_i = \langle \tilde{\phi}_i | \phi_i \rangle$. Die tridiagonale Lanczos Matrix L_i (s. 2.32) wird aktualisiert und diagonalisiert. Wenn $|E_i^{\text{Lanczos}} - E_{i-1}^{\text{Lanczos}}| < \epsilon_1$ erreicht wird, wird das Verfahren gestoppt. E_i^{Lanczos} ist der kleinste Eigenwert der Lanczos Matrix L_i .
3. $|\tilde{\phi}_i\rangle := |\tilde{\phi}_i\rangle - \alpha_i|\phi_i\rangle$ und darüber hinaus Reorthogonalisation gegen zuvor berechnete Lanczos Vektoren und anderen Vektoren, falls erforderlich.
4. $\beta_{i+1} = \sqrt{\langle \tilde{\phi}_i | \tilde{\phi}_i \rangle}$. Wenn $|\beta_{i+1}| < \epsilon_2$ erreicht, dann wird angehalten.
5. $|\phi_{i+1}\rangle = \frac{1}{\beta_{i+1}}|\tilde{\phi}_i\rangle$.
6. $i := i + 1$ und gehe zu Schritt 1.

Wir speichern alle unsere zuvor berechneten Lanczos Vektoren in unserer Implementierung. Dies dient einer einfacheren Konstruktion der Eigenzustände von H . Speichert man zu wenige Vektoren so kann es vorkommen, dass ein zweiter Durchlauf gestartet werden muss [Mal03]. Die Rekursionsrelation aus (2.31) führt nur in exakter Berechnung zu orthogonalen Zuständen. Auf einem Computer, können die meisten reellen Zahlen nicht genau dargestellt werden. Dies führt zu einem Verlust der Orthogonalität der Lanczos Vektoren nach einigen Iterationen [Par80]. Wir

orthogonalisieren nach einigen Iterationen (in der Regel 10) die neu geschaffenen Lanczos Vektoren gegen alle zuvor erstellten. Hat man eine gute Idee für die Wahl eines Startvektors $|\phi_0\rangle$, wie es der Fall für den finite-system DMRG Algorithmus ist, benötigt man oft weniger als 10 Iterationsschritte für den Lanczos Algorithmus um konvergierte Ergebnisse zu erhalten. Wenn man keine gute Vermutung anstellt, ist es zweckmäßig, einen normierten Startvektor mit zufälligen Einträgen zu verwenden [Par80]. Mit einem Zufallsvektor als Anfangszustand sind in der Regel $\mathcal{O}(100)$ Lanczos Iterationen erforderlich um konvergierte Ergebnisse zu erhalten. In der oben dargestellten Form, ist es nicht möglich, entartete Eigenzustände von H zu lösen [San11]. Wir verwenden folgenden Ansatz um dieses Problem zu umgehen [San11]: Zunächst berechnen wir den Grundzustand von H . Für die Berechnung des nächsten Zustands starten wir erneut den Lanczos Algorithmus und orthogonalisieren explizit den Startvektor gegenüber dem zuvor berechneten Grundzustand. Zusätzlich, wird in jeder Iteration ausdrücklich der aktuelle Lanczos-Vektor gegenüber dem Grundzustand orthogonalisiert. Zur Berechnung eines dritten Zustandes, gehen wir ähnlich wie zuvor vor und orthogonalisieren gegenüber den zuvor berechneten Eigenzuständen. So ist es leicht möglich, Eigenzustände von entarteten Eigenwerten mit Hilfe des Lanczos-Algorithmus zu berechnen.

Neben einfachen Vektor-Operationen benötigt der Lanczos Algorithmus nur die Anwendung von H auf einen Zustand. Für den DMRG Algorithmus hat das den Vorteil, dass der Superblock Hamiltonian H_{super} nicht explizit als Matrix aufgebaut werden muss. Stattdessen, kann das Matrix-Vektor-Produkt zurückgeführt werden auf ein einfaches Matrix-Matrix-Produkt [HJFW04]. Wir gehen von der Form des Superblock Hamiltonian aus (2.27) aus. Die Struktur des Superblock Hamiltonian ist:

$$H_{\text{super}} = \sum_k A_k B_k, \quad (2.33)$$

wobei A_k die Operatoren beschreibt, die auf Block A wirken und dementsprechend B_k auf B . Das Produkt von H_{super} mit dem Zustand $|\psi\rangle$ kann geschrieben werden

als

$$\psi'_{ij} \equiv \langle i, j | H_{\text{super}} | \psi \rangle = \sum_k \sum_{i'j'} (A_k)_{ii'} (B_k)_{jj'} \psi_{i'j'}. \quad (2.34)$$

$|i\rangle$ beschreibt die Basiszustände des linken Blocks und $|j\rangle$ die des rechten Blocks. Die Ausdrücke $\sum_{i',j'} (A_k)_{ii'} (B_k)_{jj'} \psi_{i'j'}$ sind Matrix-Matrix-Produkte [HJFW04]:

$$\psi' = \sum_k A_k (\psi B_k^T), \quad (2.35)$$

wobei ψ' und ψ die Darstellungen von Zustandsvektoren in der Superblockbasis beschreiben. Daher kann das Produkt aus dem Superblock mit einem Superblock Zustand zurück in Matrix-Matrix Produkten mit einem Kostenaufwand von $\mathcal{O}(m^3 d_S^3)$ geführt werden. Die Berechnung des Eigenzustandes kann sehr aufwendig und zeintensiv, so dass die numerische Komplexität ebenfalls mit $\mathcal{O}(m^3 d_S^3)$ angegeben werden kann. Die Umformulierung der Operation $H_{\text{super}} | \psi \rangle$, wie oben beschrieben, wird durch die Verwendung der *BLAS* Bibliothek ermöglicht. Die Matrizen haben alle eine spezielle Blockstruktur aufgrund der S^z Symmetrie, so dass das Matrixprodukt ein Produkt aus dünnbesetzten Blockmatrizen und *BLAS* Routinen auf Ebene von dichten Untermatrizen ist. Hier ist es jetzt möglich, den Algorithmus *OpenMP* zu parallelisieren. Dies kann von Hand erfolgen oder durch die Verknüpfung mit hochoptimierten *BLAS* Routinen der *MKL* [HJFW04]. Hier wurde der zweite Ansatz verwendet. Da jedoch die dichten Untermatrizen recht klein sind, ist es nicht ratsam, das Programm auf vielen Kernen für eine einzige Rechnung laufen zu lassen.

2.4.4 Berechnung der Erwartungswerte

Der Erwartungswert von einigen Operatoren O kann einfach durch Verwendung der DMRG berechnet werden. Für die Berechnung des Erwartungswerts in Bezug auf $|\psi\rangle$ (z.B. der Grundzustand oder ein angeregter Zustand), der in der Superblockbasis dargestellt wird, brauchen wir die Darstellung der Operatoren in der aktuellen Block Basis, d.h. wir brauchen die Matrixelemente $O_{ii'}$. Wir gehen hier davon aus, dass der Operator auf den linken Block wirkt. Dann wird der Erwartungswert wie folgt

berechnet

$$\langle \psi | O | \psi \rangle = \sum_{i,i',j} \psi_{ij} O_{i'i} \psi_{i'j}. \quad (2.36)$$

Die Verallgemeinerung auf einen Operator der auf den rechten Block wirkt, wird analog berechnet.

2.4.5 Zielzustandstransformation

Es ist möglich, die Zielzustände von einem Schritt zum nächsten Schritt zu transformieren, wie von White in 1996 entwickelt [Whi96]. Diese Transformation führt nicht zu einem exakten Eigenzustand des Superblock Hamiltonian, ist in den meisten Fällen aber immer noch nützlich [Sch05]. Dabei handelt es sich um ein Verfahren, dass die Anzahl der Schritte für Konvergenz erforderlich sind erheblich reduziert. Das Verwenden dieser Zielzustands Transformation beschleunigt das Programm um einen Faktor von 10. Für die Wellenfunktion Transformation des Programms müssen die Transformationsmatrizen für alle Schritte und für beide Blöcke gespeichert werden.

Bisher war die Notation wie folgt. Die Basiszustände von Block A wurden bezeichnet als $|a\rangle$ und die von Block B als $|b\rangle$. Die Stelle die zu Block A hinzugefügt wurde hat die Basiszustände $|\alpha\rangle$, und die Stelle die Block B zugefügt wurde hat die Basis $|\beta\rangle$. Die Basen der erweiterten Blöcke wurden beschrieben als $\{|a\rangle |\alpha\rangle\} = \{|i\rangle\}$ und $\{|\beta\rangle |b\rangle\} = \{|j\rangle\}$. Um [Sch05, Whi96] zu folgen, ändern wir nun leicht unsere Schreibweise und führen die Position in Abhängigkeit der Basis ein. Die Indizes der Seite, die Block A oder Block B hinzugefügt werden, sollen nun $l+1$ und $l+2$ sein. Dann ändern wir nun unsere Basisnotation zu $|a_l\rangle, |\sigma_{l+1}\rangle$ (anstatt $|\alpha\rangle$), $|\sigma_{l+2}\rangle$ (anstatt $|\beta\rangle$), und $|b_{l+3}\rangle$. Wenn wir nun den Zustand $|\psi\rangle$ mit unseren Koeffizienten berechnen

$$\psi_{a_l \sigma_{l+1} \sigma_{l+2} b_{l+3}} = \langle a_l \sigma_{l+1} \sigma_{l+2} b_{l+3} | \psi \rangle \quad (2.37)$$

können wir diese Koeffizienten nutzen um eine gute Näherung für den Zustand des nächsten Schrittes zu erhalten. Im nächsten Schritt bekommen die Koeffizienten

die Form $\langle a_{l+1}\sigma_{l+2}\sigma_{l+3}b_{l+4}|\psi\rangle$. Da die Basen $\{|a_l\rangle\}$ und $\{|b_{l+3}\rangle\}$ unvollständig sind, können wir nur eine ungefähre Transformation finden:

$$\langle a_{l+1}\sigma_{l+2}\sigma_{l+3}b_{l+4}|\psi\rangle \approx \sum_{a_l, \sigma_{l+1}, b_{l+3}} \langle a_{l+1}|a_l\sigma_{l+1}\rangle \langle \sigma_{l+3}b_{l+4}|b_{l+3}\rangle \langle a_l\sigma_{l+1}\sigma_{l+2}b_{l+3}|\psi\rangle. \quad (2.38)$$

Die Koeffizienten $\langle a_{l+1}|a_l\sigma_{l+1}\rangle$ sind die Matrixelemente des Transformationsoperators $T^{A_{l+1}}$ an dem Punkt, an dem die Basis von $\{|a_l\rangle|\sigma_{l+1}\rangle\}$ nach $\{|a_{l+1}\rangle\}$ trunkiert wird, d.h. aus dem vorhergehenden Schritt. Die Koeffizienten $\langle \sigma_{l+3}b_{l+4}|b_{l+3}\rangle$ sind die Elemente einer Transformationsmatrix, die in einem früheren Schritt verwendet wurden, um die Basis des Blocks B zu trunkieren, nachdem dieser um eine Stelle erweitert wurde. Die Wellenfunktionstransformation kann wieder auf Matrix-Matrix-Produkte zurückgeführt werden. Zunächst berechnet man

$$\psi_{a_{l+1}j_{l+2}}^{\text{tmp}} \equiv \sum_{i_{l+1}} T_{i_{l+1}a_{l+1}}^{A_{l+1}} \psi_{i_{l+1}j_{l+2}}, \quad (2.39)$$

wobei $i_{l+1} = i_{l+1}(a_l, \sigma_{l+1})$ und $j_{l+2} = j_{l+2}(\sigma_{l+2}, b_{l+3})$. Anschließend wird

$$\psi_{i_{l+2}j_{l+2}}^{\text{approx}} \equiv \sum_{b_{l+3}} \psi_{i_{l+2}b_{l+3}}^{\text{tmp}} T_{j_{l+2}b_{l+3}}^{B_{l+3}}, \quad (2.40)$$

berechnet, mit $i_{l+2} = i_{l+2}(a_{l+1}, \sigma_{l+2})$ und $j_{l+2} = j_{l+2}(\sigma_{l+2}, b_{l+3})$.

Wenn die Durchlaufrichtung rechts nach links beträgt, d.h. Block B wächst auf Kosten von Block A , ist die Transformation gegeben durch

$$\langle a_{l-4}\sigma_{l-3}\sigma_{l-2}b_{l-1}|\psi\rangle \approx \sum_{a_{l-3}, \sigma_{l-1}, b_l} \langle a_{l-4}\sigma_{l-3}|a_{l-3}\rangle \langle b_{l-1}|\sigma_{l-1}b_l\rangle \langle a_{l-3}\sigma_{l-2}\sigma_{l-1}b_l|\psi\rangle, \quad (2.41)$$

die leicht unter Verwendung von zwei aufeinanderfolgenden Produkten von Matrizen formuliert werden kann.

2.5 Beziehung zu Matrixproduktzuständen

Für ein Spin- s System mit L Spins, kann ein allgemeiner Zustand $|\psi\rangle$ geschrieben werden als

$$|\psi\rangle = \sum_{\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_L} \psi_{\sigma_1 \sigma_2 \dots \sigma_L} |\sigma_1 \sigma_2 \dots \sigma_L\rangle, \quad (2.42)$$

wobei $|\sigma_l\rangle$ die lokalen Basiszustände der Spins an der Position l bezeichnet. Für die Berechnung des Grundzustands muss man das Minimum von $\langle\psi|H|\psi\rangle / \langle\psi|\psi\rangle$ in einem $(2s+1)^L$ dimensionalen Parameterraum finden (oder die Eigenwertgleichung lösen). Die Idee der Matrix Produktzustände beinhaltet, die Koeffizienten $\psi_{\sigma_1 \sigma_2 \dots \sigma_L}$ des Zustandes $|\psi\rangle$ als ein Produkt von Matrizen zu umschreiben [Sch11]:

$$|\psi_{MP}\rangle = \sum_{\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_L} M^{\sigma_1} M^{\sigma_2} \dots M^{\sigma_L} |\sigma_1 \sigma_2 \dots \sigma_L\rangle, \quad (2.43)$$

wobei M^{σ_l} $m \times m$ Matrizen sind, mit Ausnahme von $l=1$ und $l=L$, wo wir $1 \times m$ und $m \times 1$ Matrizen haben, so dass das Produkt dieser Matrizen ein Skalar ergibt. Ein solcher Zustand wird Matrix Produktzustand (MPS) genannt. Nun haben wir $m^2 \cdot (2s+1) \cdot L$ freie Parameter. Jeder Zustand kann nun exakt in Matrix Produktform geschrieben werden, wenn wir m groß genug wählen. Ist dies nicht der Fall, kann ein solcher Matrix Produktzustand als Variationsansatz verwendet werden und die berechneten Energien werden immer über der wahren Grundzustandsenergie liegen. Für einige Hamiltonians ist es auch möglich die genaue Grundzustandsenergie mit $m=2$ zu konstruieren [Sch11]. Die DMRG besteht aus der Erweiterung der Blöcke und einer anschließenden Basis Trunkierung: Wir haben einen Block mit m Basiszuständen $|a_l\rangle$, der um eine Stelle erweitert wird, so dass der erweiterte Block m_{d_s} Basiszustände $|i_l\rangle \equiv |a_l\rangle |\sigma_{l+1}\rangle$ hat, und nach der Berechnung des Grundzustandes und der reduzierten Dichtematrix wird die Basis wieder zu m Zuständen trunkiert nach

$$|a_{l+1}\rangle = \sum_{a_l, \sigma_{l+1}} T_{a_{l+1} a_l \sigma_{l+1}}^{A_{l+1}} |a_l\rangle |\sigma_{l+1}\rangle. \quad (2.44)$$

Die nächste DMRG Iteration führt zu

$$|a_{l+2}\rangle = \sum_{a_{l+1}, \sigma_{l+2}} T_{a_{l+2} a_{l+1} \sigma_{l+2}}^{A_{l+2}} \sum_{a_l, \sigma_{l+1}} T_{a_{l+1} a_l \sigma_{l+1}}^{A_{l+1}} |a_l\rangle |\sigma_{l+1}\rangle |\sigma_{l+2}\rangle, \quad (2.45)$$

etc. Die Summierung über alle a_{l+1} entspricht einem Produkt von Matrizen, so dass das DMRG Verfahren zu Zuständen mit Koeffizienten führt, die als Produkte von Matrizen erhalten werden. Das hat zu DMRG Algorithmen geführt die explizit Matrix Produktzustände verwenden [Sch11]. Für die traditionelle “zwei-Plätze” DMRG, wie sie hier verwendet wird, kann gezeigt werden, dass die Annäherung der Grundzustandsenergie nicht garantiert von Iteration zu Iteration verringert wird [Sch05, CHG02, MWH⁺10]. Dies kann in Berechnungen gesehen werden, wenn man die Energie in einem bestimmten Durchlauf (Sweep) vergleicht und inhomogene Systeme untersucht. Zumindest die Konvergenz erweist sich von Sweep zu Sweep als ziemlich glatt.

Die MPS-Formulierung der DMRG hat klare Vorteile für die Berechnung von spektralen Funktionen, wie in [FKMS07] hingewiesen. Man braucht nur zeitgleich den realen und den imaginären Teil des Korrekturvektors und nicht zusätzlich die Zustände $|0\rangle$ und $|B\rangle$ wie im Standard DMRG Ansatz. Außerdem erlaubt die MPS-Formulierung beispielsweise die Überlappung zwischen Wellenfunktionen in verschiedenen Berechnungen zu bestimmen [McC07].

2.6 Allgemeine Spingitter

Bisher haben wir die DMRG Schritte für eine einfache Spinkette mit offenen Randbedingungen und Nächster-Nachbar-Wechselwirkung beschrieben. In diesem Abschnitt beschreiben wir kurz, wie der DMRG Algorithmus für allgemeine Heisenberg-Systeme mit Hamiltonians der Form

$$H = \sum_{i < j} J_{ij} \vec{s}_i \cdot \vec{s}_j \quad (2.46)$$

funktioniert. Wir können diese Gleichung wie folgt umschreiben:

$$H = \sum_i \vec{s}_i \cdot \sum_{k > 0} J_{i,i+k} \vec{s}_{i+k} \quad (2.47)$$

Wie wir erkennen, kann so jedes Heisenberg-System als eine eindimensionale Kette mit langreichweitiger Wechselwirkung behandelt werden. Der DMRG Algorithmus kann dann auf solch eine Kette angewendet werden. Dies ist der übliche Weg DMRG auf Systeme anzuwenden die ursprünglich nicht eindimensional sind [ES03]. Diese Methode wurde in dieser Arbeit auch angewendet. Die DMRG hat grundsätzliche Schwierigkeiten wenn sie auf Systeme angewandt wird, die nicht eindimensional oder quasi-eindimensional sind [Sch05]. Darüber hinaus ist die DMRG am genauesten wenn sie auf Systeme mit offenen Randbedingungen angewandt wird. Für eindimensionale Spinketten fand White heraus, dass wenn m Dichtematrix Zustände für ein System mit offenen Randbedingungen behalten werden, m^2 Zustände benötigt werden, um die gleiche Genauigkeit für ein System mit periodischen Randbedingungen zu erzielen [Whi93]. Für Systeme mit periodischen Randbedingungen ist das trunkierte Gewicht in der Regel viel Größer als für ein System mit offenen Randbedingungen. Bei zweidimensionalen Systemen mit einer Dimension von $L \times L$, fanden Liang und Pang heraus, dass die Zahl der behaltenen Dichtematrix-Eigenzustände exponentiell mit L wächst, um die Genauigkeit konstant zu halten [LP94]. Für zweidimensionale Systeme mit periodischen Randbedingungen in beiden Richtungen, ist die DMRG deutlich an oder jenseits ihrer Grenzen [HWJF05]. Doch oft ist eine Anwendung der DMRG auf kompliziertere Systeme dennoch sinnvoll, da es möglich ist,

Schätzungen über Fehler basierend auf dem trunkierten Gewicht zu machen. Ebenso können Berechnungen zu verschiedenen m Werten gemacht werden.

Es gibt jedoch Erweiterungen der DMRG basierend auf Variationsformulierungen mit Matrixproduktzuständen für zweidimensionale Systeme [VC04] und für eindimensionale Systeme mit periodischen Randbedingungen [VPC04], die einige dieser grundlegenden Schwierigkeiten beheben. Jedoch ist im Vergleich zur Standard DMRG die numerische Komplexität dieser Techniken um einiges höher. Vor kurzem wurden Techniken wie Korrelator Produktzustände (CPS) in Kombination mit Variations Monte-Carlo entwickelt, die eine vielversprechende Alternative zu sein scheinen [CKUC09, MSBC09]. Es bleibt die Frage, wie man eine eindimensionale Kette auf ein System abbilden kann (d.h. wie die Spins zu nummerieren sind) um die besten Ergebnisse mit der DMRG Methode zu erhalten. Diese Frage werden wir im nächsten Kapitel wieder aufgreifen. Außerdem ist es nicht klar, wie das System während der Aufwärmphase wächst. In unserer Implementierung lassen wir das System von beiden Enden wachsen und behandeln die Spin-Wechselwirkung mit der Kopplungsmatrix J_{ij} mit der Ausnahme, dass wir immer explizit beide Blöcke mit einer antiferromagnetischen Wechselwirkung verbinden. Andernfalls hätten wir beispielsweise für ein eindimensionales System mit nächster Nachbar Wechselwirkung zwei isolierte Blöcke in der Aufwärmphase und der Superblock würde nicht dem endgültigen System ähneln.

3 $S = \frac{1}{2}$ Spinröhre

Seit vielen Jahren ziehen Spinleitersysteme eine große Aufmerksamkeit nicht nur aufgrund der Existenz einer Vielzahl von an verwandten Materialien, wie z.B.

$\text{Sr}_{n-1}\text{Cu}_{n+1}\text{O}_{2n}$ [NA08,AHT⁺94], $\text{La}_{4+4n}\text{Cu}_{8+2n}\text{O}_{14+8n}$ [HT95] CaV_2O_5 [IIUY96], auf sich, sondern auch als Zwischenprodukte zwischen eindimensionaler und zweidimensionaler Quantenspinphysik.

Quanten-Spin-Modelle in einer Dimension ziehen traditionell eine große Aufmerksamkeit auf sich, weil sie oftmals einzigartige magnetische Eigenschaften aufweisen, die eng mit exotischen Quanten-Grundzuständen verbunden sind [SALR16]. Obwohl alle realen magnetischen Materialien im wesentlichen dreidimensional sind, können viele von ihnen durch den Begriff der eindimensionalen (1D) Quanten-Heisenberg-Spinmodelle aufgrund vernachlässigbarer Wechselwirkungen in anderen zwei räumlichen Dimensionen effektiv beschrieben werden [LMM11,dJM74]. Es sollte betont werden, dass 1D Heisenberg-Spinmodelle aufgrund der verstärkten Quanten-Spin-Fluktuationen stärkere Quantenmerkmale aufweisen als ihre höherdimensionalen Pendants. Wenn die geometrische Spin-Frustration fehlt, hängen die fundamentalen Eigenschaften der Quanten-Heisenberg-Ketten grundsätzlich von der Parität des Spins ab. Die Heisenbergketten mit halbzahligen Spins haben ein lückenloses Anregungsspektrum und einen algebraischen Zerfall von Korrelationen, während die Heisenbergketten mit ganzzahligen Spins eine Energielücke und einen exponentiellen Zerfall von Korrelationen aufweisen [Mat93, Hal88]. Wenn jedoch die geometrische Spinfrustration ins Spiel kommt, werden die wesentlichen Merkmale von Quanten-Heisenberg-Ketten komplexer und die Möglichkeiten für ein niederenergetisches Spektrum werden ebenfalls erweitert [LMM11, PF10]. Aus einem riesigen Reservoir von 1D-Quantenspinsystemen haben die Spin-1/2-Heisenberg-Röhren in letzter Zeit viel Aufsehen erregt. Der Begriff Spinröhre bezieht sich im allgemeinen auf eine n -Bein ($n \geq 3$) Spinleiter mit periodischen Randbedingungen entlang einer Sprossenrichtung. Die antiferromagnetische Kopplung entlang der Sprossenrichtung verursacht offensichtlich eine geometrische Spinfrustration, wenn die ungeradzahlige

Röhre betrachtet wird. Dadurch hat die antiferromagnetische Spin-1/2-Heisenberg-Drei-Bein-Röhre gegenüber der Spin-1/2-Heisenberg-Drei-Bein-Leiter eine Spinlücke mit offenen Randbedingung entlang der Sprossenrichtung [FLP⁺06]. Wir behandeln in diesem Kapitel eine Spin-1/2-Heisenberg-Hexagonal-Röhre und untersuchen ihre verschiedenen magnetischen Eigenschaften.

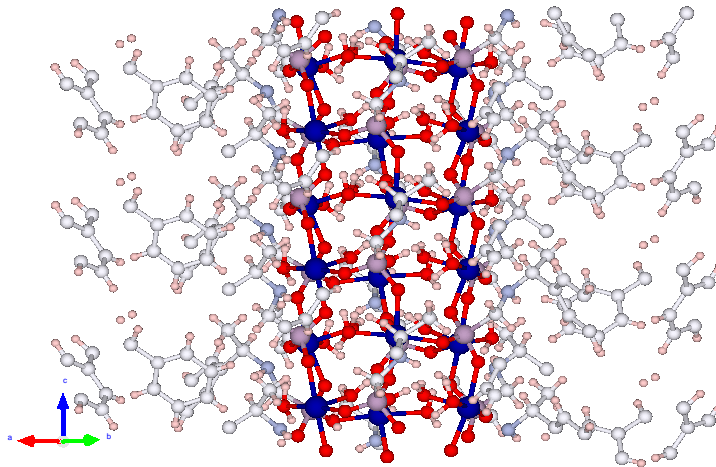


Abbildung 7: Darstellung einer $C_9H_{16}CoNO_5P$ Hexagonal Spinröhre [LBH⁺].

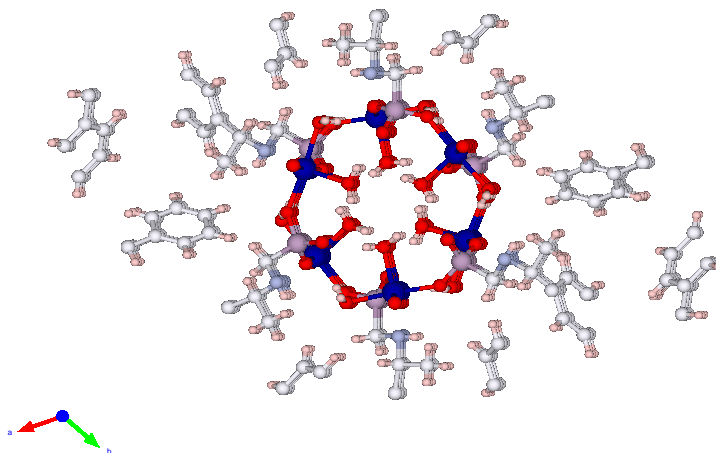


Abbildung 8: Draufsicht auf eine $C_9H_{16}CoNO_5P$ Hexagonal Spinröhre [LBH⁺].

3.1 Modell und Methode

Betrachten wir die hexagonale Spinröhre mit einem gleichseitigen Dreiecksquerschnitt, während die zu derselben Dreieckseinheit gehörenden Spins miteinander gekoppelt sind s. Abb. 10. Der Heisenbergoperator für solch ein System ist dann gegeben durch:

$$\tilde{H} = J_1 \sum_{\alpha} \sum_i \vec{S}_{\alpha,i} \cdot \vec{S}_{\alpha,i+1} + J_2 \sum_i \sum_{\alpha} \vec{S}_{\alpha,i} \cdot \vec{S}_{\alpha+1,i} + J_2 \sum_i \sum_{\alpha} \vec{S}_{\alpha,i} \cdot \vec{S}_{\alpha+1,i-(-1)^{\alpha}} \quad (3.1)$$

Zur besseren Veranschaulichung ist in Abb. 9 die von uns betrachtete Röhre noch einmal aufgerollt dargestellt. Man erkennt den typischen Dreiecksquerschnitt.

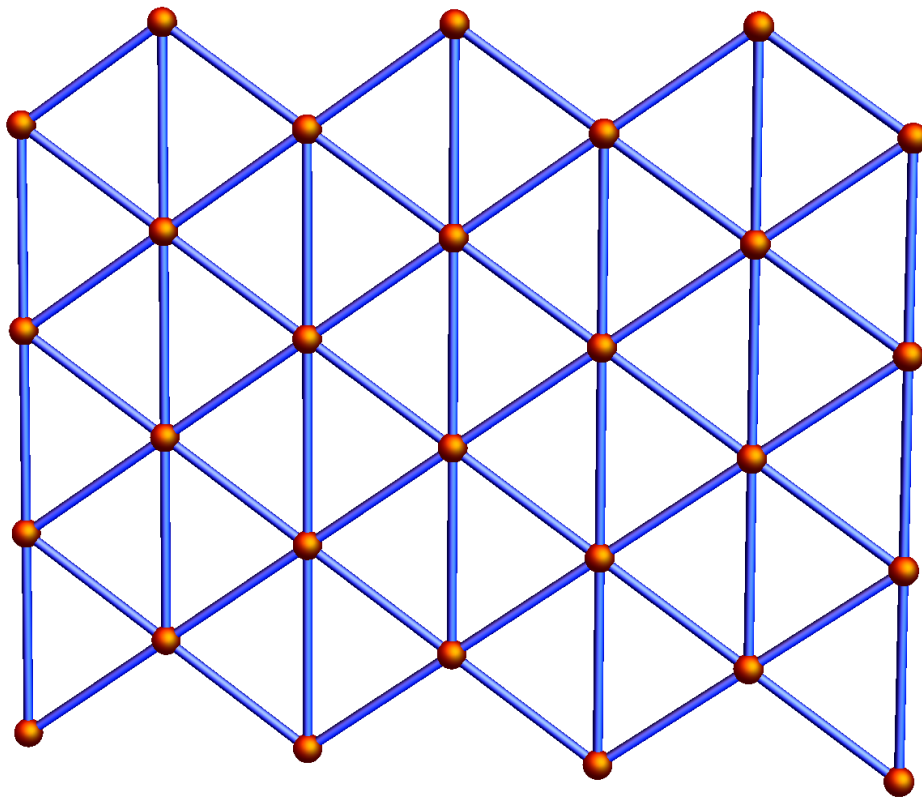


Abbildung 9: Abgerollte Hexagonalröhre. Der Dreiecksquerschnitt der Spinröhre wird sehr gut sichtbar.

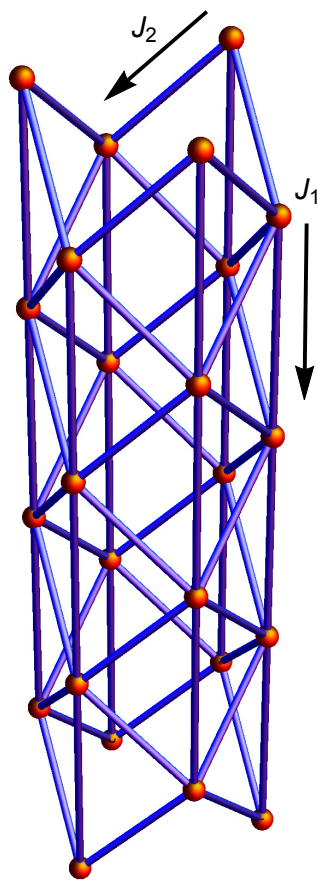


Abbildung 10: Hexagonalröhre für ein Spin $s = \frac{1}{2}$ System mit verschiedenen Kopplungsstärken J_1 und J_2 .

3.2 Ergebnisse

In den folgenden Abbildungen sind unsere Resultate zu sehen, die durch Verwendung der DMRG und exakten Diagonalisierung gewonnen wurden. In Abb. 11 ist die Magnetisierung der Spinröhre für unterschiedliche Anzahl der Spins N dargestellt. Die Ergebnisse wurden jeweils mit der DMRG- und der exakten Diagonalisierungsmethode verglichen und stimmen in beiden Fällen überein. Auffällig in dieser Grafik ist das Magnetisierungsplateau bei $N = 18$ was in etwa bei $M/M_{\max} \approx 0.33$ liegt. Variiert man nun die Kopplungsstärken J_1 und J_2 bei gleich bleibendem $N = 30$, so erkennt man eine Verschiebung des Plateaus. Wir erhalten ein ausgeprägtes Plateau für die Werte $J_1 = -1.0$ und $J_2 = -2.0$, welches bei einem Wert von etwa $M/M_{\max} \approx 0.2$ liegt (vgl. Abb. 12 und Abb. 13). Ansonsten liegen die Kurven der Magnetisierung dicht übereinander und weisen nur kleine Schwankungen auf. Dies könnte ein Anzeichen dafür sein, dass die Kopplungskonstanten J_1 und J_2 nur geringfügige Auswirkungen auf das System haben. Erhöht man die Anzahl der Spins N , bei gleich bleibender Kopplungsstärke $J_1 = -1.0$ und $J_2 = -2.0$ so erkennt man das gleiche Muster wie zuvor. Wir erhalten weiterhin ein ausgeprägtes Plateau bei einem Wert von $M/M_{\text{sat}} \approx 0.2$ (vgl. Abb. 12 und Abb. 13), ansonsten sind die Abweichungen nur geringfügig.

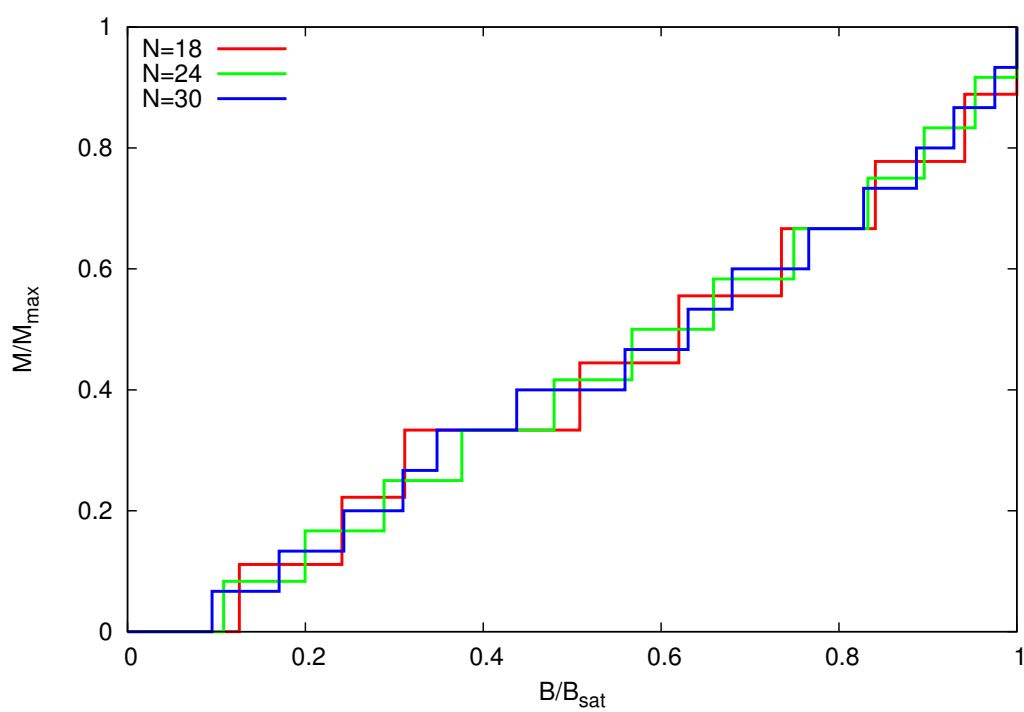


Abbildung 11: Magnetisierungskurve der $s = \frac{1}{2}$ Spinröhre für unterschiedliche Längen der Spinröhre N .

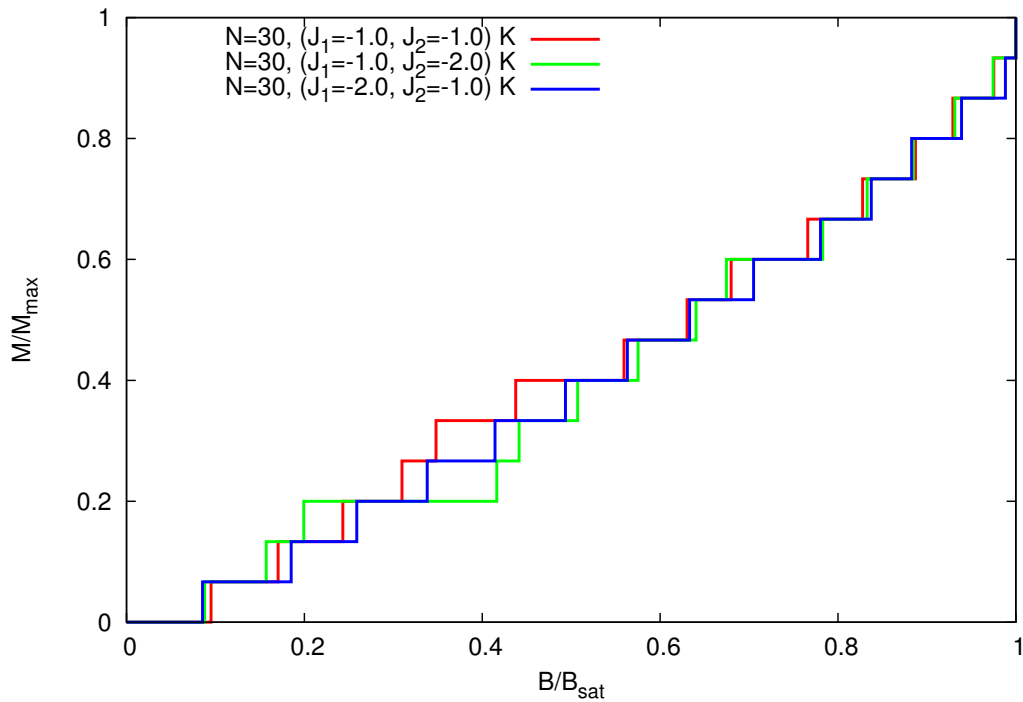


Abbildung 12: Magnetisierungskurve einer $N = 30$, $s = \frac{1}{2}$ Spinröhre für unterschiedliche Kopplungsstärken J .

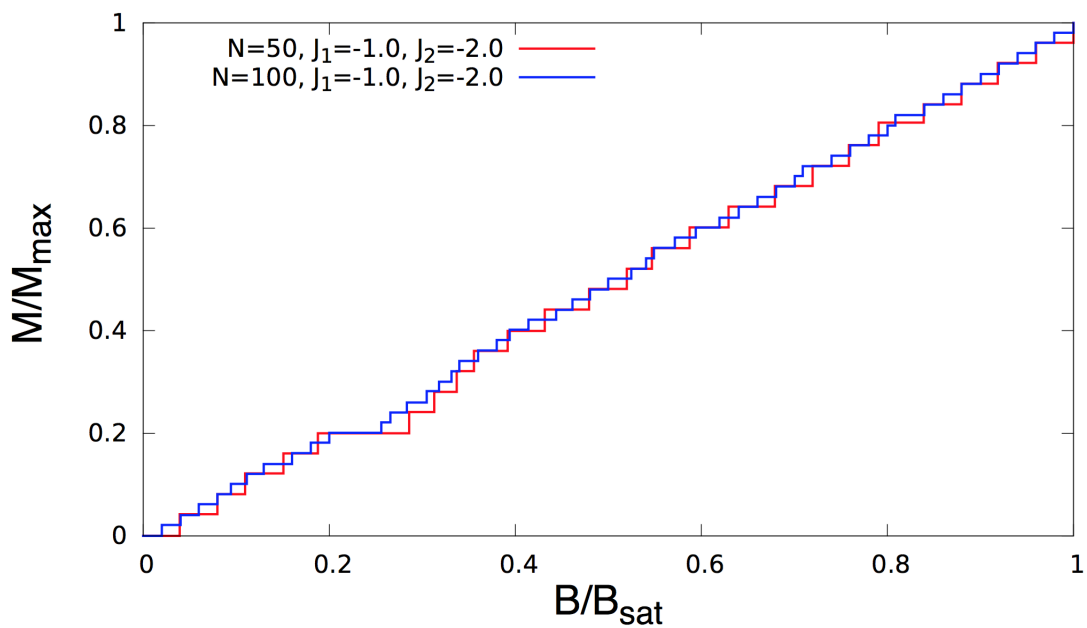


Abbildung 13: Magnetisierungskurve einer $N = 50$ und $N = 100$, $s = \frac{1}{2}$ Spinröhre mit gleich bleibenden Kopplungsstärken J_1 und J_2 .

3.3 Vergleiche mit dem Dreiecksgitter

Das Dreiecksgitter gehört zu einem der ersten Modelle, dessen magnetische Eigenschaften untersucht wurden. Diese frühen Studien fanden bereits ein Plateau bei $M/M_{\max} = 1/3$. Wegen der Beschränkung auf damals höchstens 21 Spins war es zunächst nicht ganz klar, ob das Plateau auch bei höheren Anzahlen von Spins besteht. Der Magnetisierungsprozess des isotropen Modells wurde mit Hilfe der Spinwellentheorie weiter analysiert [CG91]. Diese Studie lieferte den Beweis, dass das $M/M_{\max} = 1/3$ -Plateau existiert.

Abb. 14 zeigt die durch DMRG erhaltenen Magnetisierungskurven für ein Gitter mit $N = 27$ und $N = 36$ Spins. Beide Kurven zeigen ein klares Plateau bei $M/M_{\max} = 1/3$ in einer ansonsten glatten Magnetisierungskurve. Das Plateau kann man sich wie folgt erklären. Der $M/M_{\max} = 1/3$ -Zustand ist ein klassischer Zustand, in dem alle Spins auf zwei der drei Untergitter des dreieckigen Gitters nach oben zeigen und alle Spins auf dem dritten Untergitter nach unten. Dieser Zustand entspricht einer geordneten kollinearen Spinkonfiguration. Er bricht die translationale Symmetrie um eine Periode drei und ist dementsprechend dreifach entartet.

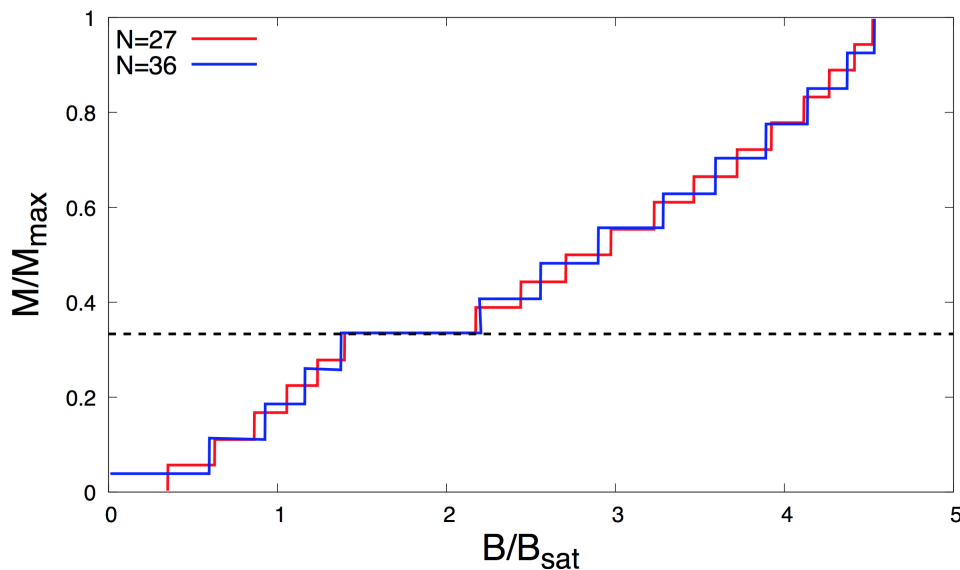


Abbildung 14: Magnetisierungskurve eines Dreiecksgitters mit $N = 27$ und $N = 36$ Spins.

Vergleicht man dieses Ergebnis nun mit der zuvor betrachteten Hexagonalröhre, so erkennt man eine Abweichung im Plateau. Während sich das Plateau eines Dreiecksgitters bei $M/M_{\max} = 1/3$ befindet, erhalten wir bei der von uns betrachteten Hexagonalröhre ein Plateau bei $M/M_{\max} = 1/5$ (vgl. Abb. 12 und Abb. 13).

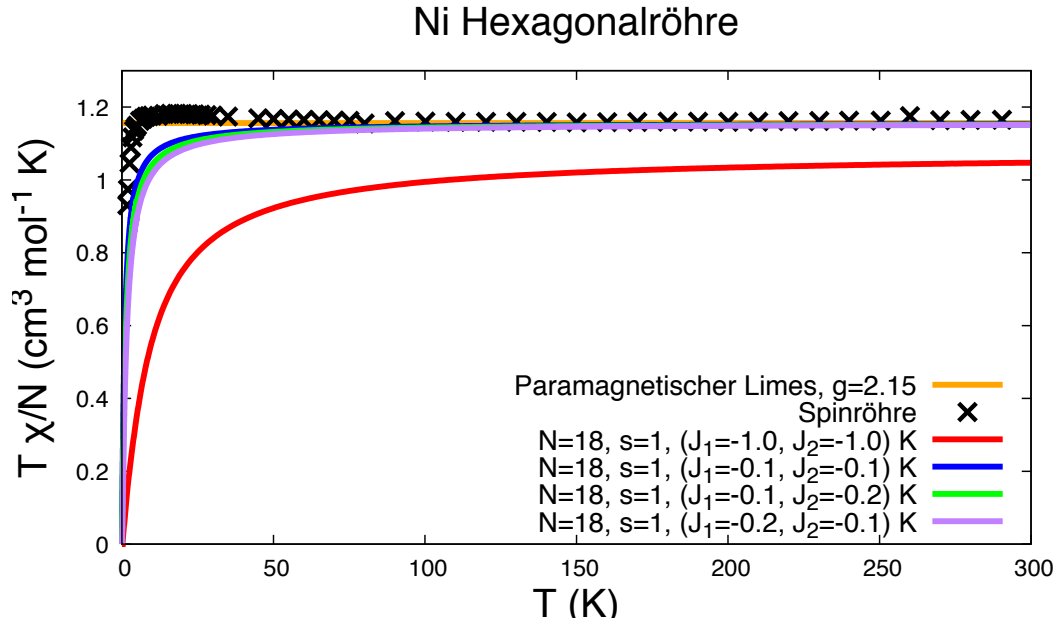


Abbildung 15: Suszeptibilitätskurve der Ni-Spinröhre mit $s = 1$ [LBH⁺].

Betrachten wir die Suszeptibilitätskurve aus Abb. 15 der Ni-Spinröhre für verschiedene Kopplungsstärken J , so wird deutlich, dass kleine Änderungen in den Kopplungsstärken sich kaum auf das System auswirken. Der Paramagnetische Limes wird schon nach kurzer Zeit erreicht. Erst eine starke Änderung der Kopplungsstärke bewirkt eine signifikante Auswirkung auf das System.

4 Alternierende Heisenbergkette mit zusätzlicher isotroper Dreiteilchen-Wechselwirkung

In den letzten zwei Jahrzehnten hat sich gezeigt, dass frustrierte magnetische Systeme eine Vielfalt an neuen makroskopischen Zuständen aufweisen. Zusätzlich zu den verschiedenen geometrischen frustrierten Gittern (z.B. Dreiecksgitter), wurden Heisenberg-Spin-Modelle, bilineare reichweitige Wechselwirkungen, Dzyaloshinskii-Moria-Wechselwirkungen, sowie verschiedene Ringe und biquadratische Austauschwechselwirkungen bereits untersucht als Quelle von exotischen nichtmagnetischen Quantenzuständen, einschließlich verschiedener Spin-Flüssigkeits-, nematischer und topologischer Phasen [LMM11]. Heisenberg Spin-Modelle mit biquadratischen Termen $(S_i \cdot S_j)^2$ gehören zu den am häufigsten studierten Spinsystemen mit höherer Ordnung an Austauschwechselwirkungen. Typische Beispiele an reichhaltigen Phasendiagrammen sind die bilinear-biquadratische Spin-1-Kette (BBQ) [LST06] und ihre höherdimensionalen Pendants auf quadratischen [HK02, TLMP12], dreieckigen [MSS06, SS13] und kubischen [HK02] Gittern. Das Phasendiagramm der BBQ-Kette enthält zwei lückenbehaftete Zustände und eine exotische kritische Phase gekennzeichnet durch nematische Spin-Spin-Korrelationen mit dem dominanten Impuls $k = \pm \frac{3\pi}{4}$, während die 2D-Quadratgitter-Analoga eine Reihe von exotischen nematischen Phasen aufweisen. Im Gegensatz zum ausgeprägten Interesse an biquadratischen Kopplungen, ist die Rolle der 3-Teilchen-Wechselwirkungen $(S_i \cdot S_j)(S_i \cdot S_k) + h.c.$ ($|S_i| > \frac{1}{2}, i \neq j, k, j \neq k$) kaum erforscht. Im Prinzip ist es schwierig, reale Systeme zu finden mit Bezug auf solche Modelle. Nach unseren Erkenntnissen, kommen die besten experimentellen Beweise für solche Modelle aus inelastischer Neutronenstreuung für tiefliegende Anregungen im magnetischen Material $\text{CsMn}_x\text{Mg}_{1-x}\text{Br}_3$ ($x = 0.28$), CsMnBr_3 [FFGK86], welches bekannt ist, nahezu ideal isotrop mit $S = \frac{5}{2}$ zu sein. Im Rahmen von Spinsystemen auf herkömmlichen Gittern, scheinen einige Systeme, die durch alternierende Heisenberg Spinmodelle beschrieben werden, ein guter Ansatz für die Beobachtung von Effekten höherer

Ordnungen bei Austauschwechselwirkungen zu sein. Die Heisenberkette mit alternierenden S und $\sigma = \frac{1}{2}$ Spins ($S > \frac{1}{2}$) bietet ein einfaches Beispiel dieser Art. Tatsächlich werden gemäß der Operator-Identität

$$(S_i \cdot \sigma_j)^2 \equiv -S_i \cdot \frac{\sigma_j}{2} + \frac{S(S+1)}{4} \quad (4.1)$$

die biquadratischen Terme auf bilineare Formen reduziert. In dieser Arbeit konzentrieren wir uns auf ein alternierendes 1D System, dass durch den folgenden Hamiltonian beschrieben wird:

$$\tilde{H} = \sum_{n=1}^L J_1 \underline{S}_{2n} \cdot (\underline{\sigma}_{2n-1} + \underline{\sigma}_{2n+1}) + J_2 \left[(\underline{S}_{2n} \cdot \underline{\sigma}_{2n-1}) (\underline{S}_{2n} \cdot \underline{\sigma}_{2n+1}) + h.c. \right]. \quad (4.2)$$

Hier steht L für die Anzahl von Elementarzellen, die jeweils zwei unterschiedliche Spins ($S > \sigma$) enthalten. Wir nutzen die Standard-Parametrisierung der Kopplungskonstanten $J_1 = \cos(t)$ und $J_2 = \sin(t)$ mit ($0 \leq t < 2\pi$). Da die effektive Stärke des Zusatzterms durch den Parameter $S\sigma J_2$ gesteuert wird, ist es sinnvoll anzunehmen, dass diese Interaktion eine wichtige Rolle, besonders für große S ($S \gg \frac{1}{2}$), spielt.

4.1 Klassische Betrachtung

Für eine klassische Betrachtung, bezogen auf (4.2), ist es von Vorteil mit einer Analyse der klassischen Zustände des lokalen Hamiltonian Abb. 16 zu beginnen. Behält man die Richtung von S_2 ergeben sich 4 verschiedene Konfigurationsmöglichkeiten der Spinkette (**FA**, **AF**, **AA**, **FF**). **F** bedeutet hierbei Ferromagnetische- und **A** Antiferromagnetische Ausrichtung. Diese Basismodule können nun als Grundbausteine für unsere Kette verwendet werden, indem man die einzelnen σ aneinander koppelt.

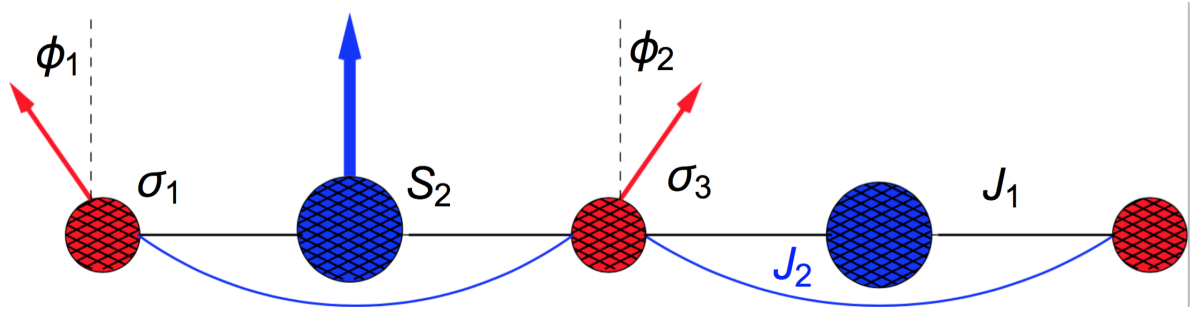


Abbildung 16: Skizze der alternierenden Spinkette aus Gl.(4.2) . ϕ_1 und ϕ_2 sind Variationsparameter und beschreiben die Richtung der σ Spins. J_1 und J_2 sind Kopplungskonstanten.

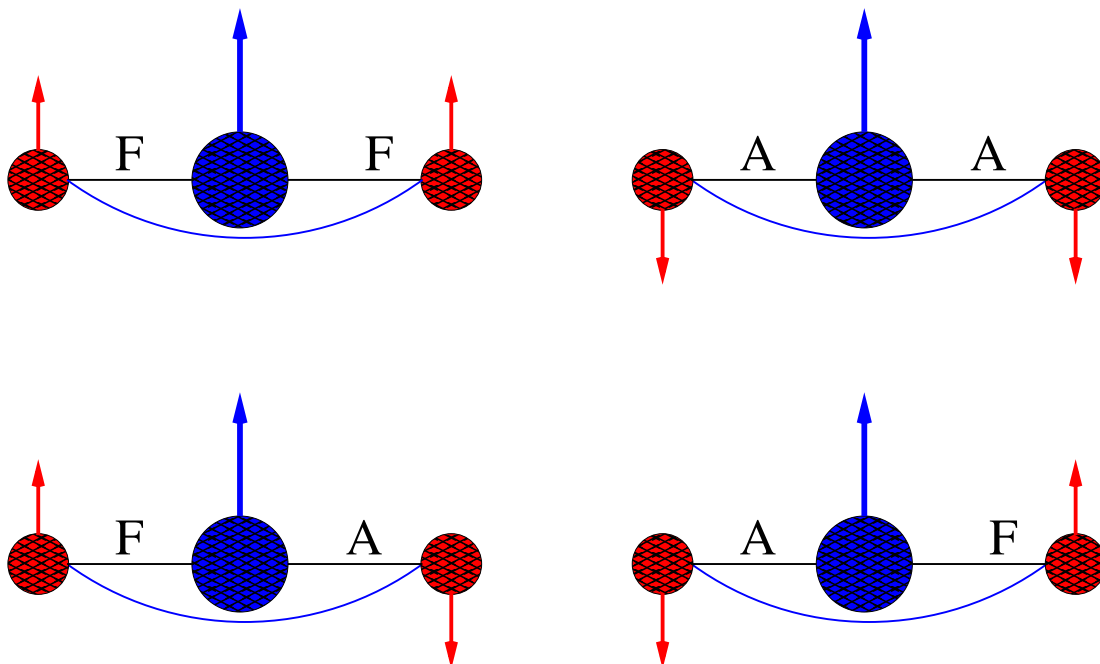


Abbildung 17: Unterschiedliche Grundzustandskonfigurationen der alternierenden Spinkette. F bzw. A beschreiben **F**erromagnetische oder **A**ntiferromagnetische Konfigurationen [IUS14].

4.2 Quantenphasendiagramm

Die Ergebnisse in diesem Kapitel wurden unter Zuhilfenahme der DMRG erzeugt und beziehen sich ausschließlich auf die Eigenschaften des Quantenphasendiagramms, welches in Abb. 18 zu sehen ist. Hierbei wurden die Berechnungen für eine alternierende Spinkette $(S, \sigma) = (1, \frac{1}{2})$ durchgeführt. Festgehalten wurde hierbei: 7 DMRG Sweeps mit 500 Zuständen im letzten Sweep. Betrachten wir nun genauer das Quantenphasendiagramm aus Abb. 18, erstmals veröffentlicht in [IUS14].

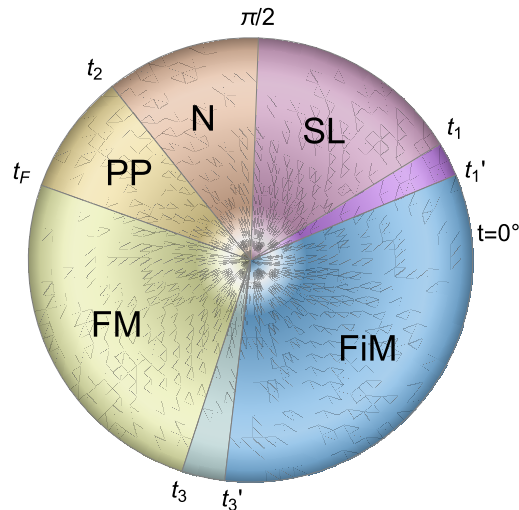


Abbildung 18: Quantenphasendiagramm der Alternierenden Spin $1, \frac{1}{2}$ Kette. **FM** und **FiM** beschreiben Ferromagnetische bzw, Ferrimagnetische Phasen. **SL**, **N** und **PP** stehen für die Spinflüssigkeits-, nematischen- und teilweise polarisierten Phasen. Die Bereiche $t_1' < t < t_1$ und $t_3 < t < t_3'$ sind besetzt mit teilweise polarisierten Phasen. $t_F = \pi - \arctan\left(\frac{2}{3}\right) \approx 146.31^\circ$ ist eine exakte Phasengrenze. Die anderen Grenzen liegen bei $t_1 \approx 30^\circ$, $t_1' \approx 25.03^\circ$, $t_2 \approx 120^\circ$, $t_3 \approx 253.08^\circ$ und $t_3' \approx 264.0^\circ$.

4.2.1 Spin Liquid Phase

In der Physik der kondensierten Materie ist die Quantenspinflüssigkeit ein Zustand, der in einem System von interagierenden Quantenspins erreicht werden kann. Der Zustand wird als “Flüssigkeit” bezeichnet, da er im Vergleich zu einem ferromagnetischen Spinzustand ein ungeordneter Zustand ist, verglichen mit Wasser, dass im Gegensatz zu Eis in einem eher ungeordneten Zustand ist. Im Gegensatz zu anderen ungeordneten Zuständen behält ein Quanten-Spin-Flüssigkeitszustand seine Störung jedoch auch bei sehr niedrigen Temperaturen. Dieser Quantenspin-Flüssigkeitszustand wurde im Jahr 1973 von Phil Anderson als Grundzustand für ein System von Spins auf einem Dreiecksgitter vorgeschlagen, das mit den nächsten Nachbarn über die antiferromagnetische Wechselwirkung wechselwirkt. Entdeckt wurde der Quanten-Spin-Flüssigkeitszustand dann 2003 in einem organischen Mott-Isolator mit Dreiecksgitter ($\kappa - (\text{BEDT-TTF})_2 \text{Cu}_2 \text{CN}_3$). Ein weiterer Quanten-Spin-Flüssigkeitszustand wurde 2006 in Herbertsmithit $\text{ZnCu}_3\text{OH}_6\text{Cl}_2$ entdeckt. Dieser kann eine $U(1)$ -Dirac-Spinflüssigkeit realisieren [RHLW07]. Lokalisierte Spins sind frustriert, wenn es Austauschwechselwirkungen gibt, die nicht alle gleichzeitig maximiert werden können, was zu einer großen Entartung des Grundzustands des Systems führen kann. Ein Dreieck von Ising Spins (Abb. 19), mit den einzig möglichen Orientierungen “up” und “down”, die antiferromagnetisch wechselwirken, ist eines der einfachsten Beispiele für Frustration.

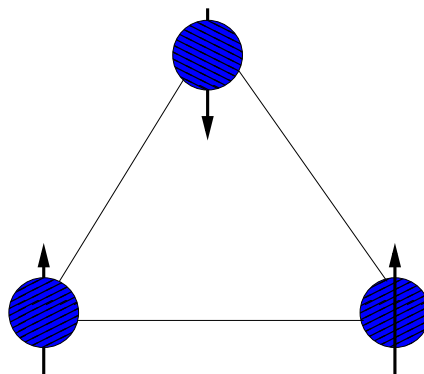


Abbildung 19: Frustrierte Spins auf dem Dreieck

Im Grundzustand können zwei der Spins antiparallel sein, jedoch der dritte kann es nicht. Dies führt zu einer Erhöhung der möglichen Orientierungen der Spins im Grundzustand (in diesem Beispiel sechs), wodurch Fluktuationen verstärkt werden und somit die magnetische Ordnung unterdrückt wird.

4.2.2 Spin Nematische Phase

Spin nematische Phasen sind charakterisiert durch das Fehlen eines lokalen magnetischen Moments. Solche Phasen wurden zuerst von Andreev und Grishchuk [AG84] eingeführt und später in mehreren magnetischen Molekülen entdeckt [Pap88, CCL90]. In jüngster Zeit haben spin nematische Phasen auch im Zusammenhang mit kalten Atomen Aufmerksamkeit erregt, wo ein Bose-Kondensat von ^{52}Cr -Atomen in einer magnetischen Falle realisiert wurde [GWH⁺05]. Die Mean-field Realisierung von spin nematischen Phasen in lochsymmetrischen fermionischen Modellen auf einem quadratischen Gitter ist ebenfalls eine Möglichkeit für nematische Phasen [NJK91]. Diese Phasen sind alle dadurch charakterisiert, dass sie sowohl die $SU(2)$ Spinsymmetrie als auch die Gittersymmetrie brechen, aber die Zeitumkehrsymmetrie bewahren. Solche Phasen können auch in einem erweiterten Hubbard-Modell auftreten [Sch89].

Andreev und Grishchuk bemerkten als erste, dass die Physik von Quadrupolen auch in $S = 1/2$ Systemen unter Berücksichtigung von Bindungsordnungsparametern relevant sein kann. Für den Quadrupoltensor kann das Produkt $S_1^a S_2^b$ aus Spinoperatoren genutzt werden. Dabei ist

$$S^a = -i \sum_{b,\gamma} \epsilon_{ab\gamma} |b\rangle \langle \gamma| \quad (4.3)$$

Die Zerlegung in irreduzible Tensoroperatoren geht davon aus, dass die Spur von $S_1^a S_2^b$ ein Skalar ist ($\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2$), der antisymmetrische Teil von $S_1^a S_2^b$ ist ein Vektor ($\vec{P}_{12} = \vec{S}_1 \times \vec{S}_2$) und der spurlose symmetrische Teil ist der Tensor

$$Q_{12}^{ab} = S_1^a S_2^b + S_1^b S_2^a - \frac{2}{3} (\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2) \delta_{ab} \quad (4.4)$$

Da sowohl P_{12} als auch Q_{12} bilinear in den Spinoperatoren sind, beschreiben sie eine Art Ordnung, bei der die Zeitumkehrsymmetrie nicht gebrochen wird. Wenn $\langle P \rangle$ einen endlichen Wert annimmt, so nennt man ihn p-nematisch und einen Zustand mit $\langle Q \rangle \neq 0$ n-nematisch. In der Zeit-Umkehr-invarianten Basis für $S = 1/2$ spins,

$$\begin{aligned}
 |s\rangle &= \sqrt{\frac{1}{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle), \\
 |x\rangle &= \frac{i}{\sqrt{2}}(|\uparrow\uparrow\rangle - |\downarrow\downarrow\rangle) \\
 |y\rangle &= \sqrt{\frac{1}{2}}(|\uparrow\uparrow\rangle + |\downarrow\downarrow\rangle), \\
 |z\rangle &= \frac{-i}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle),
 \end{aligned} \tag{4.5}$$

lauten die Zeitumkehr brechenden magnetischen Ordnungsparameter

$$S_1^a + S_2^a = -i \sum_{b,\gamma \in \{x,y,z\}} \epsilon_{ab\gamma} |b\rangle \langle \gamma| \quad \text{und} \quad S_1^a - S_2^a = i |a\rangle \langle s| - i |s\rangle \langle a|, \tag{4.6}$$

und die nichtmagnetischen Parameter sind

$$\begin{aligned}
 \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 &= \frac{1}{4} \sum_{a \in \{x,y,z\}} |a\rangle \langle a| - \frac{3}{4} |s\rangle \langle s|, \\
 Q_{12}^{ab} &= -\frac{1}{2} (|a\rangle \langle b| + |b\rangle \langle a|) + \frac{1}{3} \delta_{ab} |\gamma\rangle \langle \gamma|, \\
 P_{12}^a &= \frac{1}{2} (|a\rangle \langle s| + |s\rangle \langle a|).
 \end{aligned} \tag{4.7}$$

Eine Dimerwellenfunktion kann nun über $c|s\rangle + \sum_a d_a |a\rangle$ mit $a = x, y, z$ konstruiert werden. Ein Zustand mit reellem c und d_a bricht nicht die Zeitumkehrsymmetrie. $c = 1$ und $d = 0$ beschreiben eine Singlettbindung, während $c = 0$ und $|d| > 0$ n-nematisch ist. Sind c und d größer Null, so ist der Zustand p-nematisch und es gilt $\langle P_{12}^a \rangle = cd^a$ [LT06].

Für $S = 1$ ist der Ordnungsparameter eine Positionsvariable und kann durch die Konstruktion einer Ortswellenfunktion optimiert werden, einen Prozess, der die Verschränkung zwischen den Positionen vernachlässigt. Für $S = 1/2$ nematische Modelle ist diese Verschränkung ein wesentliches Merkmal.

Mit der Ausnahme von einigen trivialen Fällen, wie z.B. schwach gekoppelten Dimeren, ist es derzeit nicht bekannt, wie man eine Variationswellenfunktion konstruiert,

um eine Spin-1/2 nematische Phase zu beschreiben. Im Gegensatz dazu sind in den letzten Jahren auf der numerischen Seite bedeutende Fortschritte gemacht worden, die dazu führten, dass nun einige nichttriviale mikroskopische Modelle bekannt sind, die einen starken Beweis für die Existenz von spin-nematischen Phasen des Typs p und n zeigen.

In einer Untersuchung eines quadratischen Gittermodells mithilfe exakter Diagonalisierung wurde ein numerischer Nachweis für eine nematische Phase des Typs p gefunden, bei der neben der Heisenbergwechselwirkung eine vierseitige Ringwechselwirkung vorhanden ist [LDL⁺05]. Eine spin nematische Phase des Typs n wurde im frustrierten $J_1 - J_2$ Quadratgittermodell mit ferromagnetischen nächster Nachbar Wechselwirkungen J_1 und antiferromagnetischen übernächsten Nachbar Wechselwirkungen J_2 , sowie im Ringwechselwirkungsmodell gefunden [SMS06]. Das Erscheinungsbild dieser Phase in der Nähe eines ferromagnetischen Zustands wird derzeit am besten durch die Betrachtung der Bildung eines d-Wellen gebundenen Zustands von zwei umgedrehten Spins innerhalb des vollständig polarisierten Zustands verstanden. Die spin nematische Phase kann dann als feldinduzierte Bose-Einstein-Kondensation von gebundenen Zuständen beschrieben werden, in dem Sinne, dass sie eng mit dem gepaarten Zustand von hard core-Bosonen, die durch korrelierte hopping Prozesse stabilisiert sind, verwandt ist [BKM05, SDL06]. Diese beiden Zustände unterscheiden sich nur in der räumlichen Symmetrie der gebundenen Wellenfunktion. Ebenfalls anzumerken ist, dass die nematische Ordnung nicht nur ausschließlich für Quantenspins besteht, sondern auch für klassische Spins in Form von koplanaren oder kolinearen Spinzuständen ohne langreichweitige magnetische Ordnung auftritt [Zhi02, CZ04, SPM10].

Es ist zu erwähnen, dass $S = 1/2$ Spinsysteme auf dem Dreiecksgitter noch kompliziertere Formen der multipolbezogenen Ordnung aufweisen können. Neuere numerische Berechnungen, einschließlich Ringwechselwirkungsterme haben Hinweise auf eine oktopolare Ordnung in einem Magnetfeld gegeben [MSS06]. Das klassische Analogon dieser oktopolaren Ordnung wurde für das Kagomé-Gitter untersucht [Zhi08].

Eine neue Entwicklung in diesem Bereich betrifft das Phasendiagramm der frustrierten ferromagnetischen Heisenbergkette in einem Magnetfeld. Dieses Problem wurde in einer Reihe von neuen Untersuchungen behandelt, und es ist ein reiches Phasendiagramm mit mindestens drei verschiedenen 1D-Analoga von spin nematischen Phasen (Quadrupol, Octupolar, Hexadecupolar) entstanden. Da mittlerweile viele experimentelle Systeme vorhanden sind, die in vernünftiger Näherung durch eine solche frustrierte ferromagnetische Kette modelliert werden können (LiCuVO₄ [EMF⁺05]), könnten diese zu den besten Kandidatensystemen für die zielführende Beobachtung des feldinduzierten spin nematischen Verhalten in Experimenten werden.

4.3 Kurzreichweitige Wechselwirkungen

Um Aussagen über das Quantenphasendiagramm zu treffen, schauen wir uns zunächst einige Korrelatoren für die Kurzreichweitigen Wechselwirkungen an. Hierbei handelt es sich um Korrelatoren für die zuvor beschriebene alternierende Spinkette mit $S = 1$ und $\sigma = \frac{1}{2}$. Das hier betrachtete Modell kann wie folgt skizziert werden:

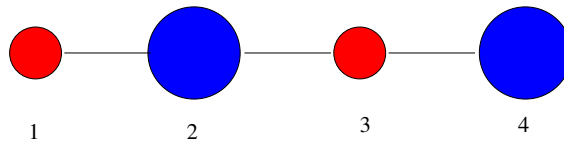


Abbildung 20: Skizze der Positionen der Spins in der alternierenden Spinkette

Wir möchten nun die allgemeine Struktur und einige Auffälligkeiten des Quantenphasendiagramms näher erläutern. Einige dieser Besonderheiten sind in Abb. 21 anhand der Kurzreichweitigen Wechselwirkungen gut erkennbar. Hierbei werden auf Grundlage von [IUS14] die Daten für die Kette reproduziert und näher erläutert.

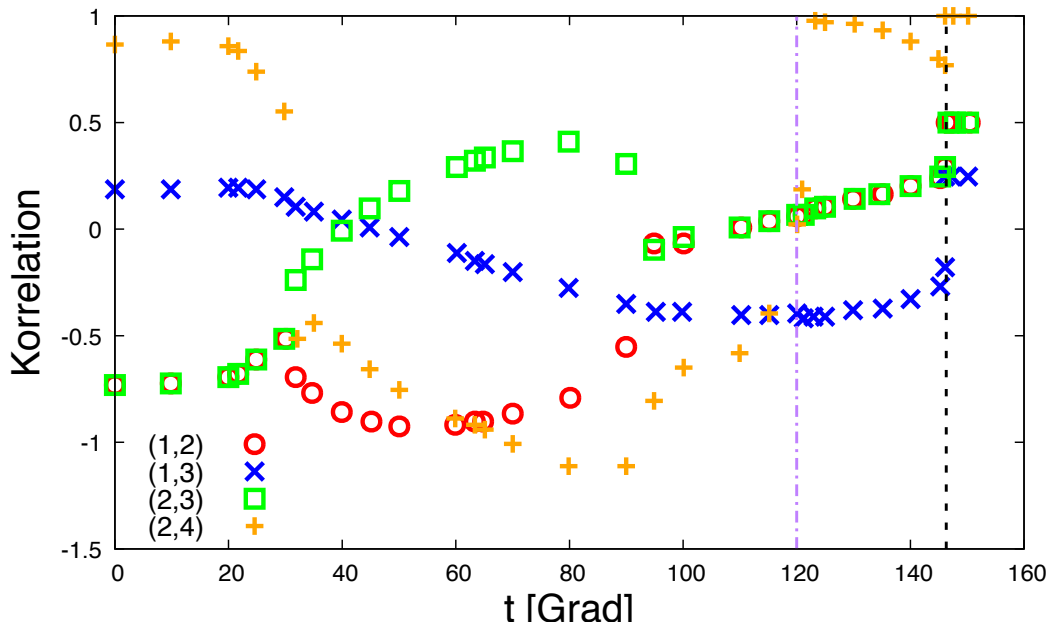


Abbildung 21: DMRG Ergebnisse der Korrelatoren für einige kurzreichweitige Wechselwirkungen $\langle \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \rangle$ als Funktion von t . Die Ergebnisse beziehen sich auf die zuvor beschriebene Kette. Die Zahlen in den Klammern beschreiben die Positionen der Spins in der Kette.

Wie wir bereits erwartet haben, erscheint das außergewöhnlichste Verhalten (durch abrupte Änderungen der Kurzreichweitigen Wechselwirkungen (KW) Korrelatoren) in dem Bereich zu liegen, der durch eine Vielzahl degenerierter klassischer Grundzustands-Konfigurationen gekennzeichnet ist. Die abrupten Änderungen der KW-Korrelatoren um die Punkte t_F (vgl. gestrichelte schwarze Linie aus Abb. 21) und t_2 (vgl. gestrichelte lila Linie aus Abb. 21) sind mit dem Auftreten von partiell polarisierten Zuständen verknüpft, die den Übergang vom Ferromagnetischen zu einem nichtmagnetischen Zustand darstellen. Die Zerstörung der beiden klassischen magnetischen Phasen (FM und FiM) geschieht in den Sektoren (t'_1, t_1) , (t_2, t_F) und (t_3, t'_3) wie in Abbildung Abb. 18 zu erkennen ist. Die Clusterwirkung der Dreikörperwechselwirkung ist charakteristisch für den nichtmagnetischen Spin Liquid Sektor in Abb. 18. In der periodischen Spinkette existieren zwei äquivalente Typen von dimerisierten Zuständen $|\Psi_1\rangle, |\Psi_2\rangle$, die mit beiden Clusterarten (je nachdem ob mit S oder mit σ angefangen wird) des Hamiltonians übereinstimmen. Der Clustering-Effekt ist besonders stark in der Mitte des Spin Liquid Bereichs ausgeprägt (in der Nähe von 63.43°), wo der Graph die Bildung eines reinen Spin 1/2 Zustandes aufweist (siehe Abb. 21, rote Kreise und grüne Boxen). Das Verhalten der kurzreichweitigen Korrelationen zeigt die Existenz einer nichtmagnetischen Phase im Bereich $\frac{\pi}{2} \simeq t \simeq \frac{2\pi}{3}$. Diese Phase bezeichnen wir als Nematische Phase (vgl. Abb. 18 N-Sektor). Das Bild der kurzreichweitigen Wechselwirkungen in diesem Bereich, erlaubt uns anzunehmen, dass die Eigenschaften des nichtmagnetischen Zustandes hauptsächlich durch das S Untersystem gesteuert wird. Der Korrelator $\langle S_{2n} \cdot S_{2n+2} \rangle$ weist eine starke Veränderung in der Nähe der zweiten Phasengrenze ($t = t_2$) auf. Währenddessen bleibt das Verhalten des Korrelators $\langle \sigma_{2n-1} \cdot \sigma_{2n+1} \rangle$ im gesamten N-Sektor, einschließlich dem Bereich um die beiden Phasengrenzen nahezu unverändert. Im gesamten N-Sektor bleiben die Werte dieses Korrelators relativ nah im Bereich -0.443, welcher charakteristisch für eine isotrope Spin 1/2-Kette ist. Eine weitere Besonderheit in dieser Region, ist die extrem schwache Korrelation zwischen den S und σ Spins vgl. Abb. 21. Weitere Erkenntnisse über den nichtmagnetischen Zustand kön-

nen über Ergebnisse durch exakte Diagonalisierung gewonnen werden. Hier kann das Anregungsspektrum dieses Systems bei $t = 110^\circ$ untersucht werden. Ein wesentliches Merkmal dieses Spektrums ist die Turmstruktur, welche als Hinweis für die nematische Ordnung angenommen wird. Ein weiterer Hinweis für die nematische Phase ist das finite-size-scaling der Quintett-Anregungslücke $\Delta(L) \propto 1/L$, das einen lückenlosen N-Zustand aufweist Abb. 22. Hier wurden auf Basis von [IUS14] die Untersuchungen fortgeführt. Neu hinzu kamen die die Punkte bis einschließlich $1/L \approx 0.02$, was eine deutliche Verbesserung des finite-size-scaling darstellt und somit unsere Aussagen deutlicher untermauert.

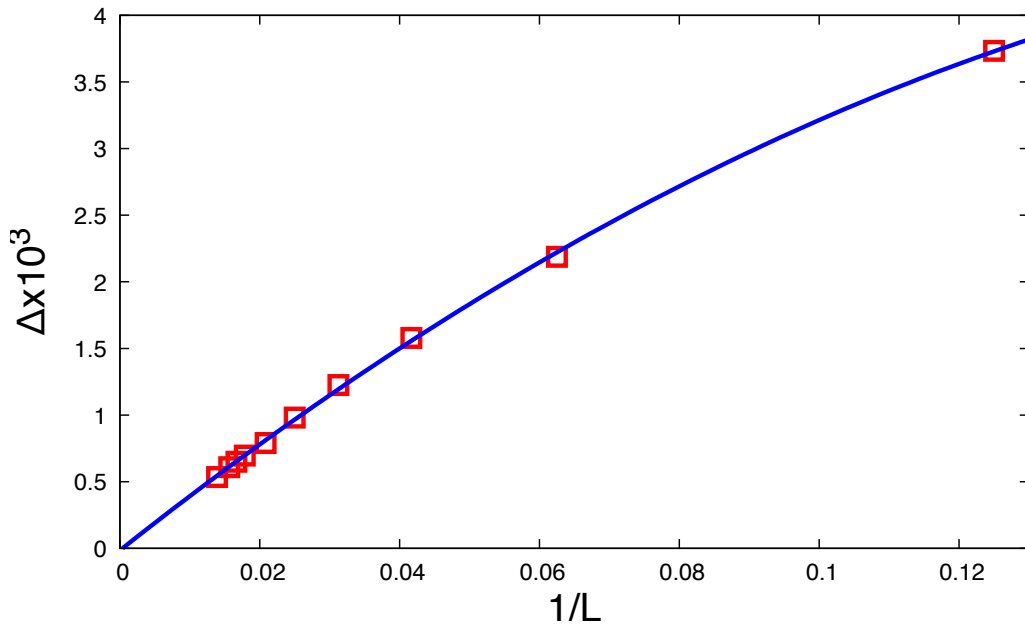


Abbildung 22: Finite-size scaling der untersten $S_t = 2$ Lücke. Die blaue Linie beschreibt den Fit an die DMRG Daten, mit dem Ansatz $L\Delta(L) = a_0 + a_1/L + a_2/L^2$.

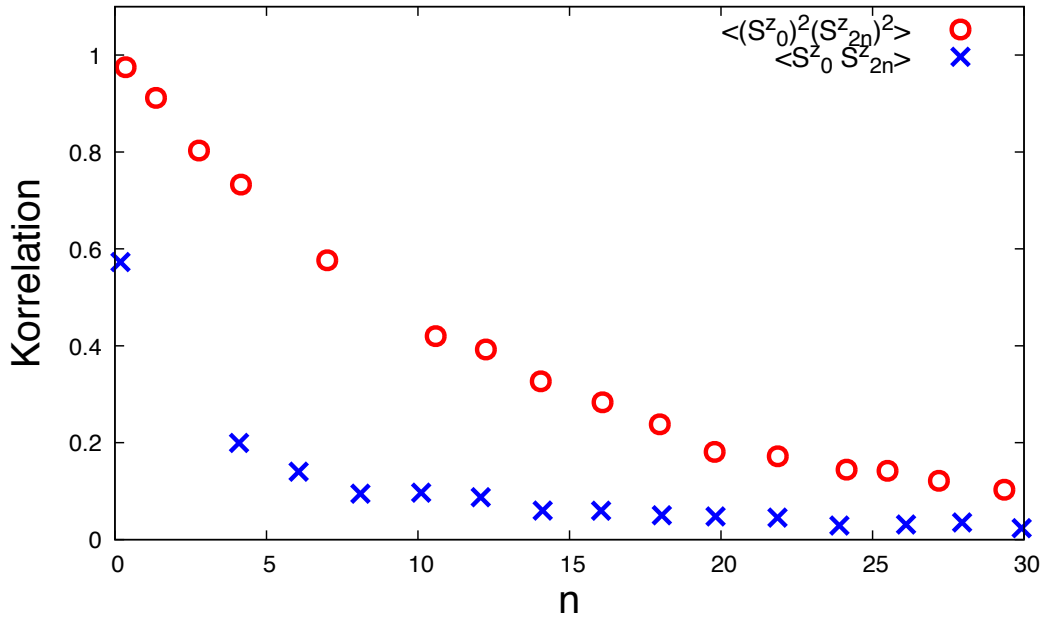


Abbildung 23: DMRG Ergebnisse der Korrelatoren bei $t = 110^\circ$ der zuvor beschriebenen Kette.

Zusammenfassend lässt sich feststellen, dass sowohl die kurzreichweitigen Korrelationen als auch die spezifische Struktur der tiefen Anregungen auf die Bildung einer nematischen Phase im N-Bereich des Phasendiagramms hinweisen, die durch Spin-Quadrupol-Fluktuationen charakterisiert ist. Ebenso wurde vermutet, dass die Korrelatoren $\langle (S_0^z)^2 (S_{2n}^z)^2 \rangle$ und $\langle S_0^z S_{2n}^z \rangle$ ein exponentielles bzw. $1/x$ Verhalten aufweisen, was in Abb. 23 annähernd gut zu erkennen ist.

Literatur

- [ABB⁺99] ANDERSON, EDWARD, ZHAOJUN BAI, CHRISTIAN BISCHOF, SUSAN BLACKFORD, JACK DONGARRA, JEREMY DU CROZ, ANNE GREENBAUM, SVEN HAMMARLING, A MCKENNEY D SORENSEN: LAPACK Users' guide, 9. Siam, 1999.
- [AG84] ANDREEV, AF IA GRISHCHUK: Spin nematics. Sov. Phys. JETP, 60:267, 1984.
- [AHT⁺94] AZUMA, MASAKI, Z HIROI, M TAKANO, K ISHIDA Y KITAOKA: Observation of a Spin Gap in Sr Cu₂O₃ Comprising Spin-1/2 Quasi-1D Two-Leg Ladders. Physical review letters, 73(25):3463, 1994.
- [Bal98] BALLENTINE, LESLIE E: Quantum mechanics: A modern development. World scientific, 1998.
- [BB06] BLANCHARD, PH E BRÜNING: Remarks on the structure of states of composite quantum systems and envariance. Physics Letters A, 355(3):180–187, 2006.
- [BCP08] BULLA, RALF, THEO A COSTI THOMAS PRUSCHKE: Numerical renormalization group method for quantum impurity systems. Reviews of Modern Physics, 80(2):395, 2008.
- [BDSW96] BENNETT, CHARLES H, DAVID P DIVINCENZO, JOHN A SMOLIN WILLIAM K WOOTTERS: Mixed-state entanglement and quantum error correction. Physical Review A, 54(5):3824, 1996.
- [BKM05] BENDJAMA, RACHEL, BRIJESH KUMAR FRÉDÉRIC MILA: Absence of single-particle Bose-Einstein condensation at low densities for bosons with correlated hopping. Physical review letters, 95(11):110406, 2005.
- [Blu12] BLUM, KARL: Density matrix theory and applications, 64. Springer Science & Business Media, 2012.

- [BP02] BREUER, HEINZ-PETER FRANCESCO PETRUCCIONE: The theory of open quantum systems. Oxford University Press on Demand, 2002.
- [BR96] BOUCHER, JP LP REGNAULT: The Inorganic Spin-Peierls Compound CuGeO. Journal de Physique I, 6(12):1939–1966, 1996.
- [CCL90] CHANDRA, P, P COLEMAN AI LARKIN: A quantum fluids approach to frustrated Heisenberg models. Journal of Physics: Condensed Matter, 2(39):7933, 1990.
- [CG91] CHUBOKOV, AV DI GOLOSOV: Quantum theory of an antiferromagnet on a triangular lattice in a magnetic field. Journal of Physics: Condensed Matter, 3(1):69, 1991.
- [CHG02] CHAN, GARNET KIN-LIC MARTIN HEAD-GORDON: Highly correlated calculations with a polynomial cost algorithm: A study of the density matrix renormalization group. The Journal of chemical physics, 116(11):4462–4476, 2002.
- [CKUC09] CHANGLANI, HITESH J, JESSE M KINDER, CYRUS J UMRIGAR GARNET KIN-LIC CHAN: Approximating strongly correlated wave functions with correlator product states. Physical Review B, 80(24):245116, 2009.
- [CZ04] CANALS, BENJAMIN ME ZHITOMIRSKY: An XY checkerboard antiferromagnet in an external field. Journal of Physics: Condensed Matter, 16(11):S759, 2004.
- [dJM74] JONGH, L JO DE AR MIEDEMA: De nombreuses références peuvent être trouvées dans. Adv. Phys, 23:1, 1974.
- [EMF⁺05] ENDERLE, M, C MUKHERJEE, B FÅK, RK KREMER, J-M BROTO, H ROSNER, S-L DRECHSLER, J RICHTER, J MALEK, A PROKOFIEV.: Quantum helimagnetism of the frustrated spin-1/2 chain LiCuVO4. EPL (Europhysics Letters), 70(2):237, 2005.

- [ES03] EXLER, MATTHIAS JÜRGEN SCHNACK: Evaluation of the low-lying energy spectrum of magnetic Keplerate molecules using the density-matrix renormalization group technique. Physical Review B, 67(9):094440, 2003.
- [FFGK86] FALK, U, A FURRER, HU GÜDEL JK KJEMS: Three-Spin Interaction in Cs Mn 0.28 Mg 0.72 Br 3. Physical review letters, 56(18):1956, 1986.
- [FKMS07] FRIEDRICH, A, AK KOLEZHUK, IP MCCULLOCH U SCHOLLWÖCK: Edge singularities in high-energy spectra of gapped one-dimensional magnets in strong magnetic fields. Physical Review B, 75(9):094414, 2007.
- [FLP⁺06] FOUET, J-B, A LÄUCHLI, S PILGRAM, RM NOACK F MILA: Frustrated three-leg spin tubes: From spin 1/2 with chirality to spin 3/2. Physical Review B, 73(1):014409, 2006.
- [GWH⁺05] GRIESMAIER, AXEL, JÖRG WERNER, SVEN HENSLER, JÜRGEN STUHLER TILMAN PFAU: Bose-Einstein condensation of chromium. Physical Review Letters, 94(16):160401, 2005.
- [Hal88] HALDANE, FDM: Exact Jastrow-Gutzwiller resonating-valence-bond ground state of the spin-(1/2 antiferromagnetic Heisenberg chain with 1/r 2 exchange. Physical review letters, 60(7):635, 1988.
- [HJFW04] HAGER, G, E JECKELMANN, H FEHSKE G WELLEIN: Parallelization strategies for density matrix renormalization group algorithms on shared-memory systems. Journal of Computational Physics, 194(2):795–808, 2004.
- [HK02] HARADA, KENJI NAOKI KAWASHIMA: Quadrupolar order in isotropic Heisenberg models with biquadratic interaction. Physical Review B, 65(5):052403, 2002.

- [HT95] HIROI, Z M TAKANO: Absence of superconductivity in the doped antiferromagnetic spin-ladder compound (La, Sr) CuO₂. 5. Nature, 377(6544):41–43, 1995.
- [HWJF05] HAGER, GEORG, GERHARD WELLEIN, ERIC JECKELMANN HOLGER FEHSKE: DMRG investigation of stripe formation in doped Hubbard ladders. High Performance Computing in Science and Engineering, Munich 2004, 339–347. Springer, 2005.
- [IIUY96] IWASE, HIDEO, MASAHIKO ISOBE, YUTAKA UEDA HIROSHI YASUOKA: Observation of spin gap in CaV₂O₅ by NMR. Journal of the Physical Society of Japan, 65(8):2397–2400, 1996.
- [IUS14] IVANOV, NEDKO B, JÖRG UMMETHUM JÜRGEN SCHNACK: Phase diagram of the alternating-spin Heisenberg chain with extra isotropic three-body exchange interactions. arXiv preprint arXiv:1407.4606, 2014.
- [Jec02] JECKELMANN, ERIC: Dynamical density-matrix renormalization-group method. Physical Review B, 66(4):045114, 2002.
- [Küc09] KÜCHEL, T: Dynamics of one-dimensional electron systems. PhD Thesis. Karlsruhe Institute of Technology, 2009.
- [LBH⁺] LIU, XUN-GAO, SONG-SONG BAO, JIAN HUANG, KAZUYA OTSUBO, JIAN-SHEN FENG, MIN REN, FENG-CHUN HU, ZHIHU SUN, LI-MIN ZHENG, SHIQIANG WEI HIROSHI KITAGAWA: unveröffentlichter Artikel.
- [LDL⁺05] LÄUCHLI, A, JC DOMENGE, C LHUILLIER, P SINDZINGRE M TROYER: Two-step restoration of SU(2) symmetry in a frustrated ring-exchange magnet. Physical review letters, 95(13):137206, 2005.
- [LF96] LEGEZA, ÖRS GÁBOR FÁTH: Accuracy of the density-matrix renormalization-group method. Physical Review B, 53(21):14349, 1996.

- [LMM11] LACROIX, CLAUDINE, PHILIPPE MENDELS FRÉDÉRIC MILA: Introduction to Frustrated Magnetism: Materials, Experiments, Theory, 164. Springer Science & Business Media, 2011.
- [LNST08] LEGEZA, Ö, RM NOACK, J SÓLYOM L TINCANI: Applications of quantum information in the density-matrix renormalization group. Computational many-particle physics, 653–664. Springer, 2008.
- [LP94] LIANG, SHOUDAN HANBIN PANG: Approximate diagonalization using the density matrix renormalization-group method: A two-dimensional-systems perspective. *Physical Review B*, 49(13):9214, 1994.
- [LST06] LÄUCHLI, ANDREAS, GUIDO SCHMID SIMON TREBST: Spin nematics correlations in bilinear-biquadratic $S=1$ spin chains. *Physical Review B*, 74(14):144426, 2006.
- [LT06] LECHEMINANT, P K TOTSUKA: Competing orders and hidden duality symmetries in two-leg spin ladder systems. *Physical Review B*, 74(22):224426, 2006.
- [Mal03] MALVEZZI, ANDRÉ LUIZ: An introduction to numerical methods in low-dimensional quantum systems. *Brazilian Journal of Physics*, 33(1):55–72, 2003.
- [Mat93] MATTIS, DANIEL C: The Many-Body Problem: An Encyclopedia of Exactly Solved Models in One Dimension (3rd Printing with Revisions and Corrections). World Scientific, 1993.
- [McC02] MCCULLOCH, IAN PETER: Collective Phenomena in Strongly Correlated Electron Systems. Australian National University, 2002.

- [McC07] McCULLOCH, IAN P: From density-matrix renormalization group to matrix product states. Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment, 2007(10):P10014, 2007.
- [MK95] MATSUDA, M K KATSUMATA: Magnetic properties of a quasi-one-dimensional magnet with competing interactions: SrCuO₂. Journal of magnetism and magnetic materials, 140:1671–1672, 1995.
- [MSBC09] MEZZACAPO, FABIO, NORBERT SCHUCH, MASSIMO BONINSEGNI J IGNACIO CIRAC: Ground-state properties of quantum many-body systems: entangled-plaquette states and variational Monte Carlo. New Journal of Physics, 11(8):083026, 2009.
- [MSS06] MOMOI, TSUTOMU, PHILIPPE SINDZINGRE NIC SHANNON: Octupolar order in the multiple spin exchange model on a triangular lattice. Physical review letters, 97(25):257204, 2006.
- [MWH⁺10] MÜNDER, W, A WEICHELBAUM, A HOLZNER, JAN VON DELFT CL HENLEY: Correlation density matrices for one-dimensional quantum chains based on the density matrix renormalization group. New Journal of Physics, 12(7):075027, 2010.
- [NA08] NISHIMOTO, S M ARIKAWA: Low-lying excitations of the three-leg spin tube: A density-matrix renormalization group study. Physical Review B, 78(5):054421, 2008.
- [NC10] NIELSEN, MICHAEL A ISAAC L CHUANG: Quantum computation and quantum information. Cambridge university press, 2010.
- [NJK91] NERSESYAN, AA, GI JAPARIDZE IG KIMERIDZE: Low-temperature magnetic properties of a two-dimensional spin nematic state. Journal of Physics: Condensed Matter, 3(19):3353, 1991.

- [Pap88] PAPANICOLAOU, NUCL: Unusual phases in quantum spin-1 systems. Nuclear Physics B, 305(3):367–395, 1988.
- [Par80] PARLETT, BERESFORD N: The symmetric eigenvalue problem, 7. SIAM, 1980.
- [PF10] PARKINSON, JOHN B DAMIAN JJ FARNELL: Introduction. An Introduction to Quantum Spin Systems, 1–5. Springer, 2010.
- [PWKH99] PESCHEL, INGO, XIAOQUN WANT, MATTHIAS KAULKE KAREN HALLBERG: Density matrix renormalization: a new numerical method in physics: lectures of a seminar and workshop held at the Max-Planck-Institut für Physik komplexer Systeme, Dresden, Germany, August 24th to September 18th, 1998. Density-matrix renormalization, a new numerical method in physics, 528, 1999.
- [RHLW07] RAN, Y., M. HERMELE, P. A. LEE X.-G. WEN: Projected-Wave-Function Study of the Spin-1/2 Heisenberg Model on the Kagomé Lattice. Physical Review Letters, 98(11):117205, 2007.
- [Saa03] SAAD, YOUSEF: Iterative Methods for Sparse Linear Systems. SIAM, 2, 2003.
- [SALR16] STREČKA, JOZEF, RAPHAEL CAVALCANTE ALÉCIO, MARCELO L LYRA ONOFRE ROJAS: Spin frustration of a spin-1/2 Ising–Heisenberg three-leg tube as an indispensable ground for thermal entanglement. Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 409:124–133, 2016.
- [San11] SANDVIK, ANDERS W: Computational studies of quantum spin systems. arXiv preprint arXiv:1101.3281, 2011.
- [Sch89] SCHULZ, HJ: Fermi-surface instabilities of a generalized two-dimensional Hubbard model. Physical Review B, 39(4):2940, 1989.

- [Sch05] SCHOLLWÖCK, ULRICH: The density-matrix renormalization group. Reviews of modern physics, 77(1):259, 2005.
- [Sch09] SCHNACK, J.: Effects of frustration on magnetic molecules: a survey from Olivier Kahn till today. ArXiv e-prints, 2009.
- [Sch11] SCHOLLWÖCK, ULRICH: The density-matrix renormalization group in the age of matrix product states. Annals of Physics, 326(1):96–192, 2011.
- [SDLM06] SCHMIDT, KP, J DORIER, A LÄUCHLI F MILA: Single-particle versus pair condensation of hard-core bosons with correlated hopping. Physical Review B, 74(17):174508, 2006.
- [SMS06] SHANNON, NIC, TSUTOMU MOMOI PHILIPPE SINDZINGRE: Nematic order in square lattice frustrated ferromagnets. Physical review letters, 96(2):027213, 2006.
- [SPM10] SHANNON, NIC, KARLO PENC YUKITOSHI MOTOME: Nematic, vector-multipole, and plateau-liquid states in the classical O (3) pyrochlore antiferromagnet with biquadratic interactions in applied magnetic field. Physical Review B, 81(18):184409, 2010.
- [SS07] SCHMITTECKERT, PETER GÜNTER SCHNEIDER: Signal transport and finite bias conductance in and through correlated nanostructures. High Performance Computing in Science and Engineering'06, 113–126. Springer, 2007.
- [SS10] SCHNALLE, ROMAN JÜRGEN SCHNACK: Calculating the energy spectra of magnetic molecules: application of real-and spin-space symmetries. International Reviews in Physical Chemistry, 29(3):403–452, 2010.

- [SS13] SMERALD, ANDREW NIC SHANNON: Theory of spin excitations in a quantum spin-nematic state. Physical Review B, 88(18):184430, 2013.
- [Str] STROUSTRUP, BJARNE: The C++ Programming Language, 2000. ISO/IEC, 14882.
- [TLMP12] TÓTH, TAMÁS A, ANDREAS M LÄUCHLI, FRÉDÉRIC MILA KARLO PENC: Competition between two-and three-sublattice ordering for $S=1$ spins on the square lattice. Physical Review B, 85(14):140403, 2012.
- [TW05] TROYER, MATTHIAS UWE-JENS WIESE: Computational complexity and fundamental limitations to fermionic quantum Monte Carlo simulations. Physical review letters, 94(17):170201, 2005.
- [Umm12] UMMETHUM, J: Calculation of static and dynamical properties of giant magnetic molecules using DMRG. PhD Thesis. University of Bielefeld, 2012.
- [USL13] UMMETHUM, J., J. SCHNACK A. M. LÄUCHLI: Large-scale numerical investigations of the antiferromagnetic Heisenberg icosidodecahedron. Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 327:103–109, 2013.
- [VC04] VERSTRAETE, FRANK J IGNACIO CIRAC: Renormalization algorithms for quantum-many body systems in two and higher dimensions. arXiv preprint cond-mat/0407066, 2004.
- [VPC04] VERSTRAETE, FRANK, DIEGO PORRAS J IGNACIO CIRAC: Density matrix renormalization group and periodic boundary conditions: a quantum information perspective. Physical review letters, 93(22):227205, 2004.
- [Whi92] WHITE, STEVEN R: Density matrix formulation for quantum renormalization groups. Physical Review Letters, 69(19):2863, 1992.

- [Whi93] WHITE, STEVEN R: Density-matrix algorithms for quantum renormalization groups. Physical Review B, 48(14):10345, 1993.
- [Whi96] WHITE, STEVEN R: Spin gaps in a frustrated Heisenberg model for CaV₄O₉. Physical review letters, 77(17):3633, 1996.
- [Wil75] WILSON, KENNETH G: The renormalization group: Critical phenomena and the Kondo problem. Reviews of Modern Physics, 47(4):773, 1975.
- [Zhi02] ZHITOMIRSKY, ME: Field-induced transitions in a Kagomé antiferromagnet. Physical review letters, 88(5):057204, 2002.
- [Zhi08] ZHITOMIRSKY, ME: Octupolar ordering of classical kagome antiferromagnets in two and three dimensions. Physical Review B, 78(9):094423, 2008.

Erklärung

Hiermit versichere ich, dass ich die vorliegende Arbeit selbstständig verfasst und keine anderen als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel benutzt habe, dass alle Stellen der Arbeit, die wörtlich oder sinngemäß aus anderen Quellen übernommen wurden, als solche kenntlich gemacht sind und dass die Arbeit in gleicher oder ähnlicher Form noch keiner Prüfungsbehörde vorgelegt wurde.

Bielefeld, den 25. Januar 2017

Unterschrift