

Masterarbeit

Dynamik in 1D Quanten-Spin-Ketten bei endlichen Temperaturen

Dynamics of 1D quantum spin chains at finite temperatures

angefertigt von

Thomas Köhler

aus Bremen

am Institut für Theoretische Physik

Bearbeitungszeit: 20. Juni 2013 bis 20. Dezember 2013

Betreuer/in: apl. Prof. Dr. Andreas Honecker & Dr. Salvatore R. Manmana

Erstgutachter: apl. Prof. Dr. Andreas Honecker

Zweitgutachter: Prof. Dr. Thomas Pruschke

Inhaltsverzeichnis

1. Einleitung	1
2. Modelle	4
2.1. Heisenberg-Modell	4
2.2. XXZ-Modell	5
2.3. Spinlose Fermionen	6
2.4. Ising-Modell	6
3. Matrix-Produkt-Zustände	7
3.1. Singulärwert- und QR-Zerlegung	7
3.2. Matrix-Produkt-Zustände	9
3.2.1. Links-/Rechts-Normierung	10
3.2.2. Kompression eines MPS	12
3.2.3. Skalarprodukt	13
3.3. Matrix-Produkt-Operatoren	13
3.4. Observablen	14
4. Zeitentwicklung	16
4.1. Suzuki-Trotter-Zerlegung	16
4.2. Matrixexponentialfunktion	18
4.3. Purifikation eines gemischten Zustandes	19
4.4. MPO-Darstellung des Zeitentwicklungsoperators	21
4.5. Zeitrückentwicklung	23
5. Observablen	24
5.1. Gesamtmagnetisierung und magnetische Suszeptibilität	24
5.2. Spin-Strukturfaktor	26
6. Implementierung	30

Inhaltsverzeichnis

6.1. Programmablauf	30
6.2. Scientific Parallel Algorithms Library (SciPAL)	32
7. Ergebnisse	33
7.1. Magnetisierungskurven	33
7.2. Magnetische Suszeptibilität	35
7.3. Spin-Korrelationsfunktion	37
7.4. Spin-Strukturfaktor	37
7.4.1. Alternierendes Feld h^x	40
7.4.2. Detailanalyse $k = \pi$	41
7.4.3. Spin-1	43
7.4.4. Spin-2	47
8. Zusammenfassung und Ausblick	49
A. Vierte Ordnung Trotter-Zerlegung	51
Literaturverzeichnis	53

1. Einleitung

Schon seit sehr langer Zeit sind Menschen vom Magnetismus fasziniert. Er konnte allerdings erst durch die quantenmechanische Betrachtung von Festkörpern beschrieben werden. Dabei wird das Verhalten eines Elektrons als ein Spinfreiheitsgrad auf einem Gitterplatz des Festkörpers beschrieben. Im Rahmen eines solchen mikroskopischen „Spinmodells“ kann der Ursprung des Magnetismus durch den Impuls und den Spin der Elektronen beschrieben werden, die zusammen ein magnetisches Moment bilden, welches sich in einem externen magnetischen Feld ausrichten kann.

In eindimensionalen Systemen sind bei ausreichend niedrigen Temperaturen Quanteneffekte besonders ausgeprägt. Daher und durch die Fortschritte bei der Synthetisierung quasi-eindimensionaler Materialien [39] ist das Interesse an theoretischen Vorhersagen für eindimensionale Systeme sehr groß. In der Regel ist es aber sehr schwierig, theoretische Vorhersagen zu machen, da es sich um wechselwirkende Systeme handelt, die selten analytisch exakt lösbar sind. Daher werden in vielen Fällen numerische Verfahren angewendet.

Ein großes Problem bei numerischen Simulation von Quantensystemen ist das exponentielle Wachstum des Hilbertraums. Um diesem Problem zu begegnen, wurde 1992 die Dichtematrix-Renormierungsgruppe (DMRG) [47, 70, 71] von Steven R. White eingeführt. Diese hat sich zur Berechnung des Grundzustandes eindimensionaler Spin-Systeme als sehr erfolgreich erwiesen, da der Hilbertraum trunkiert wird, indem lediglich die Zustände mit dem größten Gewicht, d. h. die wahrscheinlichsten Zustände, beibehalten werden. Darüber hinaus wird durch die Kette „gesweept“ (engl. sweep: entlangstreichen), d. h. es wird nicht die ganze Kette am Stück optimiert, sondern immer ein Platz nach dem anderen.

Die DMRG wurde zunächst lediglich zur Berechnung von Grundzuständen, Lücken und Observablen bei $T = 0$ benutzt. Dadurch können Phasendiagramme von eindimensionalen Systemen und Leitersystemen sehr effizient berechnet werden. Neuerdings

1. Einleitung

versucht man auch zweidimensionale Systeme zu behandeln, stößt hier aber sehr schnell an Grenzen [62].

Seit Mitte der 90er Jahre besteht die Möglichkeit dynamische Größen, z. B. den Strukturfaktor, durch Frequenzraummethoden, beispielsweise die Kettenbruch-Zerlegung [25] oder den „correction-vector“-Ansatz [37, 54], der später als dynamische DMRG (DDMRG) [29] bekannt wurde, zu berechnen. Dies wurde in Anlehnung an quasi-eindimensionale Materialien am erweiterten Hubbardmodell angewendet [6].

Zur selben Zeit stellte sich heraus, dass die Zustände, welche die DMRG erzeugt, durch sogenannte Matrix-Produkt-Zustände (MPS) [1, 19] dargestellt werden können [14, 51, 55]. Diese wurden schon früher (z. B. bereits 1968 [5]) unter anderen Namen verwendet und finden insbesondere in der Quanten-Informationstheorie Anwendung [68].

Erst Mitte der 2000er Jahre wurden die Möglichkeiten, die eine komplette Umformulierung der DMRG im Sinne der MPS bietet, verstanden und ausgenutzt. Eine weitere Erweiterung – die adaptive zeitabhängige DMRG (t-DMRG) [13, 69, 73] – konnte daraufhin entwickelt werden. Damit kann die Zeitentwicklung sowohl in imaginärer als auch in realer Zeit behandelt werden, wodurch die Bestimmung des dynamischen Strukturfaktors bei endlicher Temperatur ermöglicht wurde. Dies ist insbesondere interessant für Neutronenstreuexperimente [57], die bei endlichen Temperaturen stattfinden. In diesen Experimenten misst man die Anordnung der Spins innerhalb eines Festkörpers durch Streuung der Neutronen an den Spins und erhält daraus den Spin-Strukturfaktor [9].

Das Ziel dieser Arbeit ist zum einen die Bestimmung von Spin-Strukturfaktoren eindimensionaler Quantenketten mit Spin $S = \frac{1}{2}$, 1 und 2 bei endlicher und unendlicher Temperatur in Verbindung mit externen Magnetfeldern, wobei der Schwerpunkt bei den Spin- $\frac{1}{2}$ -Ketten liegt. Dabei werden auch Systeme mit Dzyaloshinsky-Moriya-Wechselwirkung bzw. gestagertem transversalem Feld betrachtet, welche eine realistischere Modellierung erlauben. Zum anderen ist es Ziel dieser Arbeit, bestehende Methoden zu verbessern bzw. einen Ausblick auf mögliche Verbesserungen zu geben. Um dieses Ziel zu erreichen, wurde eine eigenständiges MPS-Programm geschrieben.

Diese Arbeit ist wie folgt aufgebaut: Zunächst werden die verwendeten Modelle sowie verwandte Modelle beschrieben und grundlegende Eigenschaften diskutiert. Anschließend werden die MPS detailliert eingeführt. Um ein Ziel dieser Arbeit, die Berechnung

1. Einleitung

der Dynamik bei endlicher Temperatur, erreichen zu können, wird die Zeitentwicklung im Rahmen der MPS benötigt und im Kap. 4 eingeführt. Anschließend werden die im Kontext dieser Arbeit relevanten Observablen beschrieben. In Kap. 6 wird schließlich der Algorithmus schematisch erklärt und die Verwendung der Scientific Parallel Algorithms Library (SciPAL) als Matrix-Bibliothek angesprochen. In Kap. 7 werden dann die, mit dem in Kap. 6 beschriebenen Algorithmus erhaltenen, Ergebnisse mit Werten aus der Literatur und der Arbeitsgruppe verglichen. Den Schluss bildet ein Ausblick auf weitere Entwicklungen und mögliche Optimierungen.

In dieser Arbeit wird durchgängig das natürliche Einheitensystem, das heißt $\hbar = c = k_B = 1$, verwendet.

2. Modelle

Die Eigenschaften eines Festkörpers werden durch einen geeigneten Hamiltonoperator beschrieben. Eine Beschreibung, die alle Freiheitsgrade enthält, ist praktisch nicht umsetzbar. Deshalb wird zur Beschreibung einzelner Aspekte bzw. Phänomene auf stark vereinfachte Modelle zurückgegriffen. In diesem Kapitel werden die in dieser Arbeit verwendeten Modelle eingeführt.

2.1. Heisenberg-Modell

Ein Modell zur Beschreibung des Magnetismus von lokalisierten magnetischen Momenten in Festkörpern ist das Heisenberg-Modell [26]. Es wurde 1928 von Werner Heisenberg eingeführt und reduziert die Wechselwirkung zwischen den Elektronen auf die Wechselwirkung zwischen benachbarten Spins auf einem Gitter. In einer Dimension wird es durch den Hamiltonoperator

$$\hat{H}_{\text{Heisenberg}} = \sum_{i=1}^{L-1} J_i \vec{\hat{S}}_i \cdot \vec{\hat{S}}_{i+1} = \sum_{i=1}^{L-1} J_i \left(\hat{S}_i^x \hat{S}_{i+1}^x + \hat{S}_i^y \hat{S}_{i+1}^y + \hat{S}_i^z \hat{S}_{i+1}^z \right)$$

beschrieben. J_i gibt die Stärke der Wechselwirkung zwischen den Plätzen i und $i+1$ an. Zu beachten ist, dass die Summe lediglich bis $L-1$ geht, da offene Randbedingungen verwendet werden. Im Fall $J_i > 0$ liegt eine antiferromagnetische Kopplung vor und im Fall $J_i < 0$ liegt eine ferromagnetische Kopplung vor, diese führen zu entsprechenden Grundzuständen. \hat{S}_i^x , \hat{S}_i^y und \hat{S}_i^z bezeichnen die quantenmechanischen Spin-Operatoren am i -ten Platz einer Kette der Länge L und erfüllen die bekannten Vertauschungsrelationen (s. z. B. [12]). Es ist möglich, die Spinoperatoren \hat{S}_i^x und \hat{S}_i^y mittels der Leiteroperatoren \hat{S}_i^+ und \hat{S}_i^- auszudrücken:

$$\begin{aligned} \hat{S}_i^x &= \frac{1}{2} (\hat{S}_i^+ + \hat{S}_i^-) \\ \hat{S}_i^y &= \frac{1}{2i} (\hat{S}_i^+ - \hat{S}_i^-). \end{aligned}$$

2. Modelle

Damit lässt sich der Hamiltonoperator in die Form

$$\hat{H}_{\text{Heisenberg}} = \sum_{i=1}^{L-1} J_i \left[\frac{1}{2} (\hat{S}_i^+ \hat{S}_{i+1}^- + \hat{S}_i^- \hat{S}_{i+1}^+) + \hat{S}_i^z \hat{S}_{i+1}^z \right]$$

bringen. Dies hat später bei der Implementation den Vorteil, dass alle Operatoren

$$\begin{aligned} \hat{S}^+ &\hat{=} \frac{1}{2}\sigma_x + \frac{i}{2}\sigma_y \\ \hat{S}^- &\hat{=} \frac{1}{2}\sigma_x - \frac{i}{2}\sigma_y \\ \hat{S}^z &\hat{=} \frac{1}{2}\sigma_z \end{aligned}$$

als rein reelle Matrizen in der S^z -Basis ausgedrückt werden können. Hierbei sind die Matrizen σ_x , σ_y und σ_z für Spin- $\frac{1}{2}$ die Paulimatrizen und für höhere Spins entsprechende größere Spinmatrizen.

2.2. XXZ-Modell

Eine Verallgemeinerung des Heisenberg-Modells, das sogenannte XXZ-Modell, wird beschrieben durch

$$\hat{H}_{\text{XXZ}} = \sum_{i=1}^{L-1} \left[\frac{J_i}{2} (\hat{S}_i^+ \hat{S}_{i+1}^- + \hat{S}_i^- \hat{S}_{i+1}^+) + \Delta_i (\hat{S}_i^z \hat{S}_{i+1}^z) \right]. \quad (2.1)$$

Während J_i im Heisenberg-Modell die einzigen Parameter sind, kann im XXZ-Modell eine uniaxiale Richtungs-Anisotropie in z -Richtung mittels der Parameter Δ_i erzeugt werden. Für $\Delta_i = J_i$ erhält man wiederum das Heisenberg-Modell. Im eindimensionalen Fall liefert der Bethe-Ansatz [7] eine analytische Lösung [36, 52, 78].

Zusätzlich zur Spin-Spin-Wechselwirkung können Magnetfelder in x - und z -Richtung eingeführt werden:

$$\hat{H}_{\text{XXZ}} = \sum_{i=1}^{L-1} \left[\frac{J_i}{2} (\hat{S}_i^+ \hat{S}_{i+1}^- + \hat{S}_i^- \hat{S}_{i+1}^+) + \Delta_i (\hat{S}_i^z \hat{S}_{i+1}^z) \right] + \sum_{i=1}^L (h_i^x \hat{S}_i^x + h_i^z \hat{S}_i^z), \quad (2.2)$$

dabei beschreiben h^x und h^z die Stärke der entsprechenden Magnetfelder.

Um eine realistischere Beschreibung des Magnetismus innerhalb eines Festkörpers zu erhalten, kann als weiterer Term die sogenannte Dzyaloshinsky-Moriya-Wechselwirkung

2. Modelle

(DM-WW) [15, 43] in den Hamiltonoperator aufgenommen werden:

$$\hat{H}_{\text{DM}} = \sum_{i=1}^{L-1} \vec{D}_i \cdot \left(\vec{S}_i \times \vec{S}_{i+1} \right).$$

In einer Dimension kann dies durch ein alternierendes Vorzeichen von h^x [18, 50] eingeführt werden:

$$\sum_{i=1}^{L-1} h_i^x \hat{S}_i^x \rightarrow \sum_{i=1}^{L-1} (-1)^i h_i^x \hat{S}_i^x. \quad (2.3)$$

2.3. Spinlose Fermionen

Das XXZ-Modell kann mittels der Jordan-Wigner-Transformation [31] in ein Modell spinloser Fermionen überführt werden. Der Hamiltonoperator lautet dann:

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^{L-1} J_i \left[\frac{1}{2} \left(\hat{c}_i^\dagger \hat{c}_{i+1} + \hat{c}_i \hat{c}_{i+1}^\dagger \right) + \Delta_i \left(\hat{n}_i - \frac{1}{2} \right) \left(\hat{n}_{i+1} - \frac{1}{2} \right) \right] + \sum_{i=1}^L \mu_i \hat{n}_i.$$

Hierbei beschreiben \hat{c}_i und \hat{c}_i^\dagger die fermionischen Vernichtungs-/Erzeugungs-Operatoren am Platz i . Die Besetzungszahloperatoren am Platz i werden durch $\hat{n}_i = \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_i$ beschrieben. μ_i ist das chemische Potential und entspricht der Magnetfeldstärke h_i^z im XXZ-Modell. Folglich kann über μ_i die Füllung des Systems geregelt werden.

Entsprechend existiert auch für das eindimensionale fermionische Modell eine exakte Lösung mittels des Bethe-Ansatzes. Darüber hinaus können auch für dieses Modell dynamische Größen bei endlicher Temperatur mittels der DMRG bestimmt werden [3, 30].

2.4. Ising-Modell

Das Ising-Modell [28] wurde 1924 von Ernst Ising durch Anregung von Wilhelm Lenz eingeführt und kann als Spezialfall des Heisenberg-Modells betrachtet werden, bei dem die Spins lediglich über die z -Komponente wechselwirken. Der Hamiltonoperator ist gegeben durch:

$$\hat{H}_{\text{Ising}} = \sum_{i=1}^{L-1} J_i \hat{S}_i^z \hat{S}_{i+1}^z. \quad (2.4)$$

Da dieses Modell in einer Dimension [28] und in zwei Dimensionen [49] analytisch lösbar ist und es bereits zahlreiche Arbeiten dazu [27, 32, 41] gibt, ist es als Testfall für Vergleichsrechnungen neuer (numerischer) Verfahren sehr nützlich.

3. Matrix-Produkt-Zustände

Das folgende Kapitel enthält eine Beschreibung der wichtigsten Eigenschaften und Konzepte der Matrix-Produkt-Zustände (MPS). Die Darstellung orientiert sich stark am Artikel „The density-matrix renormalization group in the age of matrix product states“ von Ulrich Schollwöck [56], wobei sich alle Beschreibungen auf Systeme mit offenen Randbedingungen beziehen.

3.1. Singulärwert- und QR-Zerlegung

Innerhalb der Beschreibung der MPS nimmt die Faktorisierung von Matrizen eine wesentliche Rolle ein. Im Folgenden sollen zwei verschiedene Zerlegungen näher beschrieben werden: Zum einen die Singulärwertzerlegung (SVD) und zum anderen die QR-Zerlegung.

Die SVD ermöglicht es, eine beliebige Matrix M der Dimension $m \times n$ zu faktorisieren:

$$M = USV^\dagger. \tag{3.1}$$

Hierbei hat die Matrix U die Dimension $m \times \min(m, n)$ und die Matrix V^\dagger die Dimension $\min(m, n) \times n$. Die Matrix S ist eine Diagonalmatrix mit $\min(m, n)$ Einträgen. Die beschriebenen Dimensionen sind in Abb. 3.1 veranschaulicht.

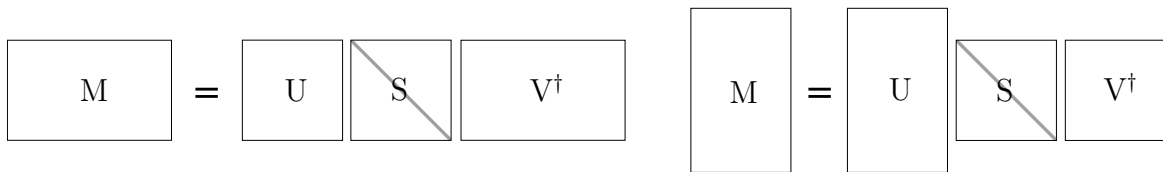


Abb. 3.1.: Schematische Darstellung der SVD

Darüber hinaus besteht die Matrix U stets aus orthonormalen Spalten ($U^\dagger U = \mathbf{1}$) und ist im Fall $m \leq n$ unitär ($U U^\dagger = \mathbf{1}$). Die Matrix V^\dagger besteht aus orthonormalen Zeilen ($V^\dagger V = \mathbf{1}$) und ist im Fall $m \geq n$ unitär ($V V^\dagger = \mathbf{1}$). Die Einträge der Diagonalmatrix

3. Matrix-Produkt-Zustände

S sind immer nicht-negativ und üblicherweise¹ absteigend sortiert. Die Anzahl der positiven Einträge von S entspricht dem sogenannten Schmidt-Rang r der ursprünglichen Matrix M .

Die Frobeniusnorm einer Matrix M ist gegeben durch die Wurzel der Summe der Betragsquadrate der Einträge $M_{i,j}$:

$$\|M\|_F := \sqrt{\sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n |M_{i,j}|^2}.$$

Die Qualität der Näherung einer Matrix M mit Rang r durch eine Matrix M' mit Rang $r' < r$ wird gemessen an der Differenz der Frobeniusnormen. In [16] wurde gezeigt, dass die beste Näherung bestimmt werden kann, indem lediglich die größten r' Singulärwerte der SVD der Matrix M beibehalten und die restlichen auf Null gesetzt werden. Daraufhin sind lediglich die ersten r' Spalten von U bzw. r' Zeilen von V^\dagger weiterhin von Interesse, weshalb die Matrizen entsprechend verkleinert werden können. Für eine detaillierte Beschreibung des SVD-Algorithmus sei auf „Numerical Recipes“ [53] verwiesen.

Da man nicht immer an den Singulärwerten, sondern manchmal lediglich an der Orthonormalität der Spalten- bzw. Zeilenvektoren interessiert ist, kann anstelle der SVD auch die numerisch weniger aufwendige QR-Zerlegung verwendet werden. Diese faktoriert eine beliebige Matrix M der Dimension $m \times n$ in zwei Matrizen Q und R :

$$M = QR. \tag{3.2}$$

Die unitäre Matrix Q hat die Dimension $m \times m$. Die Matrix R hat die Dimension $m \times n$ und ist eine obere Dreiecksmatrix. In Abb. 3.2 ist dies schematisch dargestellt.

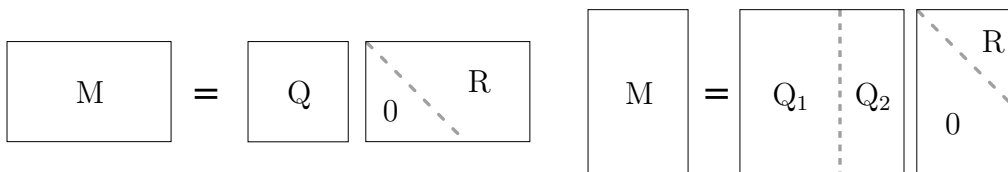


Abb. 3.2.: Schematische Darstellung der QR-Zerlegung

Im Fall $m > n$ kann die Matrix Q auf die Teilmatrix Q_1 mit der Dimension $n \times m$ reduziert werden, da alle Zeilen unterhalb der m ten Zeile der Matrix R Null sind. Ebenso

¹Die eigentliche Zerlegung schreibt diese Sortierung nicht vor. Sie ist aber in den meisten numerischen Bibliotheken implementiert und wird in der Literatur angenommen.

3. Matrix-Produkt-Zustände

können die mit Null gefüllten Zeilen der Matrix R vernachlässigt werden. Es ergibt sich daraufhin die so genannte reduzierte QR-Zerlegung

$$M = Q_1 R,$$

wobei Q_1 die Dimension $m \times n$ und R die Dimension $n \times n$ hat. Q_1 besteht, wie gefordert, aus orthonormalen Spalten ($Q_1^\dagger Q_1 = \mathbf{1}$). Auch für die QR-Zerlegung sei für eine detaillierte Beschreibung des Algorithmus auf „Numerical Recipes“ [53] verwiesen.

3.2. Matrix-Produkt-Zustände

Matrix-Produkt-Zustände (MPS) bieten die Möglichkeit, den Quantenzustand z. B. einer Spin-Kette mit Hilfe von Matrizen darzustellen, die jeweils nur einem Kettenplatz zugeordnet sind. Somit lässt sich der reine Zustand

$$|\psi\rangle = \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_L} c_{\sigma_1 \dots \sigma_L} |\sigma_1, \dots, \sigma_L\rangle,$$

der als Summe über die Basiszustände $|\sigma_1, \dots, \sigma_L\rangle$ mit den Koeffizienten $c_{\sigma_1 \dots \sigma_L} \in \mathbb{C}$ dargestellt ist, als Summe über die Basiszustände mit einem Produkt von lokalen komplexen Matrizen $M^{[i]\sigma_i}$ darstellen:

$$|\psi\rangle = \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_L} \sum_{a_0, \dots, a_L} M_{a_0, a_1}^{[1]\sigma_1} \dots M_{a_{L-1}, a_L}^{[L]\sigma_L} |\sigma_1, \dots, \sigma_L\rangle.$$

Die Dimension dieser Matrizen steigt bis zur Mitte der Kette in Potenzen der Anzahl der möglichen Zustände auf einem Platz an. Entsprechend ist die erste Matrix lediglich ein Zeilenvektor und die letzte lediglich ein Spaltenvektor. Im Spin- $\frac{1}{2}$ Fall gilt also:

$$M^{[1]\sigma_1} \in \mathbb{C}^{1 \times 2}, M^{[2]\sigma_2} \in \mathbb{C}^{2 \times 4}, \dots, M^{[L-1]\sigma_{L-1}} \in \mathbb{C}^{4 \times 2}, M^{[L]\sigma_L} \in \mathbb{C}^{2 \times 1}.$$

Diese Form ist notwendig, damit jedes Produkt aller L Matrizen $M^{[i]\sigma_i}$ einem Skalar entspricht. Da der Platzindex $[i]$ im Folgenden immer dem Zustandsindex von σ_i entspricht, wird er weggelassen.

Die Beschreibung eines Zustandes $|\psi\rangle$ in dieser Formulierung ist zunächst überdefiniert, d. h. er ist durch mehr Werte beschrieben als notwendig. Dennoch hat diese Vorgehensweise deutliche Vorteile. Zum einen ist der direkte Zugriff auf die Beschreibung eines einzelnen Kettenplatzes möglich und zum anderen kann der Überdefinition, wie in Kap.

3. Matrix-Produkt-Zustände

3.2.2 beschrieben, mit einer „Kompression“ begegnet werden.

3.2.1. Links-/Rechts-Normierung

Matrix-Produkt-Zustände werden unterschieden in links-, rechts-, gemischt- und nicht-normierte MPS. Ein nicht-normierter Zustand wurde bereits in Kap. 3.2 gezeigt und besteht aus den Matrizen M^{σ_i} . Ein links-normierter MPS besteht aus den Matrizen A^{σ_i} , welche den Matrizen M^{σ_i} entsprechen, d. h. dass sie den gleichen Zustand beschreiben, jedoch die Bedingung für die links-Normierung $\sum_{\sigma_i} A^{\sigma_i \dagger} A^{\sigma_i} = \mathbf{1}$ erfüllen:

$$|\psi\rangle = \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_L} A^{\sigma_1} \dots A^{\sigma_{L-1}} M^{\sigma_L} |\sigma_1, \dots, \sigma_L\rangle.$$

Ein rechts-normierter Zustand besteht aus Matrizen B^{σ_i} , welche ebenfalls den Matrizen M^{σ_i} entsprechen, jedoch die Bedingung für rechts-Normierung $\sum_{\sigma_i} B^{\sigma_i} B^{\sigma_i \dagger} = \mathbf{1}$ erfüllen:

$$|\psi\rangle = \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_L} M^{\sigma_1} B^{\sigma_2} \dots B^{\sigma_L} |\sigma_1, \dots, \sigma_L\rangle.$$

Ein gemischt-normierter Zustand besteht sowohl aus Matrizen A^{σ_i} als auch aus Matrizen B^{σ_i} :

$$|\psi\rangle = \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_L} A^{\sigma_1} \dots A^{\sigma_{l-1}} M^{\sigma_l} B^{\sigma_{l+1}} \dots B^{\sigma_L} |\sigma_1, \dots, \sigma_L\rangle.$$

In allen Varianten ist eine Matrix M^{σ_i} enthalten, die keine der beiden Normierungsbedingungen erfüllt. Diese ist in der Regel notwendig, da es mit den oben genannten Zerlegungen nicht möglich ist, dass alle Matrizen entsprechende Normierungsbedingungen erfüllen.

Um einen nicht-normierten MPS in einen links-normierten MPS zu überführen, wird auf der linken Seite, also auf dem ersten Kettenplatz, begonnen. Zunächst müssen alle Matrizen, die den zu bearbeitenden Platz repräsentieren, zusammengeführt werden. Hierzu werden die Matrizen für jedes σ_i untereinander angeordnet

$$M_{a_{i-1}, a_i}^{\sigma_i} \rightarrow M_{(\sigma_i, a_{i-1}), a_i}$$

(s. Abb. 3.3) und als eine Matrix M^i interpretiert. Es handelt sich bei dieser Operation um die Darstellung eines Tensors vom Rang drei als Matrix.

Anschließend wird eine der beiden beschriebenen Zerlegungen auf die Matrix M^i angewendet, um eine links-normierte Matrix $U^{[i]}$ (3.1) bzw. $Q^{[i]}$ (3.2) zu erhalten. Diese

3. Matrix-Produkt-Zustände

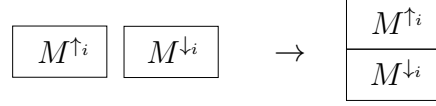


Abb. 3.3.: Schematische Darstellung des Zusammenfügens aller Matrizen eines Platzes, am Beispiel einer Spin- $\frac{1}{2}$ Kette.

wird entsprechend der vorherigen Zusammenführung wieder aufgeteilt und ersetzt damit die ursprünglichen Matrizen M^{σ_i} mit den links-normierten Matrizen A^{σ_i} . Die Matrizen $S^{[i]} \cdot V^{\dagger[i]}$ bzw. $R^{[i]}$ werden an jede Matrix $M^{\sigma_{i+1}}$ des nächsten Kettenplatzes multipliziert. Dieses Produkt ergibt die neuen Matrizen $\tilde{M}^{\sigma_{i+1}}$.

Dieses Vorgehen kann folgendermaßen zusammengefasst werden:

$$\begin{aligned}
 |\psi\rangle &= \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_L} \sum_{a_0, \dots, a_L} M_{a_0, a_1}^{\sigma_1} M_{a_1, a_2}^{\sigma_2} \cdots M_{a_{L-1}, a_L}^{\sigma_L} |\sigma_1, \dots, \sigma_L\rangle \\
 &= \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_L} \sum_{a_0, \dots, a_L} M_{(\sigma_1, a_0), a_1} M_{a_1, a_2}^{\sigma_2} \cdots M_{a_{L-1}, a_L}^{\sigma_L} |\sigma_1, \dots, \sigma_L\rangle \\
 &= \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_L} \sum_{a_0, \dots, a_L} \sum_{s_1} \left\{ \begin{array}{l} U_{(\sigma_1, a_0), s_1} \overbrace{S_{s_1, s_1} V_{s_1, a_1}^\dagger M_{a_1, a_2}^{\sigma_2}}^{\tilde{M}_{s_1, a_2}^{\sigma_2}} \text{ , falls SVD} \\ Q_{(\sigma_1, a_0), s_1} \underbrace{R_{s_1, a_1} M_{a_1, a_2}^{\sigma_2}}_{\tilde{M}_{s_1, a_2}^{\sigma_2}} \text{ , falls QR} \end{array} \right\} M_{a_2, a_3}^{\sigma_3} \cdots |\sigma_1, \dots, \sigma_L\rangle \\
 &= \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_L} \sum_{a_0, s_1, a_2, \dots, a_L} A_{a_0, s_1}^{\sigma_1} \tilde{M}_{s_1, a_2}^{\sigma_2} \cdots M_{a_{L-1}, a_L}^{\sigma_L} |\sigma_1, \dots, \sigma_L\rangle.
 \end{aligned}$$

Analog wird mit den folgenden Plätzen verfahren, bis die letzten Matrizen M^{σ_L} durch die Matrizen \tilde{M}^{σ_L} ersetzt sind.

Entsprechend kann auf der rechten Seite begonnen werden, um einen rechts-normierten MPS zu erhalten. Allerdings ist es dann für die QR-Zerlegung notwendig, die zusammengesetzte Matrix $M_{(\sigma_1, a_0), a_1}$ vor der Zerlegung und das Matrixprodukt QR nach der Zerlegung zu transponieren, um die Orthogonalität des rechten Faktors der Zerlegung zu gewährleisten:

$$\begin{aligned}
 M_{a_{i-1}, a_i}^{\sigma_i} &= M_{a_{i-1}, (\sigma_i, a_i)} = \left(M^\dagger \right)_{a_{i-1}, (\sigma_i, a_i)}^\dagger \\
 &= (QR)_{a_{i-1}, (\sigma_i, a_i)}^\dagger = \left(R^\dagger Q^\dagger \right)_{a_{i-1}, (\sigma_i, a_i)} \\
 &= \sum_{s_i} R_{a_{i-1}, s_i}^\dagger Q_{s_i, (\sigma_i, a_i)}^\dagger
 \end{aligned}$$

3.2.2. Kompression eines MPS

Der entscheidende Vorteil der MPS-Schreibweise liegt, neben der Übersichtlichkeit, darin, dass die Matrizen „komprimierbar“ sind. Das heißt, die Matrizen können, entsprechend der Normierung, mittels der SVD kontrolliert verkleinert werden, indem lediglich die größten χ Singulärwerte zur Approximation verwendet werden:

$$\begin{aligned} A_{a_{i-1}, a_i}^{\sigma_i} &= \sum_{s_i=1}^{\text{Rang}(A^{\sigma_i})} U_{(\sigma_i, a_{i-1}), s_i} S_{s_i, s_i} V_{s_i, a_i}^\dagger \\ &\approx \sum_{s_i=1}^{\chi < \text{Rang}(A^{\sigma_i})} U_{(\sigma_i, a_{i-1}), s_i} S_{s_i, s_i} V_{s_i, a_i}^\dagger. \end{aligned}$$

Wichtig ist hierbei, dass der MPS normiert ist, bevor er komprimiert wird. Ist dies nicht der Fall, so ist die Kompression nicht optimal, da die falschen Zustände vernachlässigt werden.

Als Kontrollgröße dient das vernachlässigte Gewicht ϵ : Dies wird bestimmt durch die Summe der Quadrate der Singulärwerte, die bei der Verkleinerung verworfen werden. Sei die Matrix \tilde{A}^{σ_i} die Komprimierte der Matrix A^{σ_i} , dann gilt:

$$\tilde{A}_{a_{i-1}, a_i}^{\sigma_i} = \sum_{s_i=1}^{\chi < \text{Rang}(A^{\sigma_i})} U_{(\sigma_i, a_{i-1}), s_i} S_{s_i, s_i} V_{s_i, a_i}^\dagger, \quad \epsilon^{[i]} = \sum_{s_i=\chi+1}^{\text{Rang}(A^{\sigma_i})} S_{s_i, s_i}^2.$$

Damit das vernachlässigte Gewicht eine vorgegebene Schranke nicht überschreitet, wird die maximale Dimension χ , welche angibt, wie viele Singulärwerte beibehalten werden, bei Bedarf erhöht. Um den Aufwand zu reduzieren, kann auch das gesamte vernachlässigte Gewicht $\epsilon_{\text{ges.}}$ verwendet werden. Dies beinhaltet die Summe der vernachlässigten Gewichte einer Kompression, das heißt:

$$\epsilon_{\text{ges.}} = \sum_i^L \epsilon^{[i]}.$$

Mit den Quadraten der Singulärwerte kann nicht nur das vernachlässigte Gewicht bestimmt werden; sie sind darüber hinaus die Eigenwerte der reduzierten Dichtematrix der Bipartition, die durch den Schnitt an der Position i definiert ist. Daraus kann wiederum die Verschränkungsentropie

$$S_{A|B}(|\phi\rangle) = -\text{Tr} \hat{\rho}_A \log_2 \hat{\rho}_A = -\sum_{a=1}^r s_a^2 \log_2 s_a^2$$

bestimmt werden.

3.2.3. Skalarprodukt

Das Skalarprodukt zweier Zustände $|\phi\rangle$ und $|\psi\rangle$ in MPS-Darstellung ist gegeben durch:

$$\langle\phi|\psi\rangle = \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_L} \sum_{\sigma'_1, \dots, \sigma'_L} \langle\sigma'_1, \dots, \sigma'_L | \tilde{M}^{\sigma'_1*} \dots \tilde{M}^{\sigma'_L*} M^{\sigma_1} \dots M^{\sigma_L} | \sigma_1, \dots, \sigma_L \rangle.$$

Da es sich bei den σ_i und σ'_i um orthogonale Basisvektoren handelt, reduziert sich die Doppelsumme zu einer einfachen Summe:

$$\langle\phi|\psi\rangle = \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_L} \tilde{M}^{\sigma_1*} \dots \tilde{M}^{\sigma_L*} M^{\sigma_1} \dots M^{\sigma_L}.$$

Der Aufwand zur Auswertung dieses Ausdrucks steigt exponentiell mit der Kettenlänge. Transponiert man die Matrizen des MPS $|\phi\rangle$, so müssen die Summen nur noch über jeweils drei Matrizen ausgeführt werden, weshalb der Aufwand polynomial zur Kettenlänge ist:

$$\langle\phi|\psi\rangle = \sum_{\sigma_L} \tilde{M}^{\sigma_L\dagger} \left(\dots \left(\sum_{\sigma_2} \tilde{M}^{\sigma_2\dagger} \left(\sum_{\sigma_1} \tilde{M}^{\sigma_1\dagger} M^{\sigma_1} \right) M^{\sigma_2} \right) \dots \right) M^{\sigma_L}.$$

3.3. Matrix-Produkt-Operatoren

Analog zu den MPS können Operatoren als Matrix-Produkt-Operatoren (MPO) beschrieben werden. Diese bestehen aus komplexen Tensoren $W_{b_i, b_{i+1}}^{\sigma_i, \sigma'_i}$ vom Rang vier²:

$$\hat{O} = \sum_{\substack{\sigma_1, \dots, \sigma_L \\ \sigma'_1, \dots, \sigma'_L}} W^{\sigma_1, \sigma'_1} \dots W^{\sigma_L, \sigma'_L} | \sigma_1, \dots, \sigma_L \rangle \langle \sigma'_1, \dots, \sigma'_L |.$$

Die Dimensionen dieser Matrizen W^{σ_i, σ'_i} sind abhängig vom Operator. Lediglich die erste und die letzte Matrix sind wie bei den MPS Zeilen- bzw. Spaltenvektoren, da das Produkt $\prod_i W^{\sigma_i, \sigma'_i}$ einen Skalar ergeben muss.

Es gibt verschiedene Möglichkeiten, einen Operator als MPO darzustellen. Die Darstellung der Zeitentwicklungsoperatoren als MPO wird in Kap. 4 erörtert. Für die Darstellung eines Heisenberg-Hamiltonoperators gibt es eine kompakte Schreibweise, welche in

²Auch hier wird, der Übersichtlichkeit halber, auf den Platzindex verzichtet.

3. Matrix-Produkt-Zustände

[56] ausführlich angegeben ist.

Als Beispiel für einen einfachen MPO seien die Tensoren $W_{b_i, b_{i+1}}^{\sigma_i \sigma'_i}$ des \hat{S}^z -Operators am Platz k in MPO-Schreibweise gegeben:

$$W^{\sigma_i \sigma'_i} = \begin{cases} \delta_{\sigma_i \sigma'_i} \in \mathbb{C}^{1 \times 1} & , \quad \forall i \neq k \\ \langle \sigma_i | S^z | \sigma'_i \rangle \in \mathbb{C}^{1 \times 1} & , \quad i = k \end{cases} .$$

Ein MPO \hat{O} kann platzweise auf einen MPS $|\psi\rangle$ angewendet werden, ohne dass die Struktur des MPS zerstört wird:

$$\begin{aligned} \hat{O}|\psi\rangle &= \sum_{\substack{\sigma_1, \dots, \sigma_L \\ \sigma'_1, \dots, \sigma'_L}} W^{\sigma_1 \sigma'_1} \dots W^{\sigma_L \sigma'_L} |\sigma_1, \dots, \sigma_L\rangle \langle \sigma'_1, \dots, \sigma'_L | M^{\sigma'_1} \dots M^{\sigma'_L} | \sigma'_1, \dots, \sigma'_L \rangle \\ &= \sum_{\substack{\sigma_1, \dots, \sigma_L \\ \sigma'_1, \dots, \sigma'_L}} W^{\sigma_1 \sigma'_1} \dots W^{\sigma_L \sigma'_L} M^{\sigma'_1} \dots M^{\sigma'_L} |\sigma_1, \dots, \sigma_L\rangle \\ &= \sum_{\substack{\sigma_1, \dots, \sigma_L \\ \sigma'_1, \dots, \sigma'_L}} \sum_{\substack{a_0, \dots, a_L \\ b_0, \dots, b_L}} \underbrace{\left(W_{b_0, b_1}^{\sigma_1 \sigma'_1} M_{a_0, a_1}^{\sigma'_1} \right)}_{N_{(b_0, a_0), (b_1, a_1)}^{\sigma_1}} \dots \underbrace{\left(W_{b_{L-1}, b_L}^{\sigma_L \sigma'_L} M_{a_{L-1}, a_L}^{\sigma'_L} \right)}_{N_{(b_{L-1}, a_{L-1}), (b_L, a_L)}^{\sigma_L}} |\sigma_1, \dots, \sigma_L\rangle \\ &= \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_L} N^{\sigma_1} \dots N^{\sigma_L} |\sigma_1, \dots, \sigma_L\rangle . \end{aligned}$$

Bei dieser Operation wachsen allerdings die Dimensionen der Matrizen des MPS am Platz i um den Faktor der Dimension der Matrizen des MPO am selben Platz.

3.4. Observablen

Um Observablen $\langle \hat{O} \rangle$ zu berechnen, gibt es zum einen die Möglichkeit einen MPO \hat{O} auf einen MPS $|\psi\rangle$ anzuwenden und anschließend das Skalarprodukt mit dem ursprünglichen MPS $\langle \psi |$ auszuwerten:

$$\langle \hat{O} \rangle = \langle \psi | \tilde{\psi} \rangle, \quad |\tilde{\psi}\rangle = \hat{O}|\psi\rangle .$$

Zum anderen kann das Skalarprodukt unter Einbeziehung eines Operators \hat{O} berechnet werden:

$$\langle \hat{O} \rangle = \langle \psi | \hat{O} | \psi \rangle .$$

Die zweite Methode ist effizienter, da der MPS nicht vergrößert wird, sondern lediglich für jeden Platz über einen Index σ'_i mehr summiert und mit einem Skalar $O^{\sigma_i \sigma'_i} \in \mathbb{C}$

3. Matrix-Produkt-Zustände

multipliziert werden muss:

$$\langle \phi | \psi \rangle = \sum_{\sigma_L, \sigma'_L} O^{\sigma_L \sigma'_L} \tilde{M}^{\sigma'_1 \dagger} \left(\dots \left(\sum_{\sigma_2, \sigma'_2} O^{\sigma_2 \sigma'_2} \tilde{M}^{\sigma'_2 \dagger} \left(\sum_{\sigma_1, \sigma'_1} O^{\sigma_1 \sigma'_1} \tilde{M}^{\sigma'_1 \dagger} [\mathbf{1}] M^{\sigma_1} \right) M^{\sigma_2} \right) \dots \right) M^{\sigma_L}.$$

Es ist jedoch mit dieser Variante nicht möglich, die Korrelationsfunktion $\langle \hat{S}_{L/2}^z(t) \hat{S}_{L/2}^z(0) \rangle$ zu berechnen, da hierfür der MPS $|\tilde{\psi}\rangle = \hat{S}_{L/2}^z(0)|\psi\rangle$ zeitentwickelt werden muss (s. Kap. 5.2).

4. Zeitentwicklung

In diesem Kapitel wird die Zeitentwicklung eines MPS mittels eines MPO beschrieben. Auch hier orientieren sich die Darstellungen stark und zum Teil strikt am Artikel „The density-matrix renormalization group in the age of matrix product states“ von Ulrich Schollwöck [56].

Formal muss die zeitabhängige Schrödingergleichung für einen – in diesem Fall – zeitunabhängigen Hamiltonoperator \hat{H} gelöst werden:

$$i\frac{\partial}{\partial t}|\psi, t\rangle = \hat{H}|\psi, t\rangle.$$

Die formale Lösung dazu lautet:

$$|\psi, t\rangle = e^{-i\hat{H}t}|\psi, 0\rangle.$$

Da der Hamilton-Operator \hat{H} im Fall des XXZ-Modells (s. Gl. (2.1)) ausschließlich aus Nächste-Nachbar-Wechselwirkungen besteht, kann er in Bondoperatoren \hat{h}_i aufgeteilt werden:

$$\hat{H}_{\text{XXZ}} = \sum_i^{L-1} \underbrace{\left[\frac{J_i}{2} (\hat{S}_i^+ \hat{S}_{i+1}^- + \hat{S}_i^- \hat{S}_{i+1}^+) + \Delta_i \hat{S}_i^z \hat{S}_{i+1}^z \right]}_{\hat{h}_i} = \sum_i \hat{h}_i.$$

Somit ergibt sich aus der formalen Lösung:

$$|\psi, t\rangle = e^{-i\hat{H}_{\text{XXZ}}t}|\psi, 0\rangle = e^{-i\sum_i^{L-1} \hat{h}_i t}|\psi, 0\rangle.$$

4.1. Suzuki-Trotter-Zerlegung

Die Summe der Bondoperatoren \hat{h}_i ist in der Praxis nicht diagonalisierbar. Daher wird eine Suzuki-Trotter-Zerlegung [63] angewendet, für die die Zeit diskretisiert werden sollte, um den entstehenden Fehler zu minimieren, d. h. $t = N\Delta t$.

Benachbarte Bondoperatoren kommutieren nicht, $[\hat{h}_i, \hat{h}_{i+1}] \neq 0$. Allerdings kommutieren

4. Zeitentwicklung

alle Bondoperatoren auf geraden bzw. ungeraden Kettenplätzen miteinander

$$\left[\hat{h}_{2i}, \hat{h}_{2(i+1)} \right] = 0 = \left[\hat{h}_{2i+1}, \hat{h}_{2(i+1)+1} \right],$$

weshalb diese zusammengefasst werden können. Das heißt $\hat{H}_{\text{ungerade}} = \sum_i \hat{h}_{2i+1}$ wirkt ausschließlich auf Bonds mit ungeradem Index und $\hat{H}_{\text{gerade}} = \sum_i \hat{h}_{2i}$ ausschließlich auf Bonds mit geradem Index. Dies ist in Abb. 4.1 dargestellt.

$$\begin{array}{cccccc}
 & 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 \\
 & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \\
 \hat{H}_{\text{ungerade}} & = & \hat{h}_1 & + & \hat{h}_3 & + & \hat{h}_5 \\
 \hat{H}_{\text{gerade}} & = & & \hat{h}_2 & + & \hat{h}_4 &
 \end{array}$$

Abb. 4.1.: Darstellung der Zerlegung des Hamiltonoperators \hat{H} in $\hat{H}_{\text{ungerade}}$ und \hat{H}_{gerade}

Die Suzuki-Trotter-Zerlegung erster Ordnung ist gegeben durch:

$$e^{-i\hat{H}\Delta t} = \prod_i e^{-i\hat{h}_i\Delta t} + \mathcal{O}(\Delta t^2) = e^{-i\hat{H}_{\text{gerade}}\Delta t} e^{-i\hat{H}_{\text{ungerade}}\Delta t} + \mathcal{O}(\Delta t^2).$$

Da der Fehler durch die Suzuki-Trotter-Zerlegung $\mathcal{O}(\Delta t^{n+1})$ beträgt, wobei n die Ordnung der Zerlegung darstellt, ist außerdem die Suzuki-Trotter-Zerlegung vierter Ordnung weit verbreitet:

$$e^{-i\hat{H}\Delta t} = \hat{U}(\Delta t_1)\hat{U}(\Delta t_2)\hat{U}(\Delta t_3)\hat{U}(\Delta t_2)\hat{U}(\Delta t_1) + \mathcal{O}(\Delta t^5)$$

mit $\hat{U}(\Delta t_i) = e^{-i\hat{H}_{\text{ungerade}}\Delta t_i/2} e^{-i\hat{H}_{\text{gerade}}\Delta t_i/2} e^{-i\hat{H}_{\text{ungerade}}\Delta t_i/2}$, wobei $\Delta t_1 = \Delta t_2 = \frac{\Delta t}{4-4^{1/3}}$ und $\Delta t_3 = \Delta t - 4\Delta t_1$ ist. Die daraus folgenden 15 Operatoren können zu elf Operatoren zusammengefasst werden¹:

$$\begin{aligned}
 e^{-i\hat{H}\Delta t} &= e^{-i\hat{H}_{\text{ungerade}}\frac{1}{2A}\Delta t} e^{-i\hat{H}_{\text{gerade}}\frac{1}{A}\Delta t} e^{-i\hat{H}_{\text{ungerade}}\frac{1}{A}\Delta t} e^{-i\hat{H}_{\text{gerade}}\frac{1}{A}\Delta t} . \\
 &e^{-i\hat{H}_{\text{ungerade}}\frac{A-3}{2A}\Delta t} e^{-i\hat{H}_{\text{gerade}}\frac{A-4}{A}\Delta t} e^{-i\hat{H}_{\text{ungerade}}\frac{A-3}{2A}\Delta t} e^{-i\hat{H}_{\text{gerade}}\frac{1}{A}\Delta t} . \\
 &e^{-i\hat{H}_{\text{ungerade}}\frac{1}{A}\Delta t} e^{-i\hat{H}_{\text{gerade}}\frac{1}{A}\Delta t} e^{-i\hat{H}_{\text{ungerade}}\frac{1}{2A}\Delta t} + \mathcal{O}(\Delta t^5)
 \end{aligned} \tag{4.1}$$

mit $A = 4 - 4^{1/3}$.

¹Die Herleitung von Gl. (4.1) befindet sich im Anhang A.

4.2. Matrixexponentialfunktion

Bisher wurden die Operatoren \hat{h}_i betrachtet. Für die weiteren Ausführungen werden allerdings Matrizen h_i benötigt, welche die Operatoren darstellen und nach ihnen benannt sind. Um dies zu erreichen, können die Bondoperatoren \hat{h}_i in einer Basis, hier der S^z -Basis der Plätze i und $i + 1$, dargestellt werden:

$$h_{(\sigma_i\sigma_{i+1}),(\sigma'_i\sigma'_{i+1})}^{[i]} = \langle \sigma_i\sigma_{i+1} | \hat{h}_i | \sigma'_i\sigma'_{i+1} \rangle.$$

Der nächste Schritt ist die Berechnung der Matrixexponentialfunktion des lokalen Zeitentwicklungsopters $e^{-ih_i\Delta t}$ auf dem Bond i .

Die Potenzreihe der Matrixexponentialfunktion ist analog zur reellen Exponentialfunktion definiert als:

$$e^{tA} = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(tA)^k}{k!} = \mathbb{1} + tA + \frac{t^2A^2}{2!} + \dots$$

Da jede diagonalisierbare Matrix A eine Zerlegung der Form UDU^\dagger besitzt, bei der die Matrix U unitär $U^\dagger U = \mathbb{1} = UU^\dagger$ und die Matrix D eine Diagonalmatrix ist, kann die Potenzreihe geschrieben werden als:

$$\begin{aligned} e^{tUDU^\dagger} &= \mathbb{1} + tUDU^\dagger + \frac{t^2(UDU^\dagger)^2}{2!} + \dots \\ &= UU^\dagger + UtDU^\dagger + U \frac{t^2 \overbrace{D U^\dagger U}^{\mathbb{1}} D}{2!} U^\dagger \dots \\ &= U \left(\mathbb{1} + t + \frac{t^2 D^2}{2!} \dots \right) U^\dagger \\ &= U e^{tD} U^\dagger. \end{aligned}$$

Die Matrixexponentialfunktion einer Diagonalmatrix kann wiederum gebildet werden, indem auf die Einträge der Diagonale die Exponentialfunktion angewendet wird. Somit kann der Zeitentwicklungsoperator ausgedrückt werden durch:

$$e^{-ih_i\Delta t} = U^{[i]} \begin{pmatrix} \exp(-iD_{1,1}^{[i]}\Delta t) & & & \\ & \exp(-iD_{2,2}^{[i]}\Delta t) & & \\ & & \ddots & \\ & & & \ddots \end{pmatrix} U^{[i]\dagger}. \quad (4.2)$$

Hierbei sind $D_{j,j}^{[i]}$ die Einträge der Diagonalmatrix.

4.3. Purifikation eines gemischten Zustandes

Um die Zeitentwicklung bei endlichen Temperaturen berechnen zu können, muss zusätzlich zur Realzeitentwicklung $e^{-i\hat{H}t}$ eine Imaginärzeitentwicklung $e^{-\beta\hat{H}}$ durchgeführt werden. Hierzu wird die thermische Dichtematrix $\hat{\rho}_\beta$ eines Quantensystems bei einer Temperatur $T = \frac{1}{\beta}$ benötigt. Diese ist zusammen mit der Zustandssumme $Z(\beta)$ gegeben durch:

$$\hat{\rho}_\beta = e^{-\beta\hat{H}} / Z(\beta).$$

Mittels einer „Purifikation“ [46, 65, 66] eines gemischten Zustands kann diese Dichtematrix als reiner Zustand eines erweiterten Quantensystems dargestellt werden. Um das Quantensystem zu erweitern, wird jedem physikalischen Platz ein Behelfsplatz zugeordnet und somit das Gesamtsystem verdoppelt. Im eindimensionalen Fall wird entsprechend aus einer Kette mit L Plätzen eine Leiter mit L Sprossen (s. Abb. 4.2).

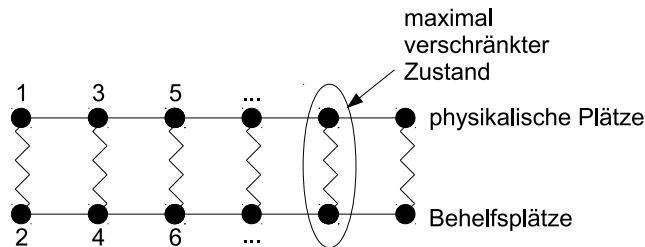


Abb. 4.2.: Darstellung der Kette als Leiter. Die Nummerierung gibt den Platz in der Kette an. (nach [56])

Ein entsprechend zusammengesetzter Zustand $|\psi\rangle$ ist gegeben durch die physikalischen Zustände $|a\rangle_P$ und die Behelfszustände $|a\rangle_B$:

$$|\psi\rangle = \sum_{a=1}^r s_a |a\rangle_P |a\rangle_B,$$

woraus durch die partielle Spur der Dichtematrix bezüglich des Behelfsraumes der physikalische Zustand gegeben ist:

$$\hat{\rho}_P = \text{Tr}_B |\psi\rangle\langle\psi|.$$

Da der Hamiltonoperator \hat{H} lediglich auf die physikalischen Plätze wirkt, kann er als $\hat{H}_P \otimes \mathbb{1}_B$ ausgedrückt werden. Die Zustandssumme ist gegeben als $Z(\beta) = \text{Tr}_P e^{-\beta\hat{H}}$ und die Identität kann mit $\hat{I} = Z(0)\hat{\rho}_0$ beschrieben werden. Wobei $\hat{\rho}_0 = \text{Tr}_B |\psi_{\beta=0}\rangle\langle\psi_{\beta=0}|$ durch einen Zustand $|\psi_{\beta=0}\rangle$, der weiter unten beschrieben wird, definiert ist. Damit

4. Zeitentwicklung

kann die Dichtematrix $\hat{\rho}_\beta$ beschrieben werden als:

$$\begin{aligned}\hat{\rho}_\beta &= e^{-\beta\hat{H}}/Z(\beta) \\ &= \frac{1}{Z(\beta)}e^{-\frac{\beta}{2}\hat{H}}\mathbb{1}e^{-\frac{\beta}{2}\hat{H}} \\ &= \frac{Z(0)}{Z(\beta)}\text{Tr}_B e^{-\frac{\beta}{2}\hat{H}}|\psi_0\rangle\langle\psi_0|e^{-\frac{\beta}{2}\hat{H}}.\end{aligned}$$

Da $\frac{Z(\beta)}{Z(0)}$ lediglich ein Skalar ist, ist der Zustand bei einer Temperatur $T = 1/\beta$ gegeben durch:

$$|\psi_\beta\rangle = e^{-\frac{\beta}{2}\hat{H}}|\psi_0\rangle.$$

Wenn die Imaginärzeitentwicklung bis zu einer Imaginärzeit t_{imag} durchgeführt wird, bedeutet dies, dass die erreichte Temperatur $T = \frac{2}{t_{\text{imag}}}$ beträgt.

Zwischen der physikalischen Kette und der Behelfskette werden maximal verschränkte Zustände $|\psi_{i,0}\rangle$ als Startzustand gewählt. Diese repräsentieren ein System bei unendlicher Temperatur und lassen sich für jeden physikalischen Platz bzw. jede Sprosse i direkt aufstellen:

$$|\psi_{i,0}\rangle = \sum_{\sigma} \frac{1}{\sqrt{d}}|\sigma\rangle_{2i-1}|\sigma\rangle_{2i}.$$

Hierbei ist $|\sigma\rangle_{2i-1}$ der Zustand am physikalischen Platz $2i - 1$, $|\sigma\rangle_{2i}$ der Zustand am Behelfsplatz $2i$ und d die Anzahl der möglichen Zustände pro Platz. Für eine Spin-1-Leiter ($\sigma \in \{-1, 0, 1\}$) sei hier eine beispielhafte Anfangskonfiguration eines MPS $|\psi\rangle$ bei unendlicher Temperatur gegeben:

$$|\psi\rangle = \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_L} M^{\sigma_1} \dots M^{\sigma_L} |\sigma_1, \dots, \sigma_L\rangle.$$

$$\begin{aligned}M^{-1_{2i-1}} &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} & M^{0_{2i-1}} &= \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} & M^{1_{2i-1}} &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \\ M^{-1_{2i}} &= \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{3}} \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} & M^{0_{2i}} &= \begin{pmatrix} 0 \\ \frac{1}{\sqrt{3}} \\ 0 \end{pmatrix} & M^{1_{2i}} &= \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \frac{1}{\sqrt{3}} \end{pmatrix}\end{aligned}$$

Da die physikalischen Plätze jetzt nicht mehr benachbart sind, wird die ursprüngliche Nächste-Nachbar-Wechselwirkung des Hamiltonoperators zu einer Übernächste-Nach-

4. Zeitentwicklung

bar-Wechselwirkung:

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^{L-1} \left[\frac{J_{2i-1}}{2} \left(\hat{S}_{2i-1}^+ \hat{S}_{2i+1}^- + \hat{S}_{2i-1}^- \hat{S}_{2i+1}^+ \right) + \Delta_{2i-1} \hat{S}_{2i-1}^z \hat{S}_{2i+1}^z \right] = \sum_i^{L-1} \hat{h}_i.$$

Allerdings wirkt der Hamiltonoperator nicht auf Behelfsplätze, weshalb der Bondoperator wieder auf eine Zweizustandsmatrix reduziert werden kann:

$$h_{(\sigma_{2i-1}\sigma_{2i+1}),(\sigma'_{2i-1}\sigma'_{2i+1})}^{[i]} = \langle \sigma_{2i-1}\sigma_{2i+1} | \hat{h}_i | \sigma'_{2i-1}\sigma'_{2i+1} \rangle. \quad (4.3)$$

Somit ist der Zeitentwicklungsoperator weiterhin durch Gleichung (4.2) beschrieben.

4.4. MPO-Darstellung des Zeitentwicklungsoperators

Um aus einem Zeitentwicklungsoperator (4.2) für ein gegebenes Zeitintervall Δt einen MPO zu konstruieren, muss dieser zunächst erweitert werden. Dies ist notwendig, da der MPO am Behelfsplatz mit Index $2i$ nicht wie am Behelfsplatz mit Index $2i+2$ der Identitätsoperator ist. Außerdem müssen die Basisvektoren und damit die Matrixelemente umgeordnet werden:

$$Z_{(\sigma_{2i-1}\sigma'_{2i-1}\sigma_{2i}\sigma'_{2i}),(\sigma'_{2i+1}\sigma'_{2i+1})}^{[i]} = Z_{(\sigma_{2i-1}\sigma_{2i+1}),(\sigma'_{2i-1}\sigma'_{2i+1})}^{[i]} \delta_{\sigma_{2i},\sigma'_{2i}}.$$

Da das Zeitintervall Δt bereits beim Erstellen des Zeitentwicklungsoperators feststehen muss, wird es hier nicht weiter als Variable behandelt. Im Folgenden wird der erweiterte und unsortierte Zeitentwicklungsoperator Z_i mittels zweier SVD derart zerlegt, dass Matrizen W^{σ_j,σ'_j} resultieren, die lediglich die Änderung auf einem Platz j beschreiben. Der Lesbarkeit halber sei an dieser Stelle $i = 1$ angenommen. Entsprechend werden die Matrizen, welche die Wechselwirkung zwischen dem ersten und dritten Platz (bzw. dem ersten und zweiten physikalischen Platz) der Kette beschreiben, hier exemplarisch formuliert:

$$\begin{aligned} Z_{(\sigma_1\sigma'_1\sigma_2\sigma'_2),(\sigma_3\sigma'_3)}^{[1]} &\stackrel{1. \text{ SVD}}{=} \sum_{s_2} U_{(\sigma_1\sigma'_1\sigma_2\sigma'_2),s_2} S_{s_2,s_2}^{[2]} V_{s_2,(\sigma'_1\sigma'_3)}^{\dagger[2]} \\ &= \sum_{s_2} U_{(\sigma_1\sigma'_1),(\sigma_2\sigma'_2s_2)} S_{s_2,s_2}^{[2]} V_{s_2,(\sigma'_1\sigma'_3)}^{\dagger[2]} \\ &\stackrel{2. \text{ SVD}}{=} \sum_{s_1,s_2} U_{(\sigma_1\sigma'_1),s_1} S_{s_1,s_1}^{[1]} V_{s_1,(\sigma_2\sigma'_2s_2)}^{\dagger[1]} S_{s_2,s_2}^{[2]} V_{s_2,(\sigma'_1\sigma'_3)}^{\dagger[2]}. \end{aligned}$$

4. Zeitentwicklung

Zusammen mit der Identität am Platz vier folgen hieraus die Einträge W^{σ_j, σ'_j} des MPO, der $e^{-i\hat{h}_1 t}$ repräsentiert:

$$\begin{aligned} W_{1,s_1}^{\sigma_1 \sigma'_1} &= U_{(\sigma_1 \sigma'_1), s_1} \sqrt{S_{s_1, s_1}^{[1]}} \\ W_{s_1, s_2}^{\sigma_2 \sigma'_2} &= \sqrt{S_{s_1, s_1}^{[1]}} V_{s_1, (\sigma_2 \sigma'_2 s_2)}^{\dagger[1]} \sqrt{S_{s_2, s_2}^{[2]}} \\ W_{s_2, 1}^{\sigma_3 \sigma'_3} &= \sqrt{S_{s_2, s_2}^{[2]}} V_{s_2, (\sigma'_3 \sigma_3)}^{\dagger[2]} \\ W_{1,1}^{\sigma_i \sigma'_i} &= I_{1,1}^{\sigma_i \sigma'_i} = \delta_{\sigma_i, \sigma'_i} \quad \forall i > 3. \end{aligned}$$

Für einen beliebigen Platz i der physikalischen Kette wird der Zeitentwicklungsoperator Z_i in vier Tensoren mit Rang vier zerlegt:

$$\begin{aligned} Z_{(\sigma_{2i-1} \sigma'_{2i-1} \sigma_{2i} \sigma'_{2i}), (\sigma_{2i+1} \sigma'_{2i+1})}^{[i]} &= \sum_{s_{2i-1}, s_{2i}} W_{1, s_{2i-1}}^{\sigma_{2i-1} \sigma'_{2i-1}} W_{s_{2i-1}, s_{2i}}^{\sigma_{2i} \sigma'_{2i}} W_{s_{2i}, 1}^{\sigma_{2i+1} \sigma'_{2i+1}} W_{1, 1}^{\sigma_{2i+2} \sigma'_{2i+2}} \\ &= W^{[i,a]} W^{[i,b]} W^{[i,c]} W^{[i,d]} = W^{[i,abcd]}. \end{aligned}$$

Die Operatoren $e^{-i\hat{H}_{\text{gerade}} t}$ und $e^{-i\hat{H}_{\text{ungerade}} t}$ können nun entsprechend als MPO gebildet werden:

$$e^{-i\hat{H}_{\text{ungerade}} \Delta t} = W^{[1,abcd]} W^{[3,abcd]} \dots \quad (4.4)$$

$$e^{-i\hat{H}_{\text{gerade}} \Delta t} = I^{\sigma_1 \sigma'_1} I^{\sigma_2 \sigma'_2} W^{[2,abcd]} W^{[4,abcd]} \dots \quad (4.5)$$

Da das Zeitintervall Δt in die Berechnung der Tensoren $W^{[i,abcd]}$ einfließt, aber bei der Bestimmung der Zeitentwicklungsoperatoren feststehen muss, ist es auf der linken Seite der Gleichung (4.4) zu sehen, auf der rechten aber nicht mehr.

Am Ende eines MPO muss, wie in Kap. 3.3 beschrieben, ein Zeilenvektor stehen. Daher muss ein Tensor $W^{[i,abcd]}$ immer komplett verwendet werden. Das bedeutet, dass bei einer Kette mit ungerader Anzahl physikalischer Plätze die Tensoren $W^{[L,a]}$ und $W^{[L,b]}$ Identitätsoperatoren sind.

Dem hier beschriebenen Verfahren folgend müssen die MPO einmalig für verschiedene Zeitintervalle Δt entsprechend der gewählten Trotter-Zerlegung aufgestellt werden, um einen Zustand dann in der Real- bzw. Imaginärzeit entwickeln zu können.

4.5. Zeitrückentwicklung

Da die Verschränkungsentropie (s. 3.2.2) und damit die benötigte Dimension der Matrizen χ der MPS während der Zeitentwicklung bei festgehaltenem vernachlässigten Gewicht monoton steigt, ist es nicht möglich, beliebig lange Zeiten bzw. beliebig kleine Temperaturen zu erreichen. In [33] haben Christoph Karrasch *et al.* festgestellt, dass die Eichfreiheit im Behelfsraum² genutzt werden kann, um die Verschränkungsentropie zu reduzieren. Hierzu wird die Zeitentwicklung, die im physikalischen Raum durchgeführt wird, mit umgekehrtem Vorzeichen auf den Behelfsraum angewandt.

Trotz der zusätzlichen Anwendung von Operatoren ist dieses Vorgehen sinnvoll, da sich eine Steigerung der Verschränkungsentropie stärker auf den Rechen- und Speicheraufwand auswirkt als der Rechenaufwand des Anwendens zusätzlicher Operatoren.

In Abb. 4.3 ist der Realteil der Spin-Korrelationsfunktion $\langle S_{\frac{1}{2}}^z(t) S_{\frac{1}{2}}^z(0) \rangle$ für eine Spin- $\frac{1}{2}$ Heisenberg-Kette mit 100 physikalischen Plätzen bei endlicher Temperatur einmal ohne (links) und einmal mit Verwendung der Zeitrückentwicklung (rechts) abgebildet. Zum Vergleich sind Daten von Christoph Karrasch dargestellt, diese sind selbstverständlich unter Verwendung der Zeitrückentwicklung entstanden. Man erkennt, dass durch die Zeitrückentwicklung ca. 20% längere Zeiten bei geringeren Matrixdimensionen erreicht werden können.

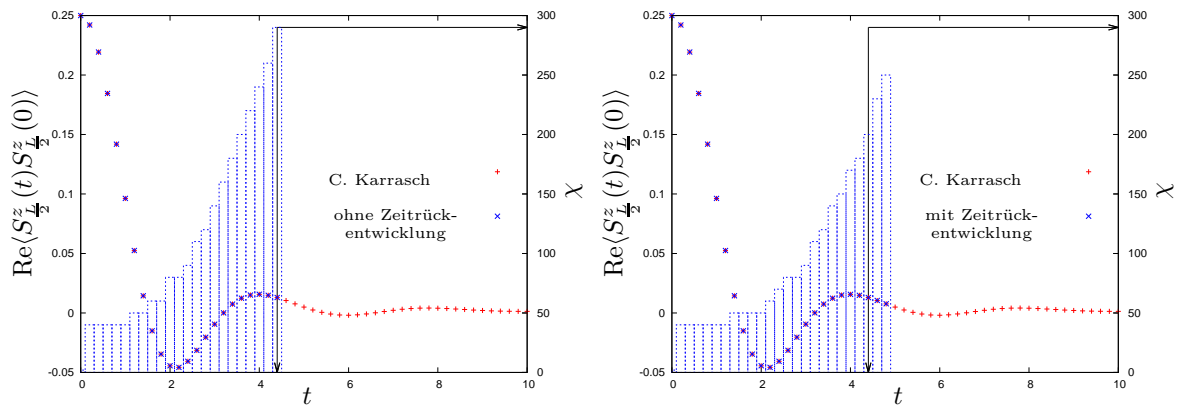


Abb. 4.3.: Spin- $\frac{1}{2}$ Heisenberg-Modell mit 100 physikalischen Plätzen bei $T=0.5$ ohne (links) und mit Zeitrückentwicklung (rechts) auf dem Behelfsraum. Die Balken geben mittels der rechten Achse die Dimension der verwendeten Matrizen an, die durch die Verwendung der Zeitrückentwicklung ca. 33% kleiner sind.

²Die Eichfreiheit besteht darin, dass im Behelfsraum beliebige unitäre Operatoren angewendet werden können.

5. Observablen

Mit den beschriebenen Methoden ist es möglich, viele verschiedene Observablen eines Modells zu messen. Bevor in Kap. 7 Ergebnisse vorgestellt werden, wird in diesem Kapitel eine Übersicht über die für diese Arbeit interessanten Observablen und ihre physikalischen Bedeutungen gegeben. Darüber hinaus wird beschrieben, wie die Erwartungswerte mit der in Kap. 3 und 4 beschriebenen Methodik berechnet werden können. Hierbei ist zu beachten, dass sich Erwartungswerte $\langle \hat{O} \rangle_T$ immer auf einen Zustand mit der Temperatur T bzw. der inversen Temperatur β beziehen:

$$\langle \hat{O} \rangle_T = {}_T \langle \psi | \hat{O} | \psi \rangle_T.$$

Darüber hinaus werden die Observablen nur auf den physikalischen Plätzen und nicht auf den Behelfsplätzen gemessen. Das heißt, dass der Operator \hat{O} (s. Kap. 3.4) im Falle einer zur Leiter erweiterten Kette (s. Kap. 4.3) nur auf jedem zweiten Platz wirkt.

5.1. Gesamtmagnetisierung und magnetische Suszeptibilität

Die Gesamtmagnetisierung in z -Richtung M ist gegeben durch die Summe der Erwartungswerte der lokalen Spinoperatoren \hat{S}_i^z :

$$M = \langle \hat{S}^z \rangle = \sum_{i=1}^L \langle \hat{S}_i^z \rangle.$$

Zur experimentellen Bestimmung dieser Größe gibt es eine Vielzahl von Methoden wie z.B. den Magneto-optischen Kerr-Effekt [22], die Lorentz-Mikroskopie [77] oder das sogenannte SQUID (engl.: superconducting quantum interference device) [10, 11].

Die Gesamtmagnetisierung ist von großem Interesse, da daran Indizien für Phasenübergänge abgelesen werden können. So kann innerhalb der Magnetisierungskurve z. B. ein Plateau entstehen, welches auf eine Energielücke und somit auf einen Mott-Isolator [44]

5. Observablen

hinweist oder es sind Sprünge enthalten, die auf einen Phasenübergang erster Ordnung zwischen verschiedenen magnetischen Phasen deuten. Da man durch die Magnetisierungskurve allein nicht immer alle Informationen über die Phasen erhält, müssen sie mit weiteren Observablen untersucht werden.

Eine weitere wichtige Größe ist die isotherme magnetische Suszeptibilität $\chi(T)$. Sie ist definiert als:

$$\chi(T, h) = \left. \frac{\partial M}{\partial h} \right|_{h=0} = (\langle \hat{S}_z^2 \rangle_T - \langle \hat{S}_z \rangle_T^2) / T.$$

Dabei ist h die Stärke des magnetischen Feldes. Die folgende Ausführung orientiert sich an [48]. Die Suszeptibilität stellt eine sogenannte Response-Funktion (engl. response: Antwort, Reaktion) dar. Sie beschreibt also die Reaktion des Systems auf eine (kleine) externe Anregung, in diesem Fall die Antwort der Magnetisierung auf ein externes Magnetfeld. Es wird zwischen linearen Materialien und nicht-linearen Materialien unterschieden. Für lineare Materialien ist die Suszeptibilität unabhängig von der Stärke der externen Anregung, da die Antwort rein linear ist. Für die nicht-linearen Materialien ist die Suszeptibilität abhängig von der Anregung. Unabhängig von dieser Einteilung hat jedes magnetische Material einen Bereich, in dem die Antwort auf eine Anregung linear zur Anregung ist. In der Regel befinden sich experimentell realisierbare Magnetfelder innerhalb dieses Bereichs. Eine Ausnahme hiervon ist z. B. die Hysterese, bei der schon relativ kleine Magnetfelder ausreichen, um nicht-lineares Verhalten zu induzieren.

In [17, 64] wird die Temperaturabhängigkeit der magnetischen Suszeptibilität des eindimensionalen Heisenberg-Modells entsprechend Abb. 5.1 mittels des Bethe-Ansatzes für kleine Temperaturen beschrieben. Die Haupteigenschaften sind ein Maximum bei der Temperatur $T \approx 0.64J$ und ein exponentiell schneller Abfall im Bereich sehr kleiner Temperaturen auf $\chi(0) = \frac{1}{\pi^2}$, der für das Spin- $\frac{1}{2}$ Heisenbergmodell mit

$$\chi(T) \approx \frac{1}{J\pi^2} + \frac{1}{2J\pi^2 \ln(T_0/T)}$$

und $T_0 \approx 7.7J$ im Bereich $0 < T < 0.1J$ beschrieben werden kann [17]. Darüber hinaus ist der analytische Wert bei $T = 0$ mit einem Kreuz eingezeichnet.

Betrachtet man die inverse magnetische Suszeptibilität $\chi^{-1}(T)$ [48], so fällt das nahezu lineare Verhalten für große T ($TJ > 5$) auf, welches durch

$$\chi(T) = \frac{C}{T - T_C},$$

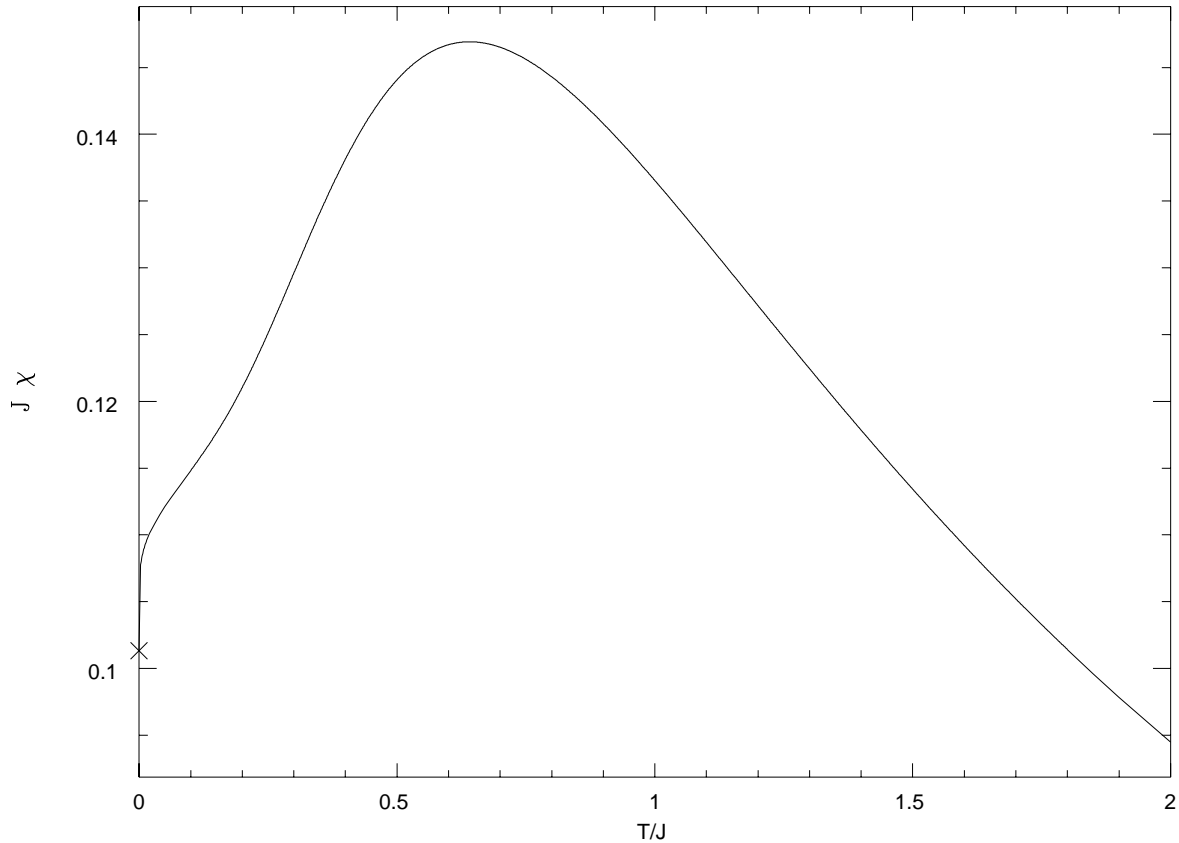


Abb. 5.1.: Verlauf der magnetischen Suszeptibilität für kleine Temperaturen T . Zu erkennen sind ein exponentieller Abfall für sehr kleine T und ein Maximum bei ca. $T \approx 0.64J$. Bei $T = 0$ ist die Suszeptibilität $\chi(0) = \frac{1}{\pi^2}$ eingezeichnet. (Aus [17])

mit der Curie-Konstante C und der Curie-Temperatur T_C beschrieben werden kann.

5.2. Spin-Strukturfaktor

Analog zur Bestimmung des Strukturfaktors eines Kristalls mittels Röntgenstreuung kann der Spin-Strukturfaktor mittels Neutronenstreuung im Experiment bei unterschiedlichen Temperaturen bestimmt werden [38, 60, 74, 76]. Dieser beschreibt die Ordnung der Spin-Zustände innerhalb eines Festkörpers.

Im Spezialfall ($T = 0$) existiert eine analytische Lösung zur Bestimmung des Spin-Strukturfaktors für das eindimensionale Heisenberg-Modell mittels des Bethe-Ansatzes [7, 45]. In Abb. 5.2 sind die daraus erhaltene obere und die untere Grenze des sogenannten Spin-Wellen-Kontinuums, in dem sich die Spin-Wellen aufhalten [45], im Impuls-

5. Observablen

Frequenz-Raum abgebildet. Es ist zu erkennen, dass durch ein externes Magnetfeld eine Lücke am Punkt $k = \pi$ mit der Größe des Magnetfeldes h^z entsteht. Gleichzeitig schließen sich die Lücken an den Punkten $k = \pi \pm 2\pi\sigma(h)$ (s. Gl. (5.7)). Betrachtet man dies im Modell spinloser Fermionen (s. Kap. 2.3), so kann der Fall ohne Magnetfeld auf den Fall der halben Füllung abgebildet werden und der Fall mit Magnetfeld auf eine entsprechend höhere Füllung. Der k -Wert, bei dem keine Lücke vorhanden ist, stellt somit die Füllung dar.

Die Grenzen sind im Fall $h^z = 0$ gegeben durch [45]:

$$\epsilon_1(k) = \frac{\pi}{2} |\sin(k)| \quad (5.1)$$

$$\epsilon_2(k) = \pi \left| \sin\left(\frac{k}{2}\right) \right|. \quad (5.2)$$

Im Falle eines endlichen Magnetfeldes h findet man [45]:

$$\epsilon_{1, \text{ unten}}(k, h) = 2D(h) \sin\left(\frac{k}{2}\right) \cos\left(\frac{k}{2} - \pi\sigma(h)\right) \quad (5.3)$$

$$\epsilon_{1, \text{ oben}}(k, h) = 2D(h) \sin\left(\frac{k}{2}\right) \quad (5.4)$$

$$\epsilon_{2, \text{ unten}}(k, h) = 2D(h) \left| \sin\left(\frac{k}{2}\right) \cos\left(\frac{k}{2} + \pi\sigma(h)\right) \right| \quad (5.5)$$

$$\epsilon_{2, \text{ oben}}(k, h) = \epsilon_{1, \text{ unten}}(k, h) \quad (5.6)$$

mit

$$\sigma(h) \approx \frac{1}{\pi} \arcsin\left(\frac{1}{1 - \frac{\pi}{2} + \frac{\pi}{h}}\right) \quad \text{für } 0 \leq h \leq 2 \quad (5.7)$$

und

$$D(h) = \frac{\pi}{2} + \frac{h}{2} \left(1 - \frac{\pi}{2}\right).$$

Es ist leicht einzusehen, dass aus den Gleichungen 5.3 und 5.4 im Limes $h \rightarrow 0$ im Bereich $0 \leq k \leq \pi$ die Gleichungen 5.1 und 5.2 folgen.

Ein Weg, den Spin-Strukturfaktor $S^{\chi\chi'}(k, \omega)$ zu bestimmen, ist die Berechnung von Spin-Korrelationsfunktionen

$$C_{\chi\chi'}(i, t, j, t') = \langle S_i^\chi(t) S_j^{\chi'}(t') \rangle \quad (5.8)$$

und deren Fourier-Transformierte. Hierbei geben die Indizes χ und χ' an, welche Spin-Korrelationsfunktion jeweils betrachtet wird. Primär wird hierbei zwischen der longitudinalen $\langle S_i^z(t) S_j^z(t') \rangle$ und einer transversalen $\langle S_i^+(t) S_j^-(t') \rangle$ Spin-Korrelationsfunktion

5. Observablen

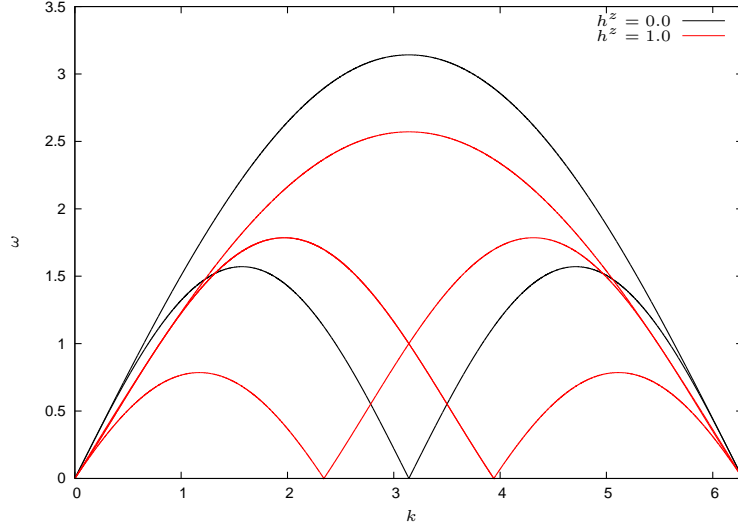


Abb. 5.2.: Obere und untere Grenze des Spin-Wellen-Kontinuums im Impuls-Frequenz-Raum. (Nach [45])

unterschieden. Innerhalb dieser Arbeit werden für die Spin-Korrelationsfunktionen außerdem $t' = 0$ und $j = L/2$ gesetzt.

Numerisch können Spin-Korrelationsfunktionen beispielsweise mittels Quanten-Monte-Carlo-Simulationen [23] oder der DMRG [4, 20, 52, 75] bestimmt werden. Bei der Berechnung der Spin-Korrelationsfunktion $C_{xx'}(i, t, j, t')$ muss zusätzlich zum Zustand $|\phi\rangle_\beta$ der Zustand $|\tilde{\phi}_\beta\rangle(t') = S_j^{x'}(t')|\phi_\beta\rangle$ zeitentwickelt werden.

Um aus den numerisch gewonnen Spin-Korrelationsfunktionen Spin-Strukurfaktoren zu erhalten, müssen diese in den Impuls-Frequenz-Raum transformiert werden:

$$S^{xx'}(k, \omega) = \frac{1}{L} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} \sum_n e^{ikn} \langle S_n^x(t) S_{L/2}^{x'}(0) \rangle.$$

Hierbei hängt die Auflösung $\Delta\omega$ lediglich von der erreichten Zeit t_{\max} ab, während die Größe der Zeitschritte Δt lediglich die maximale Frequenz ω_{\max} einschränkt.

Hierzu folgt ein kleiner Exkurs zur diskreten Fourier-Transformation [53]: Die diskrete Fourier-Transformierte $\mathcal{F}(f(t), \omega_n)$ einer Funktion $f(t)$, die durch N Stützstellen $t_k = k\Delta t$ mit $k = 0, \dots, N$ beschrieben wird, ist gegeben durch:

$$\mathcal{F}(f(t), \omega_n) \approx \Delta t \sum_{k=0}^{N-1} f(t_k) e^{2\pi i k n / N},$$

wobei $\omega_n = 2\pi \frac{n}{N\Delta t}$ mit $n = 0 \dots N$ die Diskretisierung der Fourier-Transformierten ist.

5. Observablen

Entsprechend ist die Differenz

$$\omega_n - \omega_{n+1} = 2\pi \frac{n}{N\Delta t} - 2\pi \frac{n+1}{N\Delta t} = \frac{2\pi}{N\Delta t}$$

und damit die Auflösung in ω nur von der maximal erreichten Zeit $t_{\max} = N\Delta t$ abhängig.

Da insbesondere kleine Frequenzen ω von Interesse sind, möchte man große Zeiten erreichen, also möglichst große Zeitschritte verwenden. Allerdings ist z. B. der Trotterfehler eine Potenz des Zeitschrittes, weshalb der Zeitschritt nicht zu groß gewählt werden darf. Typische Zeitschritte liegen daher im Bereich von $\Delta t = 0.01 \dots 0.2$.

6. Implementierung

Um ein tieferes Verständnis für die in Kap. 3 und 4 beschriebenen Methoden zu erlangen und um eine eigene Code-Basis zu haben, die unabhängig von bisherigen Implementierungen ist, wurde ein eigenes MPS-basiertes Simulationsprogramm von Grund auf in C++ implementiert. Diese Implementation erstreckt sich derzeit über ca. 5800 Zeilen.

6.1. Programmablauf

In Abb. 6.1 ist der Ablauf des Simulationsalgorithmus skizziert. Zu Beginn wird der maximal verschränkte Zustand, wie in Kap. 4.3 beschrieben, in Form eines MPS erstellt. Darüber hinaus werden die MPOs der einzelnen Trotterschritte (s. Kap. 4.1 und 4.4) sowie alle für die Messungen notwendigen MPOs (S^z, S^+, S^-, \dots) erzeugt.

Im nächsten Schritt wird die Imaginärzeitentwicklung durchgeführt. Hierzu wird zunächst der erste Trotter-MPO auf den maximal verschränkten Anfangszustand angewandt. Dann wird der Zustand komprimiert (s. Kap. 3.2.2) und der nächste Trotter-MPO auf den komprimierten Zustand angewandt. Dies wird wiederholt, bis alle Trotter-MPOs eines Imaginärzeitschrittes angewandt wurden. Dann können beliebige Messungen (s. Kap. 3.4) durchgeführt werden. Um die Temperatur des Zustands weiter zu senken, wird eine erneute Anwendung des ersten Trotter-MPOs auf den bereits entwickelten Zustand begonnen.

Ist die gewünschte Temperatur erreicht, werden neue Trotter-MPOs sowohl für die Realzeitentwicklung als auch für die Realzeitrückentwicklung (s. Kap. 4.5) im Behelfsraum erzeugt. Darüber hinaus ist es notwendig, zusätzliche Zustände für die Korrelationsfunktionen zu erzeugen (s. Kap. 5.2). Schließlich wird erneut die Schleife aus Anwenden der Operatoren, Komprimieren und Messen durchgeführt, bis die gewünschte Zeit t_{\max} erreicht ist.

6. Implementierung

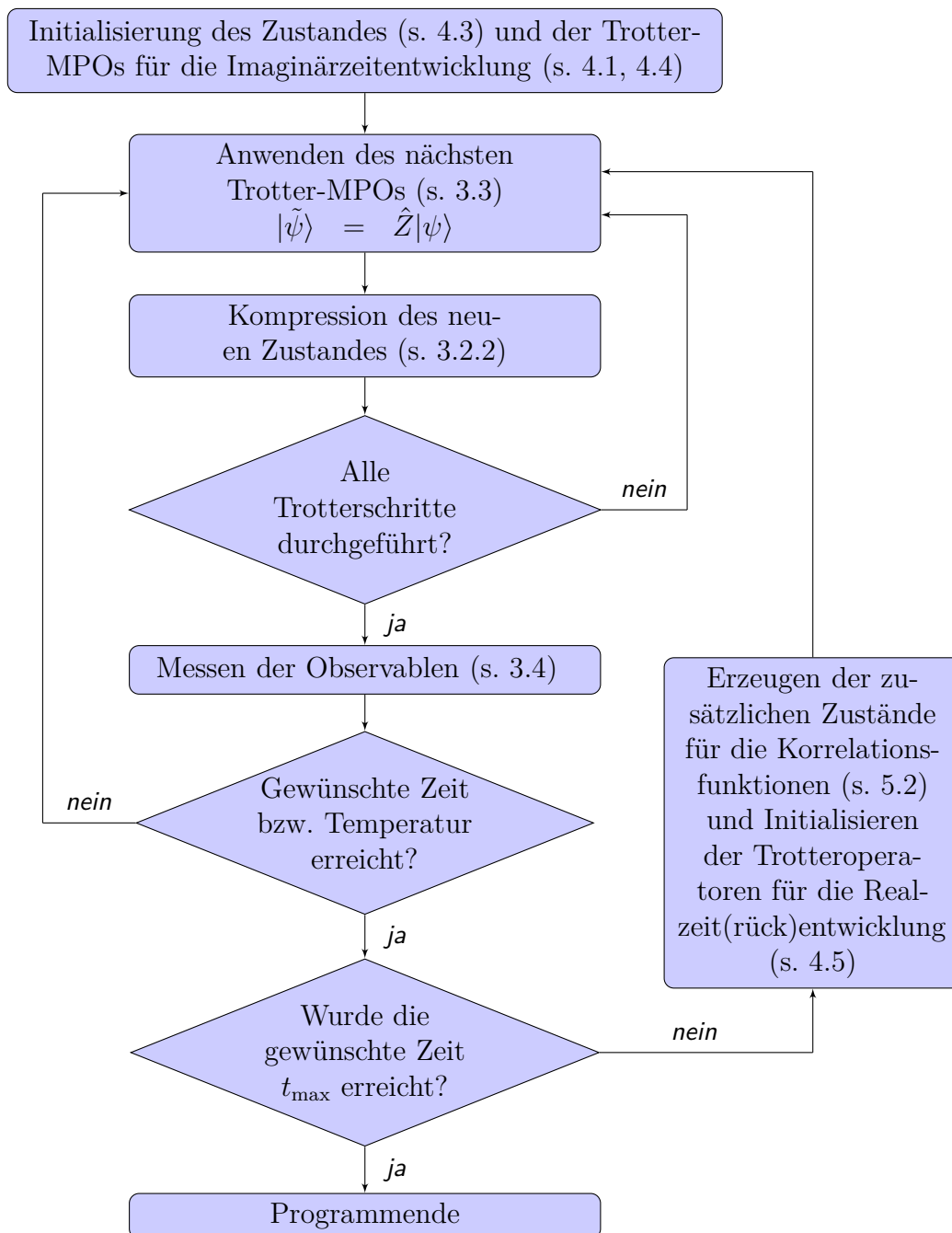


Abb. 6.1.: Schematischer Programmablaufplan

6.2. Scientific Parallel Algorithms Library (SciPAL)

Um eine übersichtlichere Implementierung zu erhalten, wurde in Betracht gezogen, die Matrix-Bibliothek SciPAL (entwickelt von Stephan Kramer, MPI für biophysikalische Chemie/Universität Göttingen und Johannes Hagemann, Universität Göttingen) zu verwenden. Diese arbeitet konsequent mit Expression-Templates [67], welche eine Weiterentwicklung von Operator-Überladungen darstellen und somit den Quellcode deutlich übersichtlicher machen. Mit Hilfe von Expression-Templates wird darüber hinaus in bestimmten Fällen das Anlegen von temporären Kopien (von Objekten, z.B. Matrizen) verhindert.

SciPAL stellt zwei Wrapper für die „Basic Linear Algebra Subprograms“ (BLAS) bzw. das „Linear Algebra PACKage“ (LAPACK) [2] zur Verfügung. Zum einen kann sie sowohl gegen die Fortran-Version als auch gegen die „Math Kernel Library“ (MKL) von Intel gelinkt werden. Zum anderen unterstützt sie die GPU-basierte „Compute Unified Device Architecture“ (CUDA)-BLAS von Nvidia. Dies wurde als großer Vorteil erachtet, da es somit in absehbarer Zukunft möglich wäre, die Simulationen auf Grafikkarten zu portieren.

Nach eingehender Begutachtung des vorhandenen Codes und der testweisen Einbindung der Bibliothek in das bisherige Programm wurde ersichtlich, dass die Bibliothek noch weiterentwickelt werden muss, da verschiedene benötigte Methoden, z. B. die SVD, noch nicht implementiert sind. Daraufhin wurde das Einbinden vorerst unterbrochen. Zu einem späteren Zeitpunkt sollte die Verwendung und ggf. die Weiterentwicklung erneut gestartet werden.

7. Ergebnisse

In diesem Kapitel soll eine Übersicht über die Ergebnisse gegeben werden. Zunächst werden dazu Magnetisierungskurven vorgestellt. Anschließend wird der Verlauf der magnetischen Suszeptibilität für kleine Temperaturen gezeigt. Danach werden Spin-Korrelationsfunktionen für verschiedene Temperaturen abgebildet. Mit Ausnahme der Kapitel 7.4.3 und 7.4.4 liegt allen Daten eine Spin- $\frac{1}{2}$ Kette zugrunde. Im Kap. 7.3 werden schließlich Spin-Strukturfaktoren von Systemen mit verschiedenen Magnetfeldern und unterschiedlichen Spins präsentiert.

7.1. Magnetisierungskurven

In Abb. 7.1 sind Magnetisierungskurven einer Heisenberg-Kette bei verschiedenen Temperaturen aufgetragen. Es handelt sich hierbei um einen Antiferromagneten ($J = 1$) ohne Anisotropie ($\Delta = 1$) mit longitudinale Magnetfeld h^z (links) und mit zusätzlichem alternierendem transversalen Magnetfeld $h_i^x = (-1)^i \cdot 0.083h^z$ (rechts), welches eine DM-WW repräsentiert (s. Kap. 2.2). Während für die Magnetisierungskurven auf der linken Seite Ketten mit 20 Plätzen berechnet wurden, sind für die Kurven auf der rechten Seite lediglich zehn Plätze verwendet worden. Die Magnetisierungskurven bei $T = 0$ wurden jeweils mit Codes von Salvatore Manmana angefertigt.

Man erkennt, dass die Sättigung bei hohen Temperaturen später einsetzt als bei niedrigen Temperaturen. Dies liegt daran, dass bei hohen Temperaturen die thermischen Fluktuationen höher sind, welche der Ausrichtung der Spins am externen Magnetfeld entgegen wirken. Darüber hinaus sieht man bei niedrigen Temperaturen ($T < 2$) Stufen, die bei $T = 0$ ohne h^x scharf sind. Im Grenzfall $T = 0$ kann die Stufenhöhe $\frac{1}{L}$ argumentiert werden: Zunächst sei für diesen Grenzfall¹ der antiferromagnetische Grundzustand

$$|\psi\rangle = |\uparrow\downarrow\uparrow \dots\rangle$$

¹Für endliche Temperaturen ist der Zustand über die Purifikation auszudrücken und dementsprechend nicht so kompakt darstellbar.

7. Ergebnisse

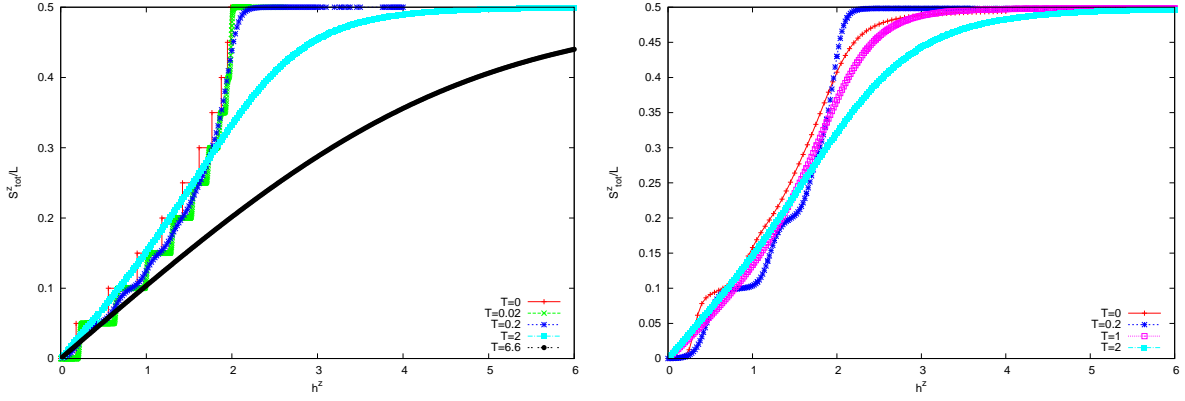


Abb. 7.1.: Magnetisierung pro Kettenplatz einer antiferromagnetischen Heisenberg-Kette mit 20 Plätzen (links) bzw. zehn Plätzen (rechts) als Funktion des angelegten Magnetfeldes h^z bei verschiedenen Temperaturen T . Bei hohen Temperaturen benötigt die Sättigung ein höheres Magnetfeld, da die thermischen Fluktuationen stärker sind. Rechts wurde zusätzlich ein alternierendes transversales Magnetfeld in h^x -Richtung aktiviert, um eine DM-WW hinzuzufügen (s. Kap. 2.2). Dadurch werden im Fall $T = 0$ die Stufen verschmiert und die Sättigung nicht bei $h^z = 2$ erreicht.

einer Kette mit einer geraden Anzahl an Plätzen angenommen.² Wird nun ein Spin vom Magnetfeld umgedreht ($|\downarrow_i\rangle \rightarrow |\uparrow_i\rangle$), so ändert sich die Gesamtmagnetisierung M um

$$\Delta M = \langle \uparrow_i | S_i^z | \uparrow_i \rangle - \langle \downarrow_i | S_i^z | \downarrow_i \rangle = 1.$$

Entsprechend ändert sich die Magnetisierung pro Kettenplatz um $\frac{1}{L}$. Für endliche Temperaturen ist die Argumentation analog, jedoch werden die Stufen durch die thermische Fluktuation verschmiert. Im thermodynamischen Limes $L \rightarrow \infty$ sind die Stufen entsprechend nicht mehr vorhanden, d. h. der Verlauf wird glatt.

Für die Temperatur $T = 2$, bei der die Stufenbildung nicht sichtbar ist, sieht man in beiden Fällen von Abb. 7.1 im Bereich geringer Magnetfeldstärke ein lineares Verhalten, welches sich für große Magnetfeldstärken in ein asymptotisches Verhalten ändert. Bei der hohen Temperatur $T = 6.6$ (Abb. 7.1 links) ist über nahezu den gesamten dargestellten Bereich lediglich das asymptotische Verhalten sichtbar, welches bei niedrigen Temperaturen lediglich im Bereich der Sättigungsmagnetisierung zu sehen ist.

Während das zusätzliche – deutlich niedrigere – Magnetfeld in x -Richtung bei endlichen Temperaturen nahezu keine Auswirkung hat, da es von der thermischen Fluktuation überdeckt wird, ist die Magnetisierungskurve bei $T = 0$ stark verändert. Zum einen sind die scharfen Stufen stark ausgeschmiert und zum anderen ist das System bei der

²Die Beschränkung auf Ketten mit einer geraden Anzahl von Plätzen ist notwendig, damit die Gesamtmagnetisierung im Grundzustand null beträgt.

ursprünglichen Sättigungsmagnetisierung $h^z = 2$ nicht saturiert. Um eine Erklärung im Übergang $T = 0 \rightarrow T > 0$ zu erhalten, sind weitere Arbeiten nötig.

7.2. Magnetische Suszeptibilität

Die magnetische Suszeptibilität unterschiedlich langer Heisenberg-Ketten ist in Abb. 7.2 gegen die Temperatur aufgetragen. Zusätzlich ist die analytische Lösung mittels des Bethe-Ansatzes durch Daten von Andreas Klümper eingezeichnet.

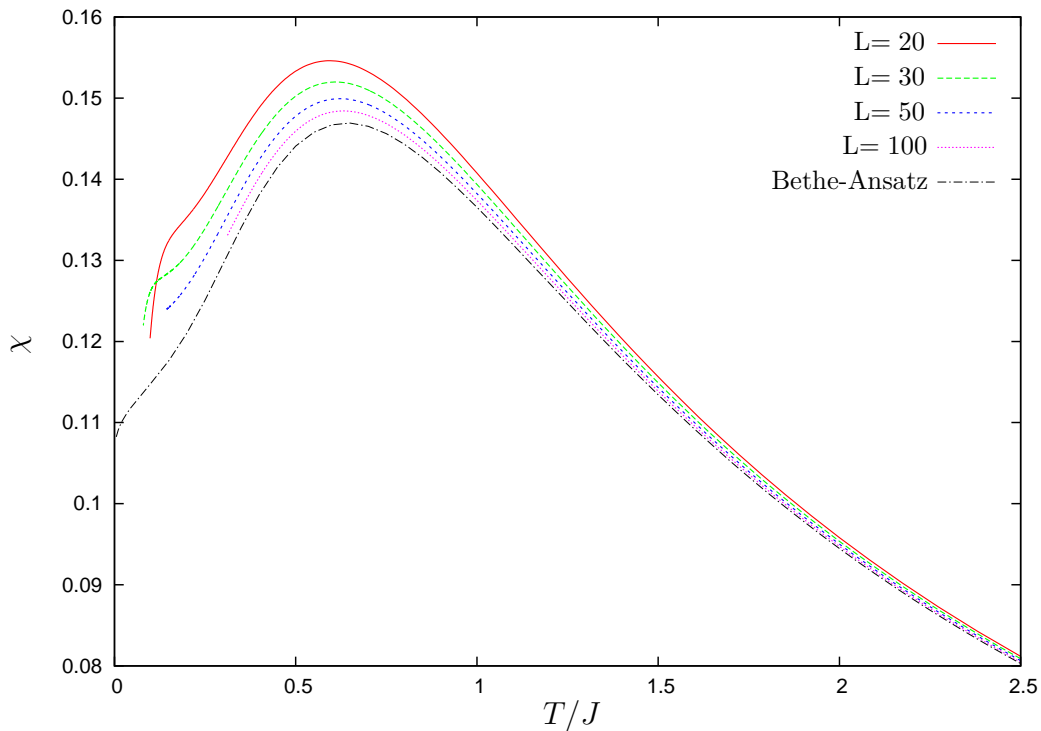


Abb. 7.2.: Magnetische Suszeptibilität unterschiedlich langer Heisenberg-Ketten. Bei der Berechnung wurde ein imaginärer Zeitschritt $\Delta t = 0.005i$ gewählt. Zum Vergleich ist die Bethe-Ansatz-Lösung durch Daten von Andreas Klümper [35] eingezeichnet. Der finite-size-Effekt ist insbesondere bei kleinen Temperaturen stark ausgeprägt.

Es ist zu erkennen, dass die Abweichungen der einzelnen Datenreihen vom Bethe-Ansatz für Temperaturen $T < 2$ sehr stark von der Anzahl der verwendeten Kettenplätze abhängt. Dieser sogenannte finite-size-Effekt ist besonders bei sehr kleinen Temperaturen ausgeprägt, da die Korrelationslänge ξ , welche ein Maß für die Reichweite der Korrelationen ist, mit sinkender Temperatur steigt.

Da die Berechnung der magnetischen Suszeptibilität für niedrige Temperaturen immer

7. Ergebnisse

aufwendiger wird³, sind die Daten in diesem Bereich, insbesondere bei längeren Ketten, nicht vorhanden. Bei den kürzeren Ketten erkennt man allerdings für kleine Temperaturen einen exponentiell schnellen Abfall, welcher qualitativ dem Bethe-Ansatz entspricht, jedoch wegen dem finite-size-Effekt hinsichtlich Position und Größe stark abweicht.

Um zu zeigen, dass der beschriebene finite-size-Effekt nicht methodenspezifisch ist, ist in Abb. 7.3 die magnetische Suszeptibilität der Heisenberg-Kette mit 20 Plätzen zusammen mit Daten von Alexander Tiegel, welche mit einem anderen Verfahren (Lanczos-Zeitentwicklung [21, 40]) aber den gleichen Parametern ermittelt wurden, aufgetragen. Es ist zu erkennen, dass die Daten sich um deutlich weniger als 0.1% unterscheiden.

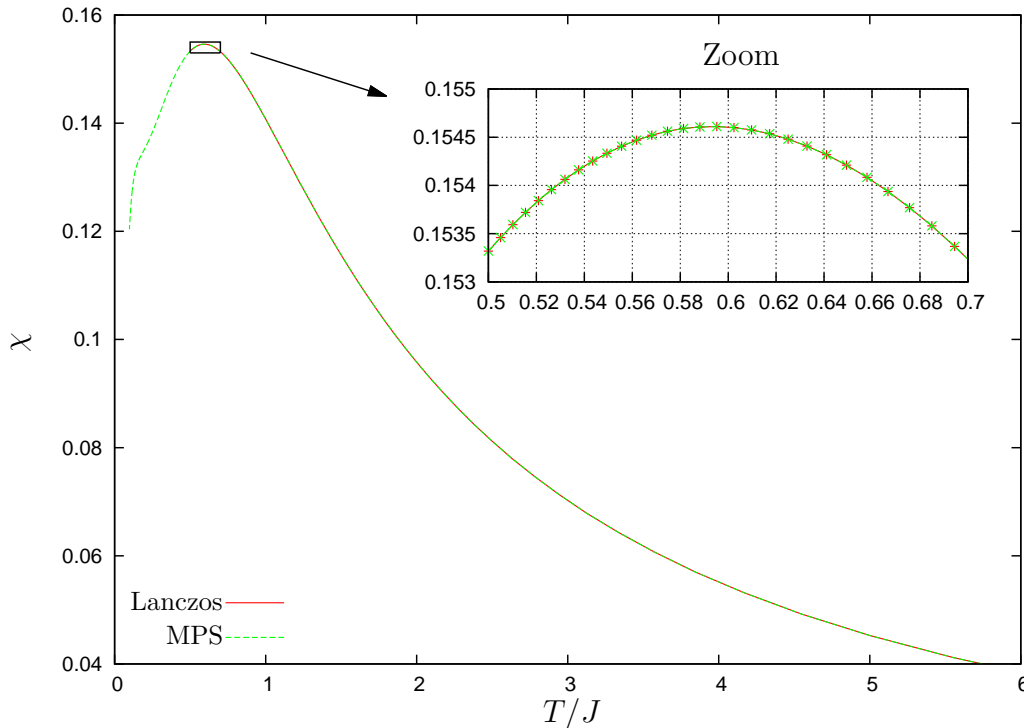


Abb. 7.3.: Magnetische Suszeptibilität einer Heisenberg-Kette mit 20 Plätzen. Vergleich der MPS-Ergebnisse mit den Daten von Alexander Tiegel (Lanczos-Zeitentwicklung): Es ist eine sehr gute Übereinstimmung sichtbar.

³Während der Imaginärzeitentwicklung wird die Temperatur von $T = 1/\beta = \infty$ in Schritten von $\Delta\beta = \text{const}$ gesenkt. Entsprechend müsste $\Delta\beta \rightarrow \infty$ oder unendlich viele Schritte berechnet werden, um $T \approx 0$ zu erreichen. Da die Schrittweite aber wegen des Trotter-Fehlers nicht beliebig groß gewählt werden darf, ist es aufwendig niedrige Temperaturen zu erreichen.

7.3. Spin-Korrelationsfunktion

Auf der linken Seite von Abb. 7.4 ist die Spin-Korrelationsfunktion $C_{zz}(L/2, t)$ (s. Gl. (5.8)) einer Heisenberg-Kette mit 40 Plätzen abgebildet. Auf der rechten Seite ist die Spin-Korrelationsfunktion $C_{zz}(0, t, 0, 0)$ aus [58] dargestellt, welche mittels der TMRG [59], einer Variante der DMRG für endliche Temperaturen, bestimmt wurde. Hierbei handelt es sich ebenfalls um eine Heisenberg-Kette, allerdings im thermodynamischen Limes.

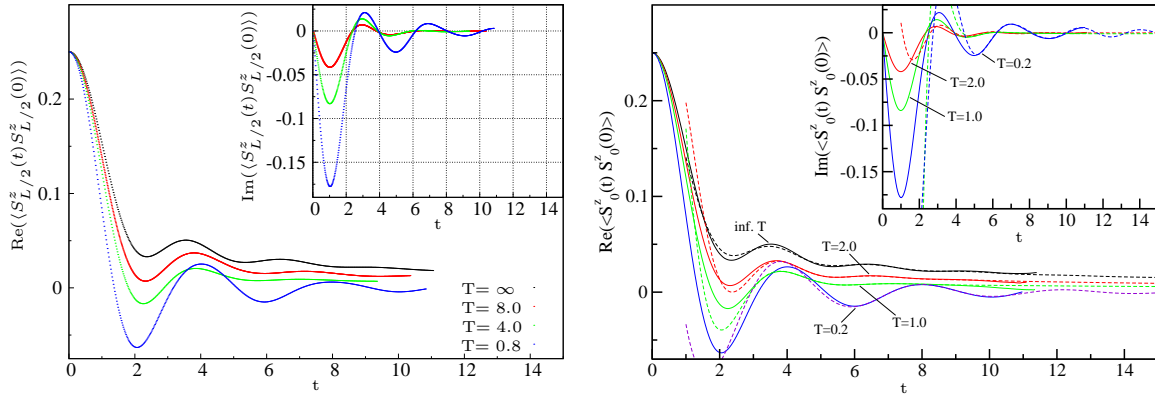


Abb. 7.4.: Vergleich von Spin-Korrelationsfunktionen einer Heisenberg-Kette mit 40 Plätzen und offenen Randbedingungen (links, eigene Rechnung) sowie im thermodynamischen Limes (rechts, aus: [58]).

Im Hauptdiagramm ist jeweils der Realteil und in der Einfügung rechts oben jeweils der Imaginärteil der Spin-Korrelationsfunktion dargestellt. Im Vergleich erkennt man, dass die Daten quantitativ übereinstimmen. Allerdings sind die Temperaturen um einen Faktor vier unterschiedlich. Dies ist vermutlich darauf zurückzuführen, dass für diese Arbeit die Spinoperatoren $\hat{S}^x = \frac{1}{2}\sigma_x$ anstelle der Paulimatrizen σ_i verwendet wurden, wodurch sich die Beschreibung der Temperatur verändert. Darüber hinaus ist eine kleine Abweichung des Verlaufs bei der Temperatur $T = 8$ zu sehen, deren Herkunft noch nicht eindeutig geklärt ist.

7.4. Spin-Strukturfaktor

Wie in Kap. 5.2 beschrieben, kann aus der Spin-Korrelationsfunktion mittels der Fourier-Transformation der Spin-Strukturfaktor bestimmt werden. Im Folgenden sind einige auf diesem Weg berechnete Spin-Strukturfaktoren präsentiert.

7. Ergebnisse

In Abb. 7.5 ist der Spin-Strukturfaktor einer Heisenberg-Kette mit 30 Plätzen und einem Magnetfeld $h^z = 1.0$ bei einer Temperatur $T = 1.0$ abgebildet. Auf der rechten Seite sind zum Vergleich Daten von Alexander Tiegel mit einer Verbreiterung von $\eta = 0.2$ zu sehen, die mittels einer Frequenzraummethode berechnet wurden. Darüber hinaus sind in beiden Diagrammen die Grenzen des Spin-Wellen-Kontinuums (s. Kap. 5.2) für $T = 0$ und $h^z = 1.0$ eingezeichnet. In dieser Gegenüberstellung fällt die geringe Intensitätsdif-

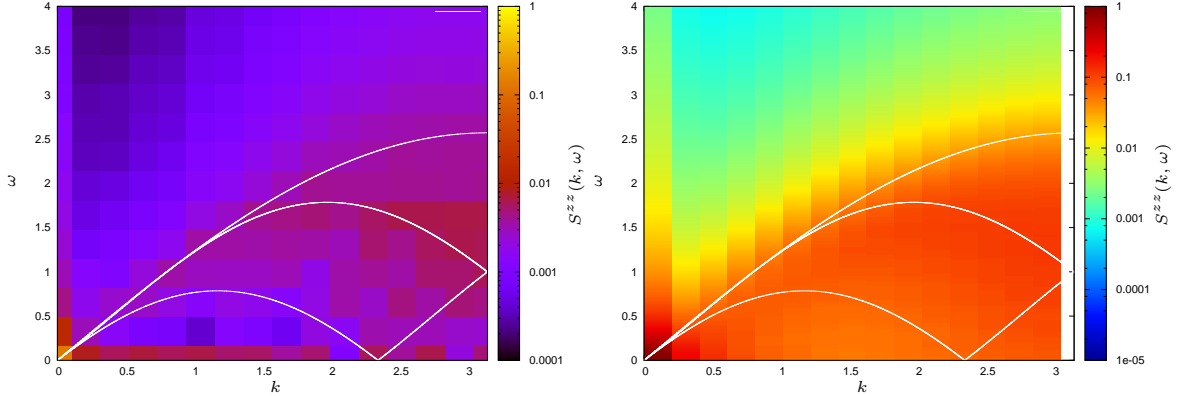


Abb. 7.5.: Spin-Strukturfaktor einer Heisenberg-Kette mit 30 Plätzen und einem Magnetfeld $h^z = 1.0$ bei einer Temperatur $T = 1.0$. Auf der rechten Seite sind Daten abgebildet, die mittels einer Frequenzraummethode von Alexander Tiegel berechnet wurden. Diese wurden mit einer Verbreiterung $\eta = 0.2$ versehen. In beiden Diagrammen sind die Grenzen des Spin-Wellen-Kontinuums (s. Kap. 5.2) für $T = 0$ eingezeichnet.

ferenz innerhalb der linken Darstellung auf. Dies kann an der zu geringen ω -Auflösung liegen. Außerdem ist im linken Bild im Bereich $k = \pi$ ein geringer Abfall der Intensität in den hohen Frequenzbereich (oberhalb der Grenze des Spin-Wellen-Kontinuums) zu sehen, welche durch die geringe Systemgröße und die nicht vorhandene zusätzliche Dämpfung zu erklären ist. Darüber hinaus wurde im rechten Diagramm anstelle der Fourier-Transformation eine Sinus-Transformation [8] durchgeführt, wodurch die Darstellung quantitative Unterschiede aufweisen kann und keine Werte für $k = \pi$ liefert.

Abb. 7.6 zeigt die Zeitentwicklung der Spin-Korrelationsfunktion (links) und den via Fourier-Transformation erhaltenen Spin-Strukturfaktor (rechts) einer Heisenberg-Kette mit 20 Plätzen bei einer Temperatur $T = 0.2$, zusammen mit den Grenzen des Spin-Wellen-Kontinuums (s. Kap. 5.2) bei $T = 0$. Zum Vergleich ist in Abb. 7.7 der Spin-Strukturfaktor mittels exakter Diagonalisierung mit einer Verbreiterung $\eta = 0.05$ von Andreas Honecker dargestellt. Die großen Blöcke auf der rechten Seite der Abb. 7.6 erklären sich dadurch, dass nur bis zu einer Zeit $t_{\max} = 20$ gerechnet wurde, weshalb die maximale ω -Auflösung $\Delta\omega = 2\pi/20 \approx 0.3$ beträgt (s. Kap. 5.2). Die Abstrahlung, ins-

7. Ergebnisse

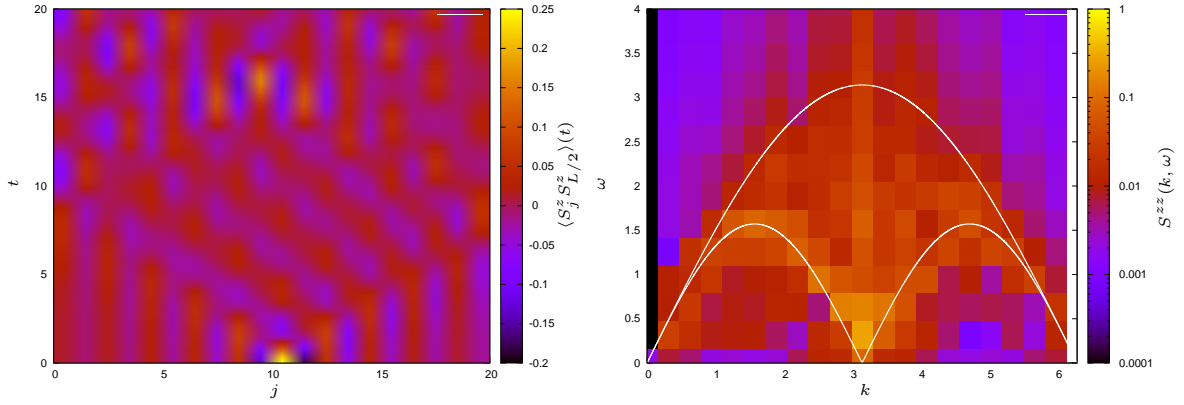


Abb. 7.6.: Zeitentwicklung der Spin-Korrelationsfunktion (links) und Spin-Strukturfaktor (rechts) für eine Heisenberg-Kette mit 20 Plätzen ohne Magnetfeld bei $T = 0.2$. Zusätzlich sind die Grenzen des Spin-Wellen-Kontinuums (s. Kap. 5.2) für $T = 0$ eingezeichnet. Da nicht genau in der Systemmitte gemessen wird, ist im linken Bild keine absolute Symmetrie um die Mitte zu sehen. Daraus resultiert die Asymmetrie im rechten Bild.

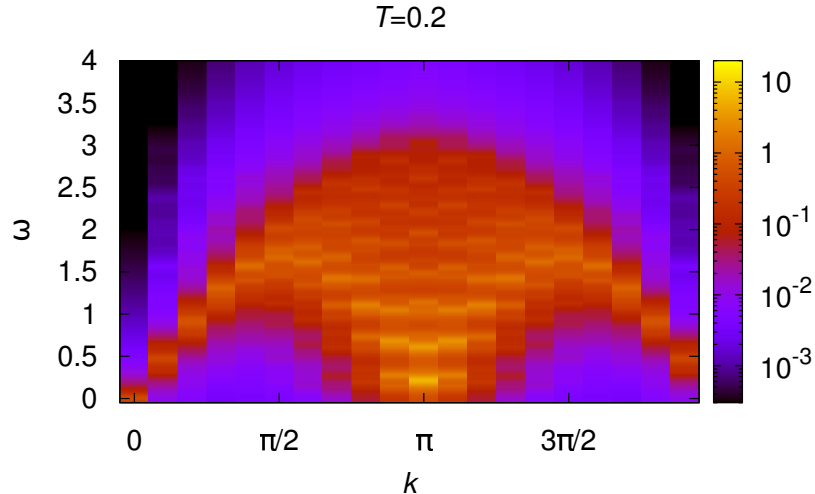


Abb. 7.7.: Vergleichsdaten des Spin-Strukturfaktors einer Heisenberg-Kette mit 20 Plätzen bei $T = 0.2$, erstellt mit exakter Diagonalisierung von Andreas Honecker.

besondere bei $k = \pi$ in hohen Frequenzen ω , sind wieder dem relativ kleinen System und den offenen Randbedingungen geschuldet, da die Spinwelle an den Rändern reflektiert wird und sich somit Interferenzen bilden. Die Asymmetrie des Spin-Strukturfaktors bzgl. der Achse $k = \pi$ ist durch die systembedingte Asymmetrie der Spin-Korrelationsfunktion und die geringe Systemgröße zu erklären. Abgesehen von der Asymmetrie und der etwas geringer ausfallenden Intensitätsdifferenz entspricht der ermittelte Spin-Strukturfaktor den Vergleichsdaten in Abb. 7.7.

Wird ein Magnetfeld h^z hinzugefügt, so verschiebt sich das Spin-Wellen-Kontinuum wie in Kap. 5.2 beschrieben. Dies ist in Abb. 7.8 für $h^z = 1.0$ (oben) und $h^z = 2.0$ (un-

7. Ergebnisse

ten) dargestellt. Betrachtet man diese Punkte in der Magnetisierungskurve 7.1 (links), so sieht man das die Magnetisierung bei $h^z = 1.0$ noch fast im linearen Bereich ist⁴, während sie bei $h^z = 2.0$ beinahe saturiert ist. Dies lässt sich auch in Abb. 7.8 (unten rechts) erkennen, da die Spin-Wellen-Kontinua zusammenfallen. Im Bereich höherer Magnetfelder, die hier nicht dargestellt sind, ist keine Struktur mehr sichtbar.

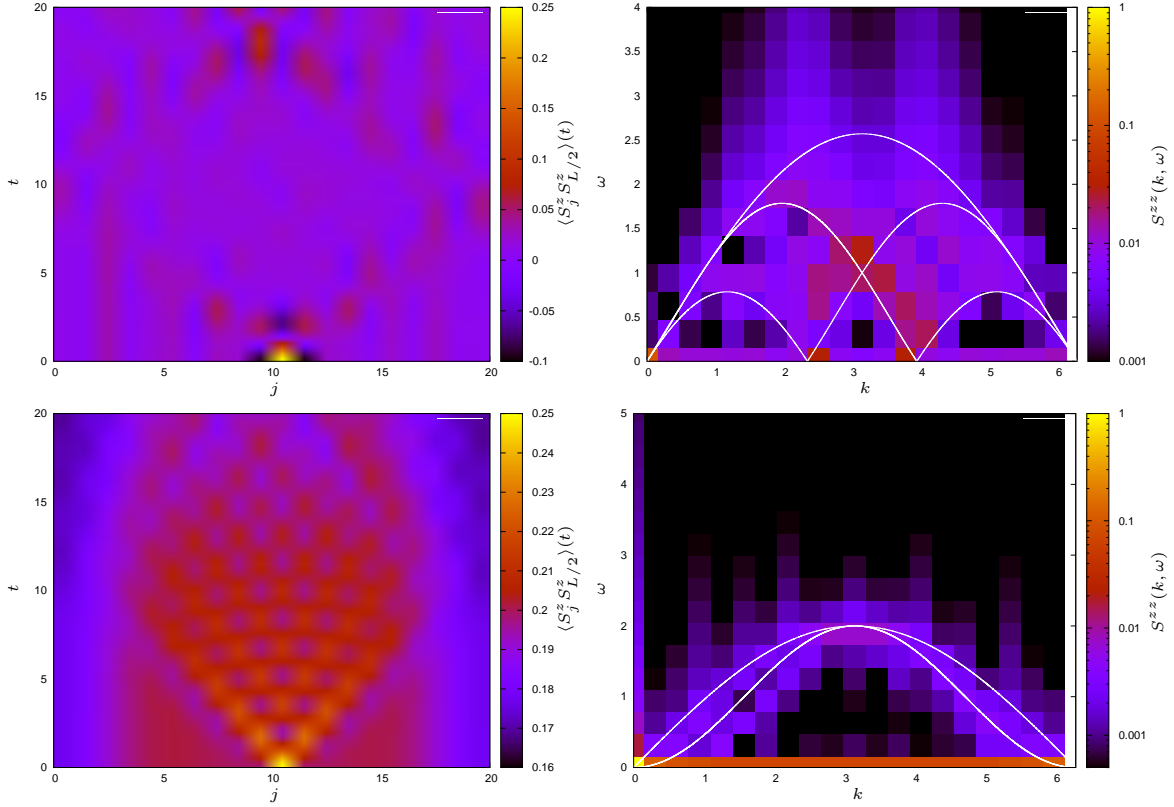


Abb. 7.8.: Zeitentwicklung der Spin-Korrelationsfunktion (links) und Spin-Strukturfaktor (rechts) für eine Heisenberg-Kette mit 20 Plätzen und Magnetfeld $h^z = 1.0$ (oben) bzw. $h^z = 2.0$ (unten) bei $T = 0.2$. Zusätzlich sind die Grenzen des Spin-Wellen-Kontinuums (s. Kap. 5.2) für $T = 0$ eingezeichnet.

7.4.1. Alternierendes Feld h^x

Möchte man eine DM-WW hinzufügen, so kann dies in einer Dimension über ein alternierendes Feld in x -Richtung realisiert werden (s. Kap. 2.2). Wie in Kap. 7.1 gezeigt, verändern sich die Magnetisierungskurven für endliche Temperaturen durch ein alternierendes Magnetfeld h^x nicht sehr stark. An dieser Stelle soll daher der Spin-Strukturfaktor

⁴Hierzu müssen die Stufen, die durch die endliche Größe des Systems entstehen, vernachlässigt werden.

einer Heisenberg-Kette mit DM-WW betrachtet werden. In den Abb. 7.9 sind die Spin-Korrelationsfunktion (links) und die mittels Fourier-Transformation bestimmten Spin-Strukturfaktoren (rechts) einer Kette mit 20 Plätzen und drei unterschiedlichen Magnetfeldstärken $h^z = 1.0, 2.0, 2.5$ und $h_i^x = (-1)^i \cdot 0.083h^z$ bei einer Temperatur $T = 0.2$ abgebildet. Für $h^z < 2.5$ wurden erneut die Grenzen des Spin-Wellen-Kontinuums (s. Kap. 5.2) eingezeichnet. Für $h^z > 1$ wurde darüber hinaus das Kosinusband [23] mit der Dispersionsrelation $E(k) = \cos(k) + h^z - 1$ eingezeichnet. Zunächst fällt auf, dass der Spin-Strukturfaktor für $h^z = 1.0$ in Abb. 7.9 sehr stark dem in Abb. 7.8 ähnelt. Dies lässt sich erneut mit der geringen Stärke des Magnetfeldes h^x erklären, da es im Fall endlicher Temperaturen in der thermischen Fluktuation untergeht. Im Fall der nahezu vollständigen Magnetisierung ($h^z = 2.0$) sieht man in Abb. 7.9 im Vergleich zu Abb. 7.8 den Übergang zwischen dem Spin-Wellen-Kontinuum und einem Kosinusband. Bei stärkeren Magnetfeldern ist dieses Kosinusband ausgeprägter und öffnet bei $k = \pi$ eine Lücke der Größe $h^z - 2$. Dies ist in Abb. 7.9 im Bild rechts unten dargestellt.

In Abb. 7.10 ist der Spin-Strukturfaktor einer Heisenberg-Kette mit zehn Plätzen und Magnetfeldern $h^z = 2.0, h_i^x = (-1)^i \cdot 0.083h^z$ bei $T = 0$ mittels Lanczos-Rechnung von Alexander Tiegel dargestellt. Anstatt allerdings die Grenzen des Spin-Wellen-Kontinuums für $h^z = 2.0$ einzuzichnen, wurden sie für $h^z = 1.948$ eingezeichnet. Dies entspricht der Magnetfeldstärke, bei der die Magnetisierung der Heisenberg-Kette mit Magnetfeld h^z den Wert der Magnetisierung der Heisenberg-Kette mit den Magnetfeld h^z und h^x annimmt. Es scheint also, als ob das zusätzliche Magnetfeld h^x bei $T = 0$ deutliche Auswirkungen auf die Sättigungsfeldstärke des Systems hat.

7.4.2. Detailanalyse $k = \pi$

Um die Auswirkung der bereits angesprochenen Asymmetrie der Spin-Korrelationsfunktion auf den Spin-Strukturfaktor zu untersuchen, werden in diesem Kapitel die Spin-Korrelationsfunktionen $C(i, t, L/2, 0)$ rechts von der Mitte und $C(i, t, L/2 - 1, 0)$ links von der Mitte des Systems ausgewertet.

Die Spin-Strukturfaktoren einer Heisenberg-Kette mit 20 Plätzen bei $T = \infty$, die mittels einer Berechnung mit der Schrittweite $\Delta t = 0.1$ bestimmt wurden, sind in Abb. 7.11 zusammen mit dem Spin-Strukturfaktor mit einer Schrittweite $\Delta t = 0.02$ abgebildet. Beide

⁵Da eine kontinuierliche Folge von Bildern an dieser Stelle schwierig ist, sei auf eine animierte Version verwiesen: http://www.theorie.physik.uni-goettingen.de/~thomas.koehler/ma_thesis

7. Ergebnisse

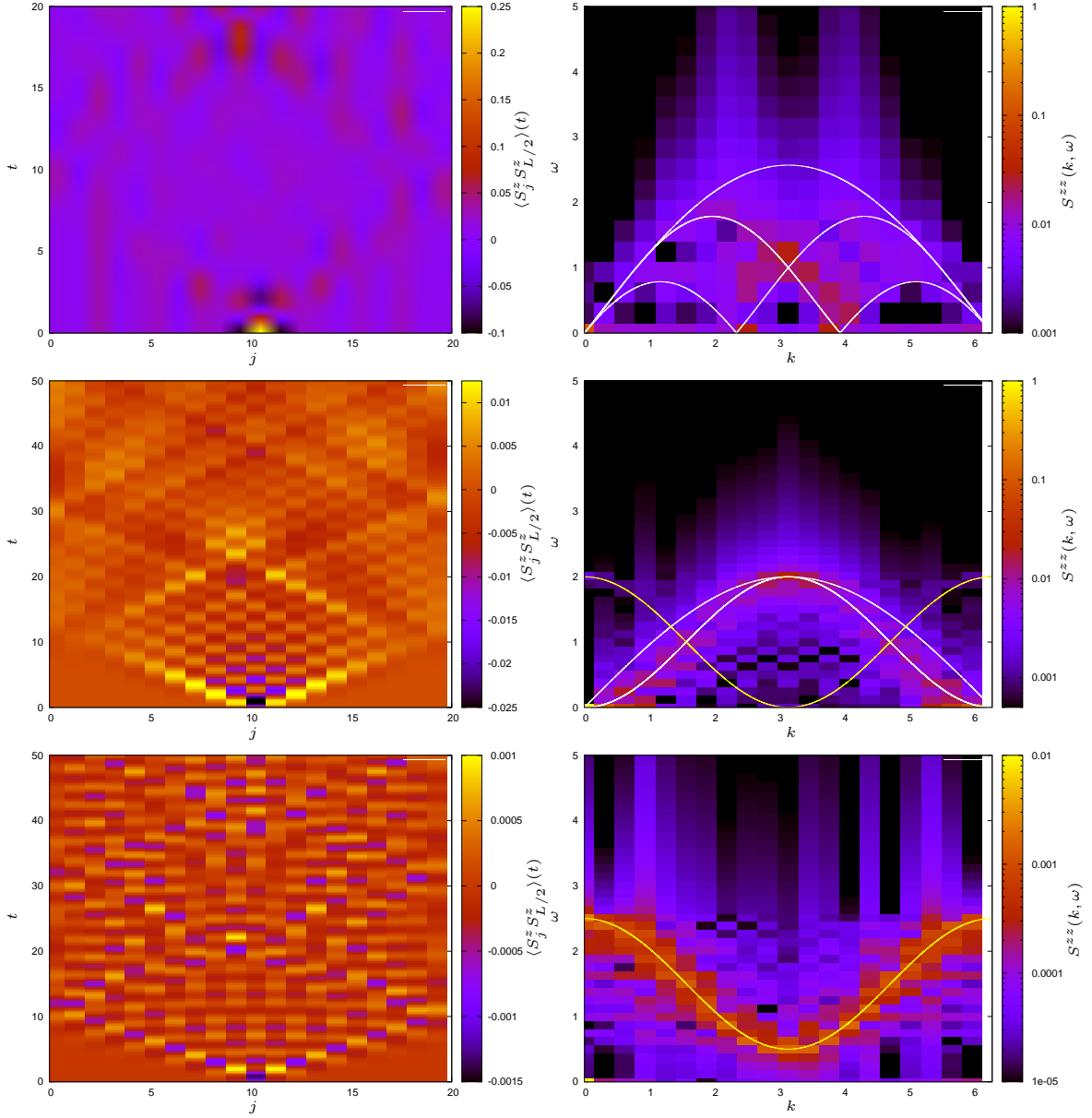


Abb. 7.9.: Zeitentwicklung der Spin-Korrelationsfunktion (links) und Spin-Strukturfaktor (rechts) für eine Heisenberg-Kette mit 20 Plätzen und Magnetfeldern $h^z = 1.0, 2.0, 2.5$ (von oben nach unten) und $h_i^x = (-1)^i \cdot 0.083h^z$ bei $T = 0.2$. Die Grenzen des Spin-Wellen-Kontinuums sind identisch zu Abb. 7.8. Darüber hinaus ist das Kosinusband mit der Dispersionsrelation $E(k) = \cos(k) + h^z - 1$ eingezeichnet.⁵ Keine der hier gezeigten Rechnungen hat bei einem vernachlässigten Gewicht von $\epsilon = 10^{-6}$ größere Matrixdimensionen als $\chi = 500$ benötigt. Entsprechend war es möglich diese innerhalb von ca. zwei Tagen durchzuführen.

Spin-Strukturfaktoren wurden mit der Kettenlänge L multipliziert. Es ist zu erkennen, dass sich die Spin-Strukturfaktoren in weiten Teilen entsprechen. Die Spin-Strukturfak-

7. Ergebnisse

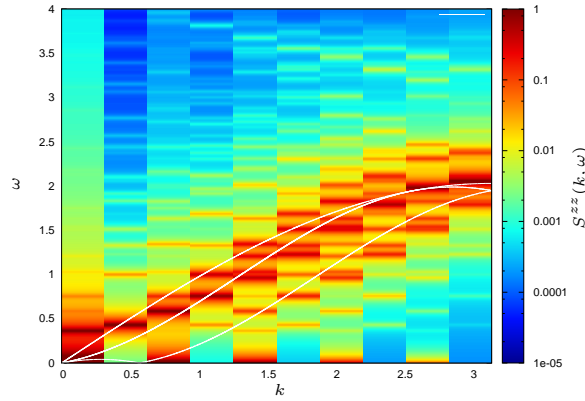


Abb. 7.10.: Spin-Strukturfaktor einer Heisenberg-Kette mit zehn Plätzen und Magnetfeldern $h^z = 2.0, h_i^x = (-1)^i \cdot 0.083h^z$ bei $T = 0$. Die Abbildung wurde mit Daten einer Frequenzraummethode von Alexander Tiegel berechnet und mit einer Verbreiterung von $\eta = 0.02$ versehen. Außerdem sind die Grenzen des Spin-Wellen-Kontinuums für $h^z = 1.948$ eingezeichnet.

toren links bzw. rechts von der Mitte unterscheiden sich lediglich im Bereich kleiner Frequenzen. Dies liegt wahrscheinlich daran, dass die Berechnungen bei unterschiedlichen Zeiten abgebrochen werden mussten. Darüber hinaus ist in diesem Diagramm die Beziehung zwischen den Zeitschritten und den maximalen abbildbaren Frequenzen gut dargestellt (s. Kap. 5.2).

In Abb. 7.12 sind erneut die Spin-Strukturfaktoren einer Heisenberg-Kette bei $T = \infty$, die mittels der Spin-Korrelationsfunktionen links bzw. rechts von der Mitte ermittelt wurden, abgebildet. In dieser Abbildung sind die Spin-Strukturfaktoren für verschiedene Kettenlängen $L = 12, 16, 20$ dargestellt und mit der Kettenlänge L skaliert, um die Daten vergleichen zu können. Ebenso wie in Abb. 7.11 sind auch hier hauptsächlich im Bereich kleiner Frequenzen ω große Unterschiede zu sehen, die durch unterschiedlich große Zeiten und entsprechend durch unterschiedliche ω -Punkte zu erklären sind. Darüber hinaus kann die starke Fluktuation im Bereich kleiner Frequenzen damit erklärt werden, dass diese eine deutlich längere Wellenlänge haben und somit stärker von der endlichen Systemgröße betroffen sind.

7.4.3. Spin-1

Eindimensionale Heisenberg-Ketten mit Spin $S = 1$ werden auch Haldane-Ketten genannt [42], da sie die einfachsten Systeme mit einer Haldane-Phase [24] sind.

Die Abb. 7.13 zeigt auf der linken Seite die Zeitentwicklung der Spin-Korrelationsfunktion und auf der rechten Seite den Spin-Strukturfaktor einer Spin-1 Heisenberg-Kette

7. Ergebnisse

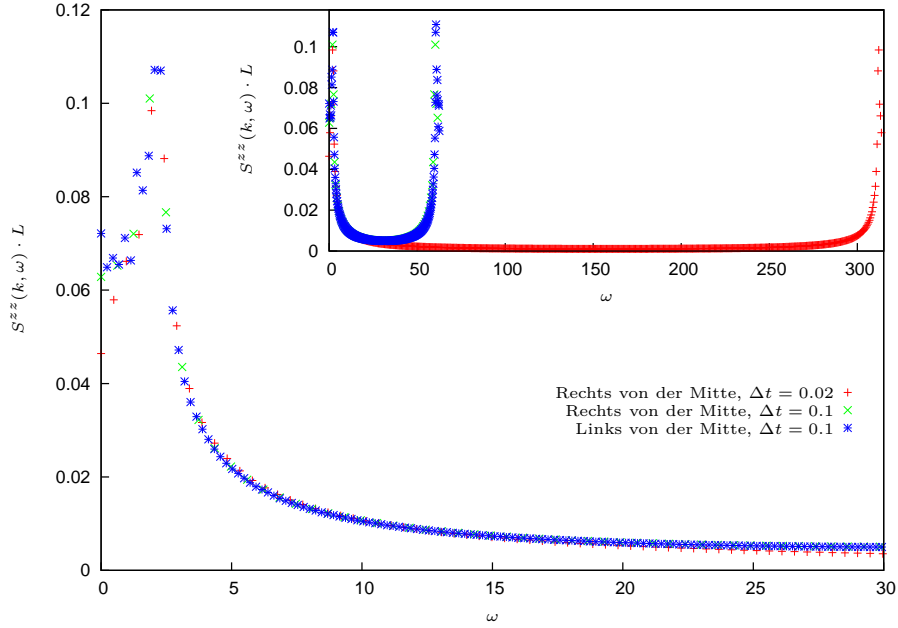


Abb. 7.11.: Vergleich zwischen drei Spin-Strukturfaktoren einer Heisenberg-Kette bei unendlicher Temperatur. Berechnet aus den Spin-Korrelationsfunktionen: $C(i, t, L/2, 0)$ (rechts von der Mitte) mit Zeitschrittweiten von $\Delta t = 0.02$ und $C(i, t, L/2 - 1, 0)$ (links von der Mitte) und $C(i, t, L/2, 0)$ (rechts von der Mitte) mit Zeitschritten von $\Delta t = 0.1$. Die Beziehung zwischen der Größe der Zeitschritte und der maximalen Frequenz (s. Kap. 5.2) ist gut zu erkennen.

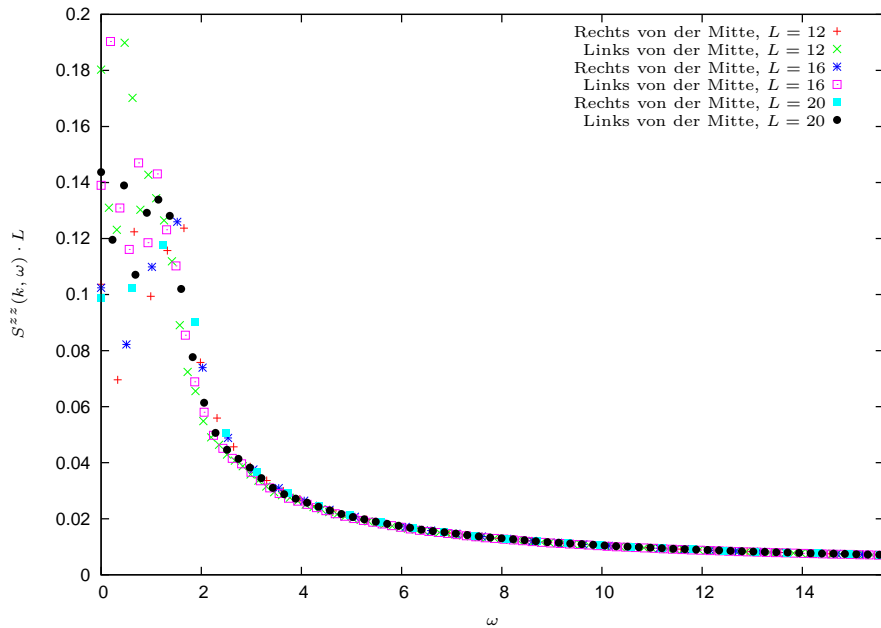


Abb. 7.12.: Vergleich zwischen Spin-Strukturen unterschiedlicher Kettenlängen $L = 12, 16, 20$ einer Heisenberg-Kette bei unendlicher Temperatur, jeweils rechts und links von der Mitte des Systems. Die Größe der Zeitschritte beträgt jeweils $\Delta t = 0.1$, wobei jeweils ein unterschiedliches t_{\max} vorliegt. Ab $\omega = 3$ ist durch die Skalierung mit der Kettenlänge eine gute Vergleichbarkeit gegeben. Im Bereich kleiner Frequenzen entstehen zum Teil große Abweichungen.

7. Ergebnisse

mit 20 Plätzen bei unendlicher Temperatur, wobei das vernachlässigte Gewicht $\epsilon = 10^{-4}$ beträgt und keine maximale Matrixdimension χ vorgegeben wurde. Zum Vergleich ist

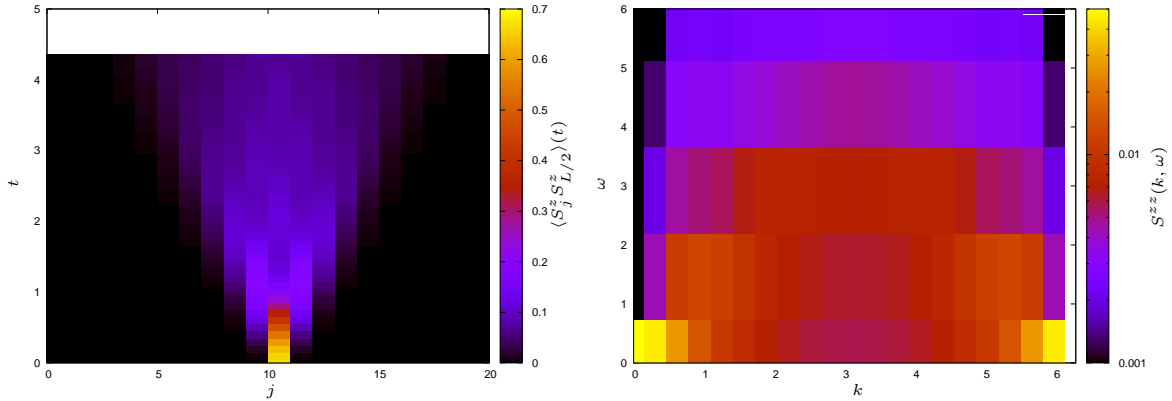


Abb. 7.13.: Zeitentwicklung der Spin-Korrelationsfunktion (links) und Spin-Strukturfaktor (rechts) für eine Spin-1 Heisenberg-Kette mit 20 Plätzen bei $T = \infty$. Durch eine sehr geringe erreichte Zeit t_{\max} ist eine geringe Auflösung und Intensitätsdifferenz zu sehen. Dafür ist aber keine Asymmetrie im Spin-Strukturfaktor zu erkennen.

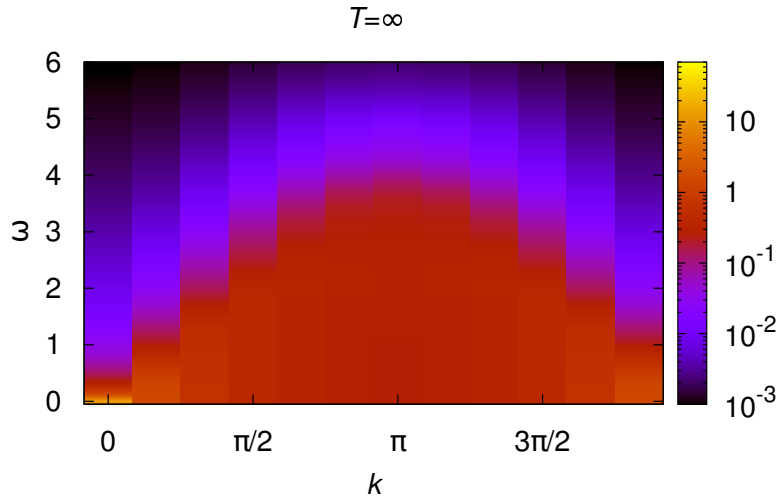


Abb. 7.14.: Vergleichsdaten des Spin-Strukturfaktors einer Spin-1 Heisenberg-Kette mit zwölf Plätzen bei $T = \infty$, erstellt mit exakter Diagonalisierung von Andreas Honecker.

in Abb. 7.14 der Spin-Strukturfaktor mittels exakter Diagonalisierung mit einer Verbreiterung $\eta = 0.05$ von Andreas Honecker dargestellt. Da die bisher erreichte Zeit t_{\max} sehr klein ist und daher die Spinwelle nicht an den offenen Rändern reflektiert wurde, wirkt sich die Asymmetrie im Ortsraum nicht auf die Symmetrie im k -Raum aus. Andererseits ist aus diesem Grund die ω -Auflösung und die Intensitätsdifferenz des Spin-Strukturfaktors sehr gering. Im Vergleich mit Abb. 7.14 kann man von einer guten Übereinstimmung

7. Ergebnisse

sprechen, wenn man die Intensitätsdifferenz, die mehrere Größenordnungen überdeckt, vernachlässigt. Zwar ist eine erhöhte Intensität für $\omega \approx 5$ in Abb. 7.13 zu sehen, diese ist allerdings wahrscheinlich durch die geringe Auflösung bedingt.

Abbildung 7.15 entspricht Abb. 7.13, allerdings mit endlicher Temperatur ($T = 0.5$) und einer deutlich größeren maximal erreichte Zeit t_{\max} . Diese konnte durch die Begrenzung der maximalen Matrixdimension $\chi = 350$ erreicht werden. Die Anzahl der Zustände pro Platz d wirkt sich mehrfach auf die bei der Kompression verwendeten Matrixdimensionen aus. Zum einen wachsen die Dimensionen der Matrizen vom Rand zur Mitte mit Potenzen von d , zum anderen werden d Matrizen pro Platz benötigt. Zum Vergleich ist

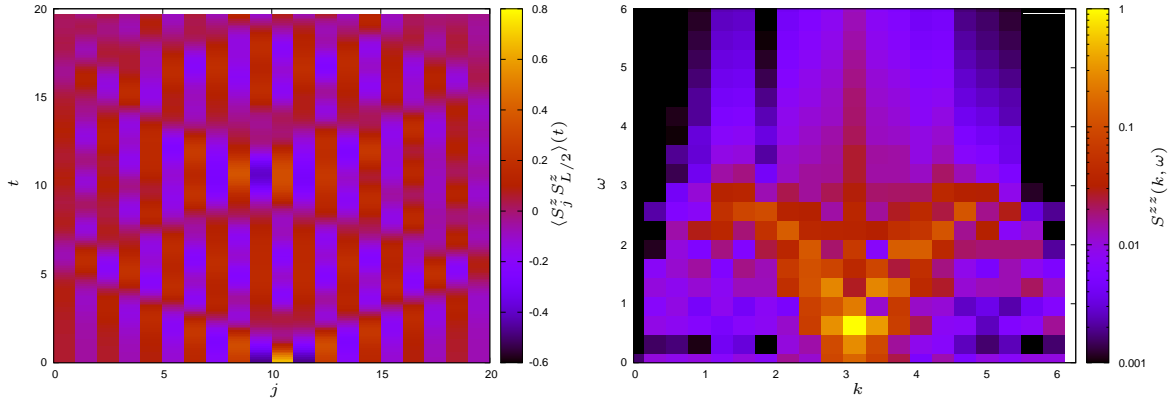


Abb. 7.15.: Zeitentwicklung der Spin-Korrelationsfunktion (links) und Spin-Strukturfaktor (rechts) für eine Spin-1 Heisenberg-Kette mit 20 Plätzen bei $T = 0.5$. Aufgrund der Reflexionen an den Rändern (links) ist der Spin-Strukturfaktor asymmetrisch.

in Abb. 7.16 erneut der entsprechende Spin-Strukturfaktor mittels exakter Diagonalisierung mit einer Verbreiterung $\eta = 0.05$ von Andreas Honecker dargestellt. Auf der linken Seite der Abb. 7.15 sieht man, wie die Spinwellen mehrfach an den Rändern des Systems reflektiert werden und sich bei $t \approx 10$ vorübergehend überlagern. Entsprechend ist der Spin-Strukturfaktor asymmetrisch (rechts). Im Vergleich zu Abb. 7.13 ist die Intensitätsdifferenz deutlich gestiegen, allerdings wird die Intensitätsdifferenz aus Abb. 7.16 nicht erreicht. Darüber hinaus sind in Abb. 7.16 deutliche Strukturen im Bereich $\omega \approx 4$, welche in Abb. 7.15 nicht erkennbar sind. Dies liegt vermutlich wiederum an einer zu geringen ω -Auflösung. Gegebenenfalls ist dies aber auch auf ein zu großes vernachlässigtes Gewicht während der Imaginär- bzw. Realzeitentwicklung zurückzuführen oder es handelt sich um finite-size Effekte. Die erwartete Struktur des Spin-Wellen-Kontinuums ist allerdings zu erkennen.

7. Ergebnisse

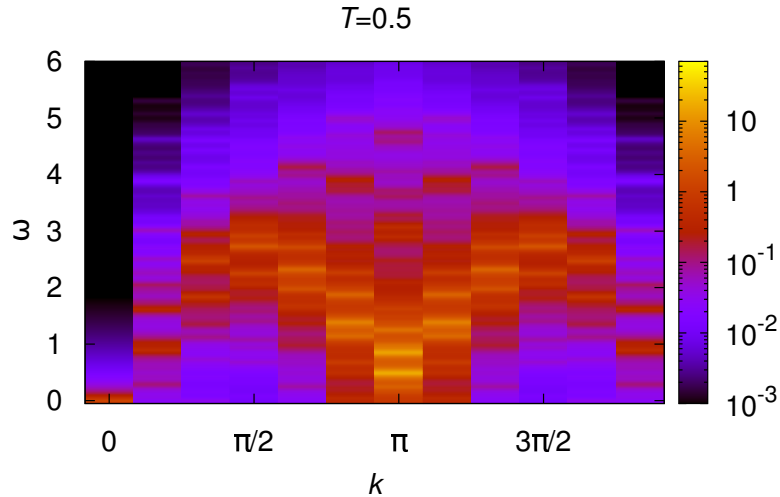


Abb. 7.16.: Vergleichsdaten des Spin-Strukturfaktors einer Spin-1 Heisenberg-Kette mit zwölf Plätzen bei $T = 0.5$, erstellt mit exakter Diagonalisierung von Andreas Honecker.

7.4.4. Spin-2

In Abb. 7.17 ist die Spin-Korrelationsfunktion und der Spin-Strukturfaktor einer Spin-2 Heisenberg-Kette mit acht Plätzen bei unendlicher Temperatur dargestellt. Bei dieser Berechnung wurde die maximale Matrixdimension $\chi_{\max} = 300$ festgelegt, da nur auf diesem Weg ausreichend lange Zeiten erreicht werden konnten. Zum Vergleich ist in

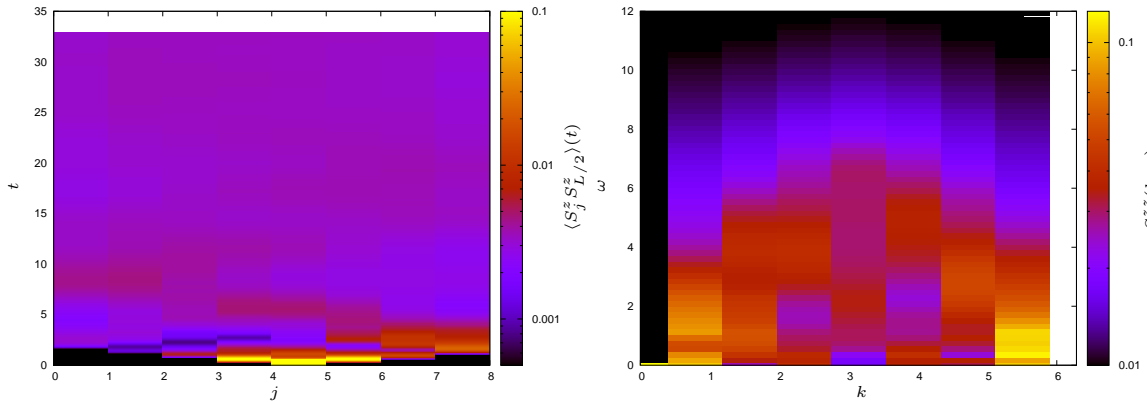


Abb. 7.17.: Zeitentwicklung der Spin-Korrelationsfunktion (links) und Spin-Strukturfaktor (rechts) für eine Spin-2 Heisenberg-Kette mit 8 Plätzen bei $T = \infty$. Aufgrund der häufigen Reflexionen an den Rändern (links) ist der Spin-Strukturfaktor asymmetrisch und besitzt eine geringe Intensitätsdifferenz.

Abb. 7.18 wiederum der Spin-Strukturfaktor mittels exakter Diagonalisierung mit einer Verbreiterung $\eta = 0.05$ von Andreas Honecker dargestellt. Erneut ist die Reflexion an den Rändern der Kette in der Darstellung der Spin-Korrelationsfunktion gut zu er-

7. Ergebnisse

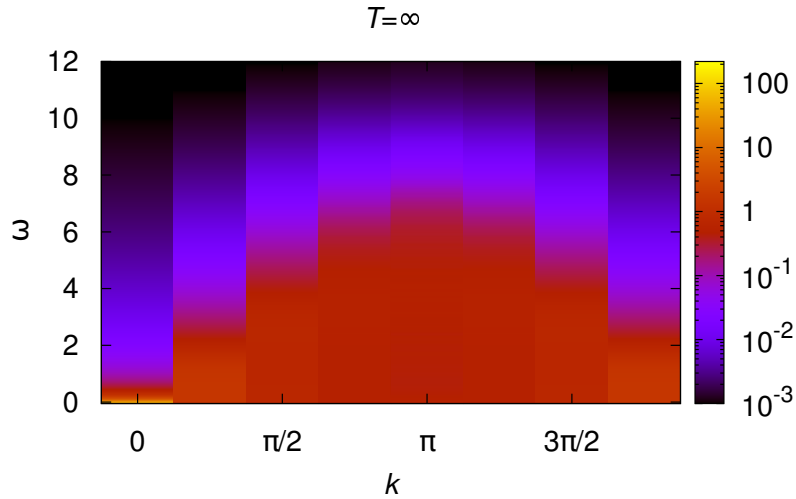


Abb. 7.18.: Vergleichsdaten des Spin-Strukturfaktors einer Spin-2 Heisenberg-Kette mit acht Plätzen bei $T = \infty$, erstellt mit exakter Diagonalisierung von Andreas Honecker.

kennen. Entsprechend ist die Symmetrie des Spin-Strukturfaktors nicht gegeben und die Intensitätsdifferenz sehr gering. Wie auch schon im Fall der Spin-1 Heisenberg-Kette entsprechen sich die Spin-Strukturfaktoren in Abb. 7.17 und 7.18 qualitativ, unterscheiden sich aber quantitativ stark.

8. Zusammenfassung und Ausblick

In dieser Arbeit wurde der Spin-Strukturfaktor eindimensionaler Heisenberg-Ketten mit Spin $S = \frac{1}{2}, 1$ und 2 betrachtet. Hierbei wurden für den Fall $S = \frac{1}{2}$ auch Ergebnisse von Systemen präsentiert, die ein gestagertes Feld beinhalten, um eine DM-WW darzustellen (s. Kap. 2.2). Darüber hinaus wurden Magnetisierungskurven und der Verlauf der magnetische Suszeptibilität der eindimensionalen Heisenberg-Kette bei niedrigen Temperaturen behandelt. Um diese Ergebnisse zu erhalten, wurden die in Kap. 3 und 4 beschriebenen Methoden implementiert (vgl. Kap. 6). Es steht somit ein Programm zur Verfügung, um weitere Fragestellungen zu behandeln. In erster Linie wurden bereits bekannte Ergebnisse reproduziert, um zu zeigen das die Implementation erfolgreich war. Darüber hinaus konnten Einblicke in die Spin-Struktur unterschiedlich modellierter Materialien gewonnen werden.

Wie an den Ergebnissen in Kap. 7.4 zu erkennen ist, muss bei der Zeitentwicklung darauf geachtet werden, dass die Spinwellen nicht an den Rändern reflektieren, da sonst starke finite-size-Effekte auftreten. Andererseits darf die Zeitentwicklung aber auch nicht zu früh abgebrochen werden, da man sonst nicht die gewünschte ω -Auflösung erhält. Entsprechend muss das System ausreichend groß gewählt werden, was sich wiederum im Ressourcenverbrauch widerspiegelt.

Die in dieser Arbeit vorgestellten Ergebnisse stellen ausschließlich den Fall der Heisenberg-Kette dar, obwohl ein Hamiltonoperator implementiert wurde, der mehr Variation erlaubt (s. Gl. (2.2) und (2.3)). Insbesondere die bereits implementierte XXZ-Kette (s. Kap. 2.2) wurde bisher nicht untersucht. Dies ist damit begründet, dass zunächst ein Referenzmodell und anschließend symmetriebrechende Systeme betrachtet wurden. Auch die Möglichkeit, Spin-Ketten mit Spins größer $\frac{1}{2}$ zu simulieren, wurde bisher nur oberflächlich und ebenfalls nur im Heisenberg-Modell ausgenutzt.

Da in dieser Arbeit die Schwerpunkte auf den magnetischen Eigenschaften und den Spin-Strukturfaktoren lagen, wurde lediglich die magnetische Suszeptibilität als ein Beispiel

8. Zusammenfassung und Ausblick

für thermodynamische Größen präsentiert.

Aufgrund des großen Optimierungspotentials ist die Entwicklung der Simulationssoftware noch nicht abgeschlossen. So wäre der nächste Schritt die Ausnutzung von Symmetrien (insbesondere die $SU(2)$ -Symmetrie des Heisenberg-Modells), welcher aber über den zeitlichen Rahmen der Masterarbeit hinausgegangen wäre. Auch die bereits angesprochene Verwendung der SciPal und die damit einhergehende Möglichkeit, Grafik-Prozessoren zu nutzen, sind längerfristige Ziele. Das Aufteilen der Zeitentwicklung für die Messung von Korrelationsfunktionen, wie in [34] beschrieben, stellt eine Optimierungsmöglichkeit dar, die ggf. kurzfristig implementiert werden könnte. Da dies allerdings nur dann hilfreich ist, wenn man ausschließlich Korrelationsfunktionen berechnen möchte, wurde bisher von der Umsetzung abgesehen. Darüber hinaus stellt der bestehende Code eine gute Basis für die Implementation neuer Entwicklungen wie z. B. der Verwendung von „minimally entangled typical thermal states“ (METTS) [61, 72] als Alternative zur hier vorgestellten Imaginärzeitentwicklung dar.

A. Vierte Ordnung Trotter-Zerlegung

In diesem Anhang soll die Reduzierung der 15 Trotter-Teilschritte der Suzuki-Trotter-Zerlegung vierter Ordnung auf elf Teilschritte hergeleitet werden. Hierzu sei zunächst die Trotter-Zerlegung nach [56] angegeben:

$$e^{-i\hat{H}\Delta t} = \hat{U}(\Delta t_1)\hat{U}(\Delta t_2)\hat{U}(\Delta t_3)\hat{U}(\Delta t_2)\hat{U}(\Delta t_1) + \mathcal{O}(\Delta t^5)$$

mit $\hat{U}(\Delta t_i) = e^{-i\hat{H}_{\text{ungerade}}\Delta t_i/2}e^{-i\hat{H}_{\text{gerade}}\Delta t_i/2}e^{-i\hat{H}_{\text{ungerade}}\Delta t_i/2}$, wobei $\Delta t_1 = \Delta t_2 = \frac{\Delta t}{4-4^{1/3}}$ und $\Delta t_3 = \Delta t - 4\Delta t_1$ ist. Der Übersichtlichkeit halber werden im Folgenden die englischen Übersetzungen für gerade (even) und ungerade (odd) verwendet. Durch Einsetzen erhält man:

$$\begin{aligned} e^{-i\hat{H}\Delta t} &= \hat{U}(\Delta t_1)\hat{U}(\Delta t_2)\hat{U}(\Delta t_3)\hat{U}(\Delta t_2)\hat{U}(\Delta t_1) + \mathcal{O}(\Delta t^5) \\ &= e^{-i\hat{H}_{\text{odd}}\frac{\Delta t_1}{2}} e^{-i\hat{H}_{\text{even}}\Delta t_1} e^{-i\hat{H}_{\text{odd}}\frac{\Delta t_1}{2}} \cdot \\ &\quad e^{-i\hat{H}_{\text{odd}}\frac{\Delta t_2}{2}} e^{-i\hat{H}_{\text{even}}\Delta t_2} e^{-i\hat{H}_{\text{odd}}\frac{\Delta t_2}{2}} \cdot \\ &\quad e^{-i\hat{H}_{\text{odd}}\frac{\Delta t_3}{2}} e^{-i\hat{H}_{\text{even}}\Delta t_3} e^{-i\hat{H}_{\text{odd}}\frac{\Delta t_3}{2}} \cdot \\ &\quad e^{-i\hat{H}_{\text{odd}}\frac{\Delta t_2}{2}} e^{-i\hat{H}_{\text{even}}\Delta t_2} e^{-i\hat{H}_{\text{odd}}\frac{\Delta t_2}{2}} \cdot \\ &\quad e^{-i\hat{H}_{\text{odd}}\frac{\Delta t_1}{2}} e^{-i\hat{H}_{\text{even}}\Delta t_1} e^{-i\hat{H}_{\text{odd}}\frac{\Delta t_1}{2}} + \mathcal{O}(\Delta t^5) \\ &= e^{-i\hat{H}_{\text{odd}}\frac{\frac{1}{4-4^{1/3}}\Delta t}{2}} e^{-i\hat{H}_{\text{even}}\frac{1}{4-4^{1/3}}\Delta t} e^{-i\hat{H}_{\text{odd}}\frac{\frac{1}{4-4^{1/3}}\Delta t}{2}} \cdot \\ &\quad e^{-i\hat{H}_{\text{odd}}\frac{\frac{1}{4-4^{1/3}}\Delta t}{2}} e^{-i\hat{H}_{\text{even}}\frac{1}{4-4^{1/3}}\Delta t} e^{-i\hat{H}_{\text{odd}}\frac{\frac{1}{4-4^{1/3}}\Delta t}{2}} \cdot \\ &\quad e^{-i\hat{H}_{\text{odd}}\frac{\frac{\Delta t-2\frac{1}{4-4^{1/3}}\Delta t-2\frac{1}{4-4^{1/3}}\Delta t}{2}}}{2}} e^{-i\hat{H}_{\text{even}}\left(\frac{\Delta t-2\frac{1}{4-4^{1/3}}\Delta t-2\frac{1}{4-4^{1/3}}\Delta t}{4-4^{1/3}}\right)} e^{-i\hat{H}_{\text{odd}}\frac{\frac{\Delta t-2\frac{1}{4-4^{1/3}}\Delta t-2\frac{1}{4-4^{1/3}}\Delta t}{2}}}{2}} \cdot \\ &\quad e^{-i\hat{H}_{\text{odd}}\frac{\frac{1}{4-4^{1/3}}\Delta t}{2}} e^{-i\hat{H}_{\text{even}}\frac{1}{4-4^{1/3}}\Delta t} e^{-i\hat{H}_{\text{odd}}\frac{\frac{1}{4-4^{1/3}}\Delta t}{2}} \cdot \\ &\quad e^{-i\hat{H}_{\text{odd}}\frac{\frac{1}{4-4^{1/3}}\Delta t}{2}} e^{-i\hat{H}_{\text{even}}\frac{1}{4-4^{1/3}}\Delta t} e^{-i\hat{H}_{\text{odd}}\frac{\frac{1}{4-4^{1/3}}\Delta t}{2}} + \mathcal{O}(\Delta t^5). \end{aligned}$$

A. Vierte Ordnung Trotter-Zerlegung

Im Folgenden sei $A = 4 - 4^{\frac{1}{3}}$:

$$\begin{aligned}
 e^{-i\hat{H}\Delta t} &= e^{-i\hat{H}_{\text{odd}}\frac{\frac{1}{2}\Delta t}{A}} e^{-i\hat{H}_{\text{even}}\frac{1}{A}\Delta t} e^{-i\hat{H}_{\text{odd}}\frac{\frac{1}{2}\Delta t}{A}} . \\
 &e^{-i\hat{H}_{\text{odd}}\frac{\frac{1}{2}\Delta t}{A}} e^{-i\hat{H}_{\text{even}}\frac{1}{A}\Delta t} e^{-i\hat{H}_{\text{odd}}\frac{\frac{1}{2}\Delta t}{A}} . \\
 &e^{-i\hat{H}_{\text{odd}}\frac{\Delta t - 2\frac{1}{A}\Delta t - 2\frac{1}{A}\Delta t}{2}} e^{-i\hat{H}_{\text{even}}(\Delta t - 2\frac{1}{A}\Delta t - 2\frac{1}{A}\Delta t)} e^{-i\hat{H}_{\text{odd}}\frac{\Delta t - 2\frac{1}{A}\Delta t - 2\frac{1}{A}\Delta t}{2}} . \\
 &e^{-i\hat{H}_{\text{odd}}\frac{\frac{1}{2}\Delta t}{A}} e^{-i\hat{H}_{\text{even}}\frac{1}{A}\Delta t} e^{-i\hat{H}_{\text{odd}}\frac{\frac{1}{2}\Delta t}{A}} . \\
 &e^{-i\hat{H}_{\text{odd}}\frac{\frac{1}{2}\Delta t}{A}} e^{-i\hat{H}_{\text{even}}\frac{1}{A}\Delta t} e^{-i\hat{H}_{\text{odd}}\frac{\frac{1}{2}\Delta t}{A}} + \mathcal{O}(\Delta t^5).
 \end{aligned}$$

Um die Reduzierung zu erreichen, müssen nun „gleichartige“ Operatoren zusammengefasst werden. Dies ist erlaubt, da alle geraden bzw. ungeraden Bondoperatoren miteinander kommutieren (s. Kap. 4.1):

$$\begin{aligned}
 e^{-i\hat{H}\Delta t} &= e^{-i\hat{H}_{\text{odd}}\frac{\frac{1}{2}\Delta t}{A}} e^{-i\hat{H}_{\text{even}}\frac{1}{A}\Delta t} . \\
 &\underbrace{e^{-i\hat{H}_{\text{odd}}\frac{\frac{1}{2}\Delta t}{A}} e^{-i\hat{H}_{\text{odd}}\frac{\frac{1}{2}\Delta t}{A}}}_{e^{-i\hat{H}_{\text{odd}}\frac{1}{A}\Delta t}} e^{-i\hat{H}_{\text{even}}\frac{1}{A}\Delta t} . \\
 &\underbrace{e^{-i\hat{H}_{\text{odd}}\frac{\frac{1}{2}\Delta t}{A}} e^{-i\hat{H}_{\text{odd}}\frac{\Delta t - \frac{4}{A}\Delta t}{2}}}_{e^{-i\hat{H}_{\text{odd}}\frac{A-3}{2A}\Delta t}} e^{-i\hat{H}_{\text{even}}(\Delta t - \frac{4}{A}\Delta t)} . \\
 &\underbrace{e^{-i\hat{H}_{\text{odd}}\frac{\Delta t - \frac{4}{A}\Delta t}{2}} e^{-i\hat{H}_{\text{odd}}\frac{\frac{1}{2}\Delta t}{A}}}_{e^{-i\hat{H}_{\text{odd}}\frac{A-3}{2A}\Delta t}} e^{-i\hat{H}_{\text{even}}\frac{1}{A}\Delta t} . \\
 &\underbrace{e^{-i\hat{H}_{\text{odd}}\frac{\frac{1}{2}\Delta t}{A}} e^{-i\hat{H}_{\text{odd}}\frac{\frac{1}{2}\Delta t}{A}}}_{e^{-i\hat{H}_{\text{odd}}\frac{1}{A}\Delta t}} e^{-i\hat{H}_{\text{even}}\frac{1}{A}\Delta t} . \\
 &e^{-i\hat{H}_{\text{odd}}\frac{\frac{1}{2}\Delta t}{A}} + \mathcal{O}(\Delta t^5) \\
 &= e^{-i\hat{H}_{\text{odd}}\frac{1}{2A}\Delta t} e^{-i\hat{H}_{\text{even}}\frac{1}{A}\Delta t} e^{-i\hat{H}_{\text{odd}}\frac{1}{A}\Delta t} e^{-i\hat{H}_{\text{even}}\frac{1}{A}\Delta t} . \\
 &e^{-i\hat{H}_{\text{odd}}\frac{A-3}{2A}\Delta t} e^{-i\hat{H}_{\text{even}}\frac{A-4}{A}\Delta t} e^{-i\hat{H}_{\text{odd}}\frac{A-3}{2A}\Delta t} . \\
 &e^{-i\hat{H}_{\text{even}}\frac{1}{A}\Delta t} e^{-i\hat{H}_{\text{odd}}\frac{1}{A}\Delta t} e^{-i\hat{H}_{\text{even}}\frac{1}{A}\Delta t} e^{-i\hat{H}_{\text{odd}}\frac{1}{2A}\Delta t} + \mathcal{O}(\Delta t^5).
 \end{aligned}$$

Für den Fall, das zwischen zwei Zeitschritten keine Messungen durchgeführt werden, kann darüber hinaus der erste und letzte Teilschritt zusammengefasst werden.

Literaturverzeichnis

- [1] AFFLECK, Ian ; KENNEDY, Tom ; LIEB, Elliott H. ; TASAKI, Hal: Rigorous results on valence-bond ground states in antiferromagnets. In: *Phys. Rev. Lett.* 59 (1987), Aug, S. 799–802. – URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.59.799>
- [2] ANDERSON, E. ; BAI, Z. ; BISCHOF, C. ; BLACKFORD, S. ; DEMMEL, J. ; DONGARRA, J. ; DU CROZ, J. ; GREENBAUM, A. ; HAMMARLING, S. ; MCKENNEY, A. ; SORENSEN, D.: *LAPACK Users' Guide*. Third. Philadelphia, PA : Society for Industrial and Applied Mathematics, 1999. – ISBN 0-89871-447-8 (paperback)
- [3] BARTHEL, Thomas: Precise evaluation of thermal response functions by optimized density matrix renormalization group schemes. In: *New Journal of Physics* 15 (2013), Nr. 7, S. 073010. – URL <http://stacks.iop.org/1367-2630/15/i=7/a=073010>
- [4] BARTHEL, Thomas ; SCHOLLWÖCK, Ulrich ; WHITE, Steven R.: Spectral functions in one-dimensional quantum systems at finite temperature using the density matrix renormalization group. In: *Phys. Rev. B* 79 (2009), Jun, S. 245101. – URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.79.245101>
- [5] BAXTER, R. J.: Dimers on a Rectangular Lattice. In: *Journal of Mathematical Physics* 9 (1968), Nr. 4, S. 650–654. – URL <http://scitation.aip.org/content/aip/journal/jmp/9/4/10.1063/1.1664623>
- [6] BENTHIEN, H. ; JECKELMANN, E.: Optical conductivity of the one-dimensional dimerized Hubbard model at quarter filling. In: *The European Physical Journal B - Condensed Matter and Complex Systems* 44 (2005), Nr. 3, S. 287–297. – URL <http://dx.doi.org/10.1140/epjb/e2005-00128-1>. – ISSN 1434-6028
- [7] BETHE, H.: Zur Theorie der Metalle. In: *Zeitschrift für Physik* 71 (1931), Nr. 3-4, S. 205–226. – URL <http://dx.doi.org/10.1007/BF01341708>. – ISSN 0044-3328

- [8] BRITANAK, V. ; YIP, P.C. ; RAO, K.R.: *Discrete Cosine and Sine Transforms: General Properties, Fast Algorithms and Integer Approximations*. Elsevier Science, 2010. – ISBN 9780080464640
- [9] BRÜCKEL, T. ; HEGER, G. ; RICHTER, D. ; ZORN, R.: *Schriften des Forschungszentrums Jülich . Reihe Materie und Material / Matter and Materials*. Bd. 15: *Neutron Scattering : lectures of the laboratory course held at the Forschungszentrum Jülich; New and rev. ed. from vol. 9, 2001*. Jülich : Forschungszentrum Jülich, Zentralbibliothek, 2003. – URL <http://juser.fz-juelich.de/record/30894>. – Record converted from VDB: 12.11.2012. – ISBN 3-89336-324-6
- [10] CLARKE, John ; BRAGINSKI, Alex I.: *The SQUID Handbook: Fundamentals and Technology of SQUIDs and SQUID Systems*. 1. Wiley-VCH, August 2004. – URL <http://www.worldcat.org/isbn/3527402292>. – ISBN 3527402292
- [11] CLARKE, John ; BRAGINSKI, Alex I.: *The SQUID Handbook: Applications of SQUIDs and SQUID Systems*. Wiley, 2006 (Bd. 2). – URL <http://books.google.de/books?id=buntRdQD7I8C>. – ISBN 9783527609505
- [12] COHEN-TANNOUJJI, C. ; DIU, B. ; LALOË, F.: *Quantenmechanik*. De Gruyter, 1999 (Quantenmechanik Bd. 2). – ISBN 9783110164596
- [13] DALEY, A. J. ; KOLLATH, C. ; SCHOLLWÖCK, U. ; VIDAL, G.: Time-dependent density-matrix renormalization-group using adaptive effective Hilbert spaces. In: *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment* 2004 (2004), Nr. 04, S. P04005. – URL <http://stacks.iop.org/1742-5468/2004/i=04/a=P04005>
- [14] DUKELSKY, J. ; MARTÍN-DELGADO, M. A. ; NISHINO, T. ; SIERRA, G.: Equivalence of the variational matrix product method and the density matrix renormalization group applied to spin chains. In: *EPL (Europhysics Letters)* 43 (1998), Nr. 4, S. 457. – URL <http://stacks.iop.org/0295-5075/43/i=4/a=457>
- [15] DZYALOSHINSKY, I.: A thermodynamic theory of “weak” ferromagnetism of antiferromagnetics. In: *Journal of Physics and Chemistry of Solids* 4 (1958), Nr. 4, S. 241 – 255. – URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0022369758900763>. – ISSN 0022-3697
- [16] ECKART, Carl ; YOUNG, Gale: The approximation of one matrix by another of lower rank. In: *Psychometrika* 1 (1936), Nr. 3, S. 211–218. – URL <http://dx.doi.org/10.1007/BF02288367>. – ISSN 0033-3123

- [17] EGGERT, Sebastian ; AFFLECK, Ian ; TAKAHASHI, Minoru: Susceptibility of the spin 1/2 Heisenberg antiferromagnetic chain. In: *Phys. Rev. Lett.* 73 (1994), Jul, S. 332–335. – URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.73.332>
- [18] ESSLER, Fabian H. L.: Sine-Gordon low-energy effective theory for copper benzoate. In: *Phys. Rev. B* 59 (1999), Jun, S. 14376–14383. – URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.59.14376>
- [19] FANNES, M. ; NACHTERGAELE, B. ; WERNER, R. F.: Exact Antiferromagnetic Ground States of Quantum Spin Chains. In: *EPL (Europhysics Letters)* 10 (1989), Nr. 7, S. 633. – URL <http://stacks.iop.org/0295-5075/10/i=7/a=005>
- [20] FEIGUIN, Adrian E. ; FIETE, Gregory A.: Spectral properties of a spin-incoherent Luttinger liquid. In: *Phys. Rev. B* 81 (2010), Feb, S. 075108. – URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.81.075108>
- [21] GARCÍA-RIPOLL, Juan J.: Time evolution of Matrix Product States. In: *New Journal of Physics* 8 (2006), Nr. 12, S. 305. – URL <http://stacks.iop.org/1367-2630/8/i=12/a=305>
- [22] GRIMSDITCH, M ; VAVASSORI, P: The diffracted magneto-optic Kerr effect: what does it tell you? In: *Journal of Physics: Condensed Matter* 16 (2004), Nr. 9, S. R275. – URL <http://stacks.iop.org/0953-8984/16/i=9/a=R01>
- [23] GROSSJOHANN, S. ; BREINIG, W.: Spin dynamics of the antiferromagnetic spin- $\frac{1}{2}$ chain at finite magnetic fields and intermediate temperatures. In: *Phys. Rev. B* 79 (2009), Mar, S. 094409. – URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.79.094409>
- [24] HALDANE, F. D. M.: Continuum dynamics of the 1-D Heisenberg antiferromagnet: Identification with the O(3) nonlinear sigma model. In: *Physics Letters A* 93 (1983), Februar, S. 464–468
- [25] HALLBERG, Karen A.: Density-matrix algorithm for the calculation of dynamical properties of low-dimensional systems. In: *Phys. Rev. B* 52 (1995), Oct, S. R9827–R9830. – URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.52.R9827>
- [26] HEISENBERG, W.: Zur Theorie des Ferromagnetismus. In: *Zeitschrift für Physik* 49 (1928), Nr. 9-10, S. 619–636. – URL <http://dx.doi.org/10.1007/BF01328601>. – ISSN 0044-3328

- [27] HEYL, M. ; POLKOVNIKOV, A. ; KEHREIN, S.: Dynamical Quantum Phase Transitions in the Transverse-Field Ising Model. In: *Phys. Rev. Lett.* 110 (2013), Mar, S. 135704. – URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.110.135704>
- [28] ISING, Ernst: Beitrag zur Theorie des Ferromagnetismus. In: *Zeitschrift für Physik A Hadrons and Nuclei* 31 (1925), S. 253–258. – URL <http://dx.doi.org/10.1007/BF02980577>. – 10.1007/BF02980577. – ISSN 0939-7922
- [29] JECKELMANN, Eric: Dynamical density-matrix renormalization-group method. In: *Phys. Rev. B* 66 (2002), Jul, S. 045114. – URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.66.045114>
- [30] JESENKO, Simon ; ŽNIDARIČ, Marko: Finite-temperature magnetization transport of the one-dimensional anisotropic Heisenberg model. In: *Phys. Rev. B* 84 (2011), Nov, S. 174438. – URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.84.174438>
- [31] JORDAN, P. ; WIGNER, E.: Über das Paulische Äquivalenzverbot. In: *Zeitschrift für Physik* 47 (1928), Nr. 9-10, S. 631–651. – URL <http://dx.doi.org/10.1007/BF01331938>. – ISSN 0044-3328
- [32] JUOZAPAVIČIUS, A. ; CAPRARA, S. ; ROSENGREN, A.: Quantum Ising model in a transverse random field: A density-matrix renormalization-group analysis. In: *Phys. Rev. B* 56 (1997), Nov, S. 11097–11101. – URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.56.11097>
- [33] KARRASCH, C. ; BARDARSON, J. H. ; MOORE, J. E.: Finite-Temperature Dynamical Density Matrix Renormalization Group and the Drude Weight of Spin-1/2 Chains. In: *Phys. Rev. Lett.* 108 (2012), May, S. 227206. – URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.108.227206>
- [34] KARRASCH, C. ; BARDARSON, J. H. ; MOORE, J. E.: Reducing the numerical effort of finite-temperature density matrix renormalization group calculations. In: *New Journal of Physics* 15 (2013), Nr. 8, S. 083031. – URL <http://stacks.iop.org/1367-2630/15/i=8/a=083031>
- [35] KLÜMPER, A. ; JOHNSTON, D. C.: Thermodynamics of the Spin- $\frac{1}{2}$ Heisenberg Chain

- Antiferromagnetic Uniform Heisenberg Chain. In: *Phys. Rev. Lett.* 84 (2000), May, S. 4701–4704. – URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.84.4701>
- [36] KOMA, Tohru: Thermal Bethe-Ansatz Method for the Spin-1/2 XXZ Heisenberg Chain. In: *Progress of Theoretical Physics* 81 (1989), Nr. 4, S. 783–809. – URL <http://ptp.oxfordjournals.org/content/81/4/783.abstract>
- [37] KÜHNER, Till D. ; WHITE, Steven R.: Dynamical correlation functions using the density matrix renormalization group. In: *Phys. Rev. B* 60 (1999), Jul, S. 335–343. – URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.60.335>
- [38] LAKE, Bella ; TENNANT, D. A. ; FROST, Chris D. ; NAGLER, Stephen E.: Quantum criticality and universal scaling of a quantum antiferromagnet. In: *Nature Materials* 4 (2005), April, Nr. 4, S. 329–334. – URL <http://dx.doi.org/10.1038/nmat1327>. – ISSN 1476-1122
- [39] LU, Jia G. ; CHANG, Paichun ; FAN, Zhiyong: Quasi-one-dimensional metal oxide materials - Synthesis, properties and applications. In: *Materials Science & Engineering Reports*, 2006
- [40] MANMANA, Salvatore R. ; MURAMATSU, Alejandro ; NOACK, Reinhard M.: Time evolution of one-dimensional Quantum Many Body Systems. In: *AIP Conf. Proc.* 789 (2005), S. 269–278. – URL <http://arxiv.org/abs/cond-mat/0502396>
- [41] MARTÍN-DELGADO, M. A. ; SIERRA, G.: Analytic Formulations of the Density Matrix Renormalization Group. In: *International Journal of Modern Physics A* 11 (1996), Nr. 17, S. 3145–3174. – URL <http://www.worldscientific.com/doi/abs/10.1142/S0217751X96001516>
- [42] MIKESKA, Hans-Jürgen ; KOLEZHUK, Alexei K.: One-dimensional magnetism. In: SCHOLLWÖCK, Ulrich (Hrsg.) ; RICHTER, Johannes (Hrsg.) ; FARNELL, Damian J. J. (Hrsg.) ; BISHOP, Raymond F. (Hrsg.): *Quantum Magnetism* Bd. 645. Springer Berlin Heidelberg, 2004, S. 1–83. – URL <http://dx.doi.org/10.1007/BFb0119591>. – ISBN 978-3-540-21422-9
- [43] MORIYA, Tôru: New Mechanism of Anisotropic Superexchange Interaction. In: *Phys. Rev. Lett.* 4 (1960), Mar, S. 228–230. – URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.4.228>

- [44] MOTT, N. F. ; FRIEDMAN, L.: Metal-insulator transitions in VO₂, Ti₂O₃ and Ti_{2-x}V_xO₃. In: *Philosophical Magazine* 30 (1974), Nr. 2, S. 389–402. – URL <http://www.tandfonline.com/doi/abs/10.1080/14786439808206565>
- [45] MÜLLER, Gerhard ; THOMAS, Harry ; BECK, Hans ; BONNER, Jill C.: Quantum spin dynamics of the antiferromagnetic linear chain in zero and nonzero magnetic field. In: *Phys. Rev. B* 24 (1981), Aug, S. 1429–1467. – URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.24.1429>
- [46] NIELSEN, Michael A. ; CHUANG, Isaac L.: *Quantum Computation and Quantum Information (Cambridge Series on Information and the Natural Sciences)*. 1. Cambridge University Press, Januar 2004. – ISBN 0521635039
- [47] NOACK, Reinhard ; WHITE, Steven: The Density Matrix Renormalization Group. In: PESCHEL, Ingo (Hrsg.) ; KAULKE, Matthias (Hrsg.) ; WANG, Xiaoqun (Hrsg.) ; HALLBERG, Karen (Hrsg.): *Density-Matrix Renormalization* Bd. 528. Springer Berlin / Heidelberg, 1999, S. 27–66. – URL <http://dx.doi.org/10.1007/BFb0106064> – 10.1007/BFb0106064
- [48] NOLTING, W. ; RAMAKANTH, A.: *Quantum Theory of Magnetism*. Springer, 2009. – URL <http://books.google.de/books?id=vrcHC9XoHbsC>. – ISBN 9783540854166
- [49] ONSAGER, L.: Crystal Statistics. I. A Two-Dimensional Model with an Order-Disorder Transition. In: *Physical Review* 65 (1944), Februar, S. 117–149
- [50] OSHIKAWA, Masaki ; AFFLECK, Ian: Field-Induced Gap in $S = 1/2$ Antiferromagnetic Chains. In: *Phys. Rev. Lett.* 79 (1997), Oct, S. 2883–2886. – URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.79.2883>
- [51] ÖSTLUND, Stellan ; ROMMER, Stefan: Thermodynamic Limit of Density Matrix Renormalization. In: *Phys. Rev. Lett.* 75 (1995), Nov, S. 3537–3540. – URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.75.3537>
- [52] PEREIRA, R. G. ; SIRKER, J. ; CAUX, J.-S. ; HAGEMANS, R. ; MAILLET, J. M. ; WHITE, S. R. ; AFFLECK, I.: Dynamical Spin Structure Factor for the Anisotropic Spin-1/2 Heisenberg Chain. In: *Phys. Rev. Lett.* 96 (2006), Jun, S. 257202. – URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.96.257202>
- [53] PRESS, William H. ; TEUKOLSKY, Saul A. ; VETTERLING, William T. ; FLANNERY, Brian P.: *Numerical Recipes 3rd Edition: The Art of Scientific Computing*. 3.

- Cambridge University Press, September 2007. – URL <http://www.worldcat.org/isbn/0521880688>. – ISBN 0521880688
- [54] RAMASESHA, S. ; PATI, Swapan K. ; KRISHNAMURTHY, H. R. ; SHUAI, Z. ; BRÉDAS, J. L.: Symmetrized density-matrix renormalization-group method for excited states of Hubbard models. In: *Phys. Rev. B* 54 (1996), Sep, S. 7598–7601. – URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.54.7598>
- [55] ROMMER, Stefan ; ÖSTLUND, Stellan: Class of ansatz wave functions for one-dimensional spin systems and their relation to the density matrix renormalization group. In: *Phys. Rev. B* 55 (1997), Jan, S. 2164–2181. – URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.55.2164>
- [56] SCHOLLWÖCK, Ulrich: The density-matrix renormalization group in the age of matrix product states. In: *Annals of Physics* 326 (2011), Nr. 1, S. 96 – 192. – URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0003491610001752>. – January 2011 Special Issue. – ISSN 0003-4916
- [57] SHULL, Clifford G.: Early development of neutron scattering. In: *Rev. Mod. Phys.* 67 (1995), Oct, S. 753–757. – URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.67.753>
- [58] SIRKER, J.: Spin diffusion and the anisotropic spin- $\frac{1}{2}$ Heisenberg chain. In: *Phys. Rev. B* 73 (2006), Jun, S. 224424. – URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.73.224424>
- [59] SIRKER, Jesko ; KLÜMPER, Andreas: Real-time dynamics at finite temperature by the density-matrix renormalization group: A path-integral approach. In: *Phys. Rev. B* 71 (2005), Jun, S. 241101. – URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.71.241101>
- [60] STONE, M. B. ; REICH, D. H. ; BROHOLM, C. ; LEFMANN, K. ; RISCHEL, C. ; LANDEE, C. P. ; TURNBULL, M. M.: Extended Quantum Critical Phase in a Magnetized Spin- $\frac{1}{2}$ Antiferromagnetic Chain. In: *Phys. Rev. Lett.* 91 (2003), Jul, S. 037205. – URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.91.037205>
- [61] STOUDENMIRE, E M. ; WHITE, Steven R.: Minimally entangled typical thermal state algorithms. In: *New Journal of Physics* 12 (2010), Nr. 5, S. 055026. – URL <http://stacks.iop.org/1367-2630/12/i=5/a=055026>

- [62] SToudenMIRE, E.M. ; WHITE, Steven R.: Studying Two-Dimensional Systems with the Density Matrix Renormalization Group. In: *Annual Review of Condensed Matter Physics* 3 (2012), Nr. 1, S. 111–128. – URL <http://www.annualreviews.org/doi/abs/10.1146/annurev-conmatphys-020911-125018>
- [63] SUZUKI, Masuo: General Decomposition Theory of Ordered Exponentials. In: *Proceedings of the Japan Academy, Series B* 69 (1993), Nr. 7, S. 161–166
- [64] TAKAHASHI, Minoru.: Cambridge University Press, 1999. – URL <http://dx.doi.org/10.1017/CB09780511524332>
- [65] UHLMANN, A.: The “transition probability“ in the state space of a *-algebra. In: *Reports on Mathematical Physics* 9 (1976), Nr. 2, S. 273 – 279. – URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0034487776900604>. – ISSN 0034-4877
- [66] UHLMANN, Armin: Parallel transport and “quantum holonomy” along density operators. In: *Reports on Mathematical Physics* 24 (1986), Nr. 2, S. 229 – 240. – URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0034487786900558>. – ISSN 0034-4877
- [67] VANDEVOORDE, David ; JOSUTTIS, Nicolai M.: *C++ Templates: The Complete Guide*. 1. Addison-Wesley Professional, November 2002. – URL <http://www.worldcat.org/isbn/0201734842>. – ISBN 9780201734843
- [68] VERSTRAETE, Frank ; WOLF, Michael M. ; IGNACIO CIRAC, J.: Quantum computation and quantum-state engineering driven by dissipation. In: *Nat Phys* 5 (2009), September, Nr. 9, S. 633–636. – URL <http://dx.doi.org/10.1038/nphys1342>. – ISSN 1745-2473
- [69] VIDAL, Guifré: Efficient Simulation of One-Dimensional Quantum Many-Body Systems. In: *Phys. Rev. Lett.* 93 (2004), Jul, S. 040502. – URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.93.040502>
- [70] WHITE, Steven R.: Density matrix formulation for quantum renormalization groups. In: *Phys. Rev. Lett.* 69 (1992), Nov, Nr. 19, S. 2863–2866
- [71] WHITE, Steven R.: Density-matrix algorithms for quantum renormalization groups. In: *Phys. Rev. B* 48 (1993), Oct, Nr. 14, S. 10345–10356

- [72] WHITE, Steven R.: Minimally Entangled Typical Quantum States at Finite Temperature. In: *Phys. Rev. Lett.* 102 (2009), May, S. 190601. – URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.102.190601>
- [73] WHITE, Steven R. ; FEIGUIN, Adrian E.: Real-Time Evolution Using the Density Matrix Renormalization Group. In: *Phys. Rev. Lett.* 93 (2004), Aug, S. 076401. – URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.93.076401>
- [74] XU, Guangyong ; BROHOLM, C. ; SOH, Yeong-Ah ; AEPPLI, G. ; DITUSA, J. F. ; CHEN, Ying ; KENZELMANN, M. ; FROST, C. D. ; ITO, T. ; OKA, K. ; TAKAGI, H.: Mesoscopic Phase Coherence in a Quantum Spin Fluid. In: *Science* 317 (2007), Nr. 5841, S. 1049–1052. – URL <http://www.sciencemag.org/content/317/5841/1049.abstract>
- [75] YU, Weiqiang ; HAAS, Stephan: Dynamical properties of spin-orbital chains in a magnetic field. In: *Phys. Rev. B* 63 (2000), Dec, S. 024423. – URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.63.024423>
- [76] ZALIZNYAK, I. A. ; WOO, H. ; PERRING, T. G. ; BROHOLM, C. L. ; FROST, C. D. ; TAKAGI, H.: Spinons in the Strongly Correlated Copper Oxide Chains in SrCuO₂. In: *Phys. Rev. Lett.* 93 (2004), Aug, S. 087202. – URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.93.087202>
- [77] ZEPPER, L ; HUBERT, A: Lorentz-mikroskopie von Bloch- und Néelwänden in Ni-Fe-kristallen. In: *Journal of Magnetism and Magnetic Materials* 2 (1976), Nr. 1–3, S. 18 – 24. – URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0304885375900992>. – ISSN 0304-8853
- [78] ZVYAGIN, A. A. ; MAKAROVA, A. V.: Bethe-ansatz study of the low-temperature thermodynamics of an open Heisenberg chain. In: *Phys. Rev. B* 69 (2004), Jun, S. 214430. – URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.69.214430>

Danksagung

Vielen Dank an Andreas Honecker für die Betreuung meiner Masterarbeit und für die Idee der Untersuchung des Spin-Strukturfaktors bei (un)endlicher Temperatur, welche mit einer herausfordernden Methodenentwicklung verbunden war. Darüber hinaus bedanke ich mich bei Thomas Pruschke dafür, dass er das Zweitgutachten für diese Arbeit schreibt, und für die freundliche Aufnahme in die Arbeitsgruppe.

Ganz besonders möchte ich auch Salvatore Manmana für viele inspirierende Diskussionen und sein kritisches Korrekturlesen dieser Arbeit danken. Vor allem auch in Bezug auf Fragen rund um die verwendeten numerischen Methoden fand ein reger Gedankenaustausch statt.

Außerdem möchte ich Alexander Tiegel und Robert Schade danken, die stets gute Ideen hatten, wenn ich den Wald vor lauter Bäumen nicht mehr sah. Auch meinen Büro-Kollegen sowie der gesamten Arbeitsgruppe sei an dieser Stelle ein Dank für eine außerordentlich angenehme Arbeitsumgebung ausgesprochen.

Für die technische Unterstützung und die prompte Reaktion bei Problemen und/oder Wünschen möchte ich auch Jürgen Holm meinen Dank aussprechen.

Während des Erstellens der Simulationssoftware durfte ich drei Monate an der UC Berkeley in der Arbeitsgruppe von Joel Moore zu Gast sein. Dafür ihm, meinem Ansprechpartner Christoph Karrasch, von dem ich einiges lernen durfte, und dem „Virtual Institute: New States of Matter and their Excitations“, welches für die Kosten aufkam, einen ganz besonderen Dank. Es war eine lehrreiche und abenteuerliche Zeit.

Erklärung nach §18(8) der Prüfungsordnung für den Bachelor-Studiengang Physik und den Master-Studiengang Physik an der Universität Göttingen:

Hiermit erkläre ich, dass ich diese Abschlussarbeit selbständig verfasst habe, keine anderen als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel benutzt habe und alle Stellen, die wörtlich oder sinngemäß aus veröffentlichten Schriften entnommen wurden, als solche kenntlich gemacht habe.

Darüberhinaus erkläre ich, dass diese Abschlussarbeit nicht, auch nicht auszugsweise, im Rahmen einer nichtbestandenen Prüfung an dieser oder einer anderen Hochschule eingereicht wurde.

Göttingen, den 11. Februar 2014

(Thomas Köhler)