
**Optimierte Basiswahl und Trunkierungsfehler
bei
kontinuierlichen unitären Transformationen
am Beispiel der dimerisierten Spin- $\frac{1}{2}$ -Kette**

Diplomarbeit

Technische Universität Dortmund

vorgelegt von
Nils Alexander Drescher
aus Dortmund

2009

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	6
1.1	Ziel	6
1.2	Aufbau	6
1.3	Notation	7
I	Theoretische Grundlagen	8
2	Verwendete Modelle und Basen	9
2.1	Dimerisierte Heisenbergkette	9
2.2	Basiswahl auf Gittern	10
2.3	Bondboson-Algebra	11
2.4	Hardcoreboson-Algebra	12
2.5	Doppel-Hardcore-Boson	13
3	Die CUT-Methode	15
3.1	Homogene Flußgleichung	15
3.2	Generatorschemata	16
3.2.1	Wegner-Generator	17
3.2.2	Mielke-Knetter-Uhrig-Generator	18
3.2.3	MKU-Varianten	19
3.3	Bestimmung der Koeffizienten	20
3.4	Trunkierung	21
3.5	Observablen	22
3.6	ROD	22
II	Ergebnisse der Arbeit	24
4	Dimerisierte Heisenbergkette	25
4.1	Standardbasis	25
4.1.1	Generatoren & Trunkierung	27

4.1.2	Grundzustandsenergie	29
4.1.3	Untergittermagnetisierung	30
4.2	Gedrehte Basis	32
4.2.1	Heisenberg-Dimer im Magnetfeld	33
4.2.2	Gestalt der Operatoren	35
4.2.3	Variation des Drehwinkels	36
4.3	Optimierter Drehwinkel	40
4.3.1	Wahl des optimalen Winkels	40
4.3.2	Abhängigkeit von B und λ	42
4.3.3	Grundzustandsenergie	43
4.3.4	Untergittermagnetisierung	44
4.4	Technische Implementierung	45
4.5	Zusammenfassung und Ausblick	46
5	Analyse des Trunkierungsfehlers	48
5.1	Auswirkungen der Trunkierung	49
5.2	Finite-Size-Effekte	51
5.3	Maß für den Trunkierungsfehler	54
5.3.1	Trunkierte Flußgleichung	54
5.3.2	Aufspalten der Flußgleichung	54
5.3.3	Inhomogene Flussgleichung	56
5.3.4	Trunkierungsfehler	57
5.3.5	Normen	59
5.4	Fehlerschranken	61
5.5	Observablen	62
5.6	Fazit	63
6	Trunkierungsfehler der dimerisierten Heisenbergkette	65
6.1	Berechnung in ausgedehnten Hardcore-Boson-Systemen	65
6.1.1	Norm lokaler Operatoren	66
6.1.2	Norm ausgedehnter Terme	66
6.1.3	Renormierung im unendlichen System	67
6.1.4	Dichte-Auswahlregel der Frobeniusnorm	68
6.1.5	Zerlegung mittels Dreiecksungleichung	69
6.1.6	Zusammenfassen des DGL-Systems	70
6.1.7	Ausnutzen von Symmetrien	72
6.2	Trunkierungsfehler der unendlichen Kette	73
6.2.1	Fehlerabschätzung	73
6.2.2	Das Trunkierungsparadoxon	75
6.2.3	Kontinuierliche Variation des Trunkierungsschemas	76
6.3	Trunkierungsfehler der endlichen Kette	78
6.3.1	Untersuchung der Dreiecksabschätzung	80

6.3.2	Kontinuierliche Variation des Trunkierungsschemas	81
6.4	Technische Aspekte	83
6.5	Zusammenfassung und Ausblick	83
III	Anhang	86
	Index	87
	Abbildungen	90
	Tabellen	91
	Literaturverzeichnis	93

1 Einleitung

1.1 Ziel

In dieser Arbeit wird die Methode der selbstähnlichen, kontinuierlichen unitären Transformationen (S-CUT) auf eine eindimensionale Spinflüssigkeit in Form der dimerisierten Heisenbergkette im alternierenden Magnetfeld angewandt. Es soll ferner untersucht werden, ob die Methode durch eine optimierte Wahl des Startpunktes verbessert werden kann. Darüber hinaus wird ein mathematisches Werkzeug entwickelt, um a priori eine obere Schranke für den Trunkierungsfehler der Methode zu berechnen; die praktische Eignung wird am Beispiel des geschilderten Systems untersucht.

1.2 Aufbau

Die vorliegende Arbeit ist in 6 Kapitel gegliedert.

- Im ersten Kapitel werden die Ziele der Arbeit umrissen, der Aufbau dargestellt und die Notation festgelegt.
- Im zweiten Kapitel werden die untersuchten Modelle mit den wichtigsten physikalischen Eigenschaften dargestellt und die verwendeten Basen eingeführt.
- Im dritten Kapitel werden die physikalische Motivation, Idee und Herleitung der S-CUT-Methode zusammengefasst.
- Im vierten Kapitel werden Grundzustandsenergie und Untergittermagnetisierung der dimerisierten Heisenbergkette bestimmt und mit Resultaten der DMRG verglichen. Ferner wird eine Optimierung des Startpunktes vorgenommen und die Ergebnisse gegenübergestellt.
- Im fünften Kapitel wird der Trunkierungsfehler der S-CUT-Methode mathematisch analysiert und eine obere Schranke für den Fehler der Grundzustandsenergie abgeleitet; das

Vorgehen wird anhand des Doppel-Hardcore-Boson-Modells illustriert.

- Im sechsten Kapitel wird der hergeleitete Formalismus für den Trunkierungsfehler im Praxiseinsatz anhand der endlichen und unendlichen dimerisierten Spin- $\frac{1}{2}$ -Kette untersucht.

1.3 Notation

Für quantenmechanische Zustände wird durchgehend die DIRAC-Notation ($\langle\psi|, |\psi\rangle$) verwendet. Quantenmechanische Operatoren werden durch große lateinische Buchstaben dargestellt; für die entsprechende Operatorbasis werden kleine lateinische Buchstaben genutzt. Tiefgestellte arabische Zahlen stehen für den jeweiligen Gitterplatz, hochgestellte griechische für weitere Quantenzahlen (Polarisation, Art der Quasiteilchen / *flavour*). Kommen zwei griechische Indizes in einem Term vor, so ist über den entsprechenden Wertebereich zu summieren (EINSTEINS Summationskonvention).

Superoperatoren (Operatoren, die nicht auf quantenmechanische Zustände wirken, sondern lineare Abbildungen quantenmechanischer Operatoren selbst beschreiben, z.B. Trunkierung \hat{T}) werden mit Dach dargestellt.

Teil I

Theoretische Grundlagen

2 Verwendete Modelle und Basen

2.1 Dimerisierte Heisenbergkette

Gegenstand der Untersuchungen in Kapitel 4 und 6 ist die lineare, dimerisierte antiferromagnetische Spin- $\frac{1}{2}$ -Heisenbergkette im alternierenden Magnetfeld. Der Hamiltonian ist gegeben durch

$$H = \sum_i J \left(\vec{S}_i^L \cdot \vec{S}_i^R + \lambda \vec{S}_i^R \cdot \vec{S}_{i+1}^L \right) + B \left(S_i^{L,z} - S_i^{R,z} \right). \quad (2.1.1)$$

Hierbei ist J die Stärke der magnetischen Wechselwirkung, λ die Interdimerkopplung und B das alternierende Magnetfeld.

Im besonders einfachen Fall $\lambda = 0$ besteht das System aus isolierten Dimeren. Im Grundzustand befindet sich das System in einem Produktzustand aus lokalen Singulets an jedem Dimer, die jeweils einen Beitrag $E_0 = -\frac{3}{4}$ zur Grundzustandsenergie liefern. Anregungen des Systems geschehen durch Umklappen eines Singulets zu einem Triplettzustand, das System zeigt daher ein äquidistantes Spektrum mit einer Energiedifferenz J .

Im Bereich $0 < \lambda < 1$ wird das System durch eine Spinflüssigkeit beschrieben [UG03]. Durch die Wechselwirkung benachbarter Dimere wird die Energielücke abgesenkt, bleibt aber endlich. Folglich kann sich keine langreichweitige magnetische Ordnung ausbilden, die Spinkorrelationen fallen exponentiell mit dem Abstand ab.

Der Fall $\lambda = 1$, die homogene Spinkette, wurde von BETHE analytisch gelöst [Bet31]. Die

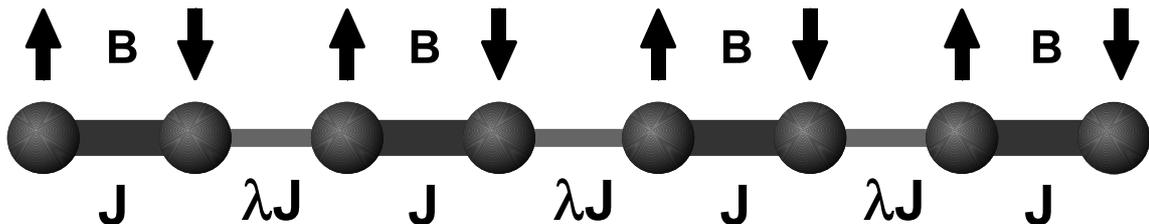


Abbildung 2.1: Darstellung der dimerisierten Heisenbergkette mit alternierendem Magnetfeld.

Grundzustandsenergie pro Dimer beträgt nach HULTHEN [Hul38]

$$E_0 = \frac{1}{2} - 2 \ln 2. \quad (2.1.2)$$

In diesem Fall wird das System *kritisch*, die Energielücke verschwindet. Der Grundzustand bleibt zwar magnetisch ungeordnet, allerdings nehmen Korrelationen nur noch algebraisch mit der Entfernung ab. Daher genügen bereits kleine Störungen, um eine magnetische Ordnung zu hervorzurufen. Die Untergittermagnetisierung erfährt an der Stelle $B = 0$ einen senkrechten Anstieg; die zum alternierenden Magnetfeld gehörige Suszeptibilität divergiert [MTBB81].

2.2 Basiswahl auf Gittern

Zur mathematischen Beschreibung von Quantengittermodellen ist es essenziell, Zustände und Operatoren in der Problemstellung angepassten Basen darzustellen. Ausgangspunkt für eine Basis im Ortsraum¹ bilden der lokale Hilbertraum \mathbb{H} eines einzelnen Gitterplatzes mit den Zuständen $\{|n\rangle\}$ und die Basis der hierauf definierten quantenmechanischen Operatoren $\{\mathcal{A}^n\}$.

Der Hilbertraum \mathbb{F} des gesamten Systems mit N Gitterplätzen ist dann das Tensorprodukt

$$\mathbb{F} = \bigotimes_{i=1}^N \mathbb{H}_i \quad (2.2.3)$$

der lokalen Hilberträume \mathbb{H}_i an den Gitterplätzen i . Die Basis der Zustände des Gesamtsystems $\{|n_1 \dots n_N\rangle\}$ setzt sich dann aus Tensorproduktzuständen

$$|n_1 \dots n_N\rangle = \bigotimes_{i=1}^N |n\rangle_i \quad (2.2.4)$$

zusammen. Die Dimension des neuen Hilbertraums \mathbb{F} ist damit

$$\dim \mathbb{F} = (\dim \mathbb{H})^N. \quad (2.2.5)$$

Auf \mathbb{F} lassen sich neue Operatoren für Zustände des Gitters definieren,

$$A_i^n = \left(\bigotimes_{j<i} \mathbb{1}_j \right) \otimes \mathcal{A}_i^n \otimes \left(\bigotimes_{j>i} \mathbb{1}_j \right) \quad (2.2.6)$$

die am Platz i wie ein lokaler Operator wirken, bezüglich anderer Gitterplätze keine Änderun-

¹Die Wahl der Basis als Produktzustände im Ortsraum ist allerdings keineswegs zwingend; prinzipiell kann auch eine nichtlokale Basis, etwa anhand des Impulsraums, definiert werden.

gen vornehmen. Durch Produktbildung lassen sich hierbei auch Terme

$$A = \alpha \prod_{j=1}^n A_{i(j)}^{n(j)} \quad (2.2.7)$$

darstellen, die auf n Gitterplätzen wirken. Dies ermöglicht es, Wechselwirkungen, die nur wenige Gitterplätze betreffen, sehr kompakt zu beschreiben. Die Gitterplätze $\{i(j)\}$, auf denen ein Term anders als die Identität wirkt, wird im Folgenden als *Cluster* des Terms bezeichnet.

2.3 Bondboson-Algebra

Eine natürliche Wahl für die lokale Basis eines auf Dimeren basierenden Heisenbergmodells stellen die Eigenzustände des Heisenberg-Dimers dar. In ihrer Arbeit [SB90] führten SACHDEV und BHATT zur Untersuchung des zweidimensionalen, dimerisierten Heisenbergmodells *Bondoperatoren* ein. Hierbei werden die Eigenzustände des Heisenberg-Dimers

$$|s\rangle = s^\dagger |0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle) \quad (2.3.8a)$$

$$|x\rangle = \tilde{t}^{\dagger x} |0\rangle = -\frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\uparrow\rangle - |\downarrow\downarrow\rangle) \quad (2.3.8b)$$

$$|y\rangle = \tilde{t}^{\dagger y} |0\rangle = \frac{i}{\sqrt{2}} (|\uparrow\uparrow\rangle + |\downarrow\downarrow\rangle) \quad (2.3.8c)$$

$$|z\rangle = \tilde{t}^{\dagger z} |0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle) \quad (2.3.8d)$$

in Besetzungszahldarstellung („Zweite Quantisierung“) als Anregungen eines abstrakten Vakuumzustands $|0\rangle$ beschrieben. Für die zugehörigen Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren wählten sie die bosonische Algebra

$$[s, s^\dagger] = \mathbb{1} \quad (2.3.9a)$$

$$[\tilde{t}^\alpha, \tilde{t}^{\dagger\beta}] = \delta_{\alpha\beta} \mathbb{1} \quad (2.3.9b)$$

$$[s, \tilde{t}^{\dagger\alpha}] = 0. \quad (2.3.9c)$$

In dieser Operatorbasis nehmen die Spinoperatoren \vec{S}^L und \vec{S}^R die Form

$$S^{L,\alpha} = \frac{1}{2} \left(s^\dagger \tilde{t}^\alpha + \tilde{t}^{\dagger\alpha} s - i\epsilon_{\alpha\beta\gamma} \tilde{t}^{\dagger\beta} \tilde{t}^\gamma \right) \quad (2.3.10a)$$

$$S^{R,\alpha} = \frac{1}{2} \left(s^\dagger \tilde{t}^\alpha + \tilde{t}^{\dagger\alpha} s + i\epsilon_{\alpha\beta\gamma} \tilde{t}^{\dagger\beta} \tilde{t}^\gamma \right) \quad (2.3.10b)$$

an.

Diese Darstellung hat allerdings den entscheidenden Nachteil, das physikalische Dimersystem in den weitaus größeren (unendlichdimensionalen) Hilbertraum des harmonischen Oszillators

mit vier unabhängigen Freiheitsgraden einzubetten. Der physikalische Unterraum der linearen Operatoren des vierdimensionalen Hilbertraums \mathbb{H} hat dagegen als Raum der 4×4 -Matrizen lediglich 16 Dimensionen. Neben dem physikalisch relevanten Unterraum, der durch die Bedingung

$$s^\dagger s + \tilde{t}^{\dagger\alpha} \tilde{t}^\alpha = 1 \quad (2.3.11)$$

erfasst wird, umfasst die Beschreibung außerdem auch Wechselwirkungen mit dem unphysikalischen Vakuum $|0\rangle$ sowie Zuständen $|sxy\rangle$ mit mehreren Dimeren pro Gitterplatz. Zwar erhält ein aus Spinoperatoren (2.3.10) zusammengesetztes Hamiltonian die Anzahl der Dimere pro Gitterplatz und sollte daher im Rahmen einer exakten Rechnung den physikalischen Hilbertraum nie verlassen. Die Erfüllung der Nebenbedingung (2.3.11) muss aber explizit für jeden Gitterplatz berücksichtigt werden. Bei der von BHATT und SACHDEV vorgenommenen *Mean-field-Näherung* kann Gleichung (2.3.11) allerdings nur im Mittel erfüllt werden. Das Ergebnis wird daher durch Fluktuationen in den unphysikalischen Teil des Hilbertraums verfälscht.

2.4 Hardcoreboson-Algebra

Der Nachteil der Einbettung in einen größeren, unphysikalischen Hilbertraum wird in der Hardcoreboson-Algebra² per Konstruktion ausgeschlossen. Als Referenzzustand fungiert hierbei der (physikalische) Singulett-Zustand

$$|0\rangle = |s\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle). \quad (2.4.12)$$

Die Tripletterzeuger

$$t^{\dagger x} := |x\rangle \langle s| \quad (2.4.13a)$$

$$t^{\dagger y} := |y\rangle \langle s| \quad (2.4.13b)$$

$$t^{\dagger z} := |z\rangle \langle s| \quad (2.4.13c)$$

werden direkt über ihre Wirkung im physikalischen Hilbertraum \mathbb{H} definiert. Matrixelemente zwischen Singulett und den Tripletzuständen lassen sich damit direkt über die Tripletterzeuger und -vernichter beschreiben. Die lokalen Produkte aus Erzeuger und Vernichter

$$t^{\dagger\alpha} t^\beta = |\alpha\rangle \langle s| \langle s| \langle \beta| = |\alpha\rangle \langle \beta| \quad (2.4.14)$$

decken alle Matrixelemente zwischen Tripletzuständen ab. Operatoren dieser Bauarten werden im Folgenden als *normalgeordnet* gegenüber dem Referenzzustand bezeichnet; ihr Diagonalelement im Singulettzustand verschwindet.

²Eine ausführliche Diskussion der Hardcore-Algebra unter besonderer Berücksichtigung der Matrixschreibweise findet sich beispielsweise in der Dissertationsschrift von Alexander Reischl [Rei06].

Dieses noch fehlende Diagonalelement

$$|s\rangle \langle s| = t^x t^{\dagger x} = t^y t^{\dagger y} = t^z t^{\dagger z} \quad (2.4.15)$$

besitzt 3 konkurrierende Darstellungen als Produkt aus Tripletvernichter und -erzeuger. Diese Mehrdeutigkeit wird vermieden, indem stattdessen die Identität

$$\mathbb{1} = |s\rangle \langle s| + |x\rangle \langle x| + |y\rangle \langle y| + |z\rangle \langle z| \quad (2.4.16)$$

nach dem Singulett-Diagonalelement

$$|s\rangle \langle s| = \mathbb{1} - t^{\dagger\alpha} t^\alpha \quad (2.4.17)$$

umgestellt wird. Identität³ und normalgeordnete Tripletoperatoren bilden damit eine Basis, in der jeder lokale Operator eindeutig darstellbar ist.

Ausgehend von der Definition über die lokalen Matrixelemente lässt sich die lokale Algebra im Kommutator

$$[t^\alpha, t^{\dagger\beta}] = |s\rangle \langle \alpha| |\beta\rangle \langle s| - |\beta\rangle \langle s| |s\rangle \langle \alpha| = \delta_{\alpha\beta} |s\rangle \langle s| - |\beta\rangle \langle \alpha| = \delta_{\alpha\beta} \left(\mathbb{1} - t^{\dagger\gamma} t^\gamma \right) - t^{\dagger\beta} t^\alpha \quad (2.4.18)$$

zusammenfassen. Lokale Produkte und ebenso Kommutatoren von zwei Erzeugern untereinander liefern 0; gleiches gilt für die Vernichter.

Für Hardcore-Bosonen auf Gittern gemäß Gleichung (2.2.6) wird die Algebra zu

$$[t_i^\alpha, t_j^{\dagger\beta}] = \delta_{ij} \left(\delta_{\alpha\beta} \left(\mathbb{1} - t_i^{\dagger\gamma} t_i^\gamma \right) - t_i^{\dagger\beta} t_i^\alpha \right) \quad (2.4.19)$$

erweitert. Die Wahl des Kommutators für Teilchen an verschiedenen Gitterplätzen ist nicht zwingend; hier wäre auch eine Definition über den Antikommutator (*Hardcore-Fermionen*) möglich.

2.5 Doppel-Hardcore-Boson

Als einfachen Modell für methodische Studien in Kapitel 5 wird das Doppel-Hardcore-Boson-Modell verwendet. An zwei Plätzen kann sich hierbei ein Hardcoreboson eines *flavours* a

³Die Präsenz des Identitätsoperators in der lokalen Basis bietet zudem den Vorteil, dass ausgedehnte Terme auf dem Gitter eine kompakte Darstellung besitzen, da sie für gewöhnlich am überwiegenden Teil der Gitterplätze als Identität wirken.

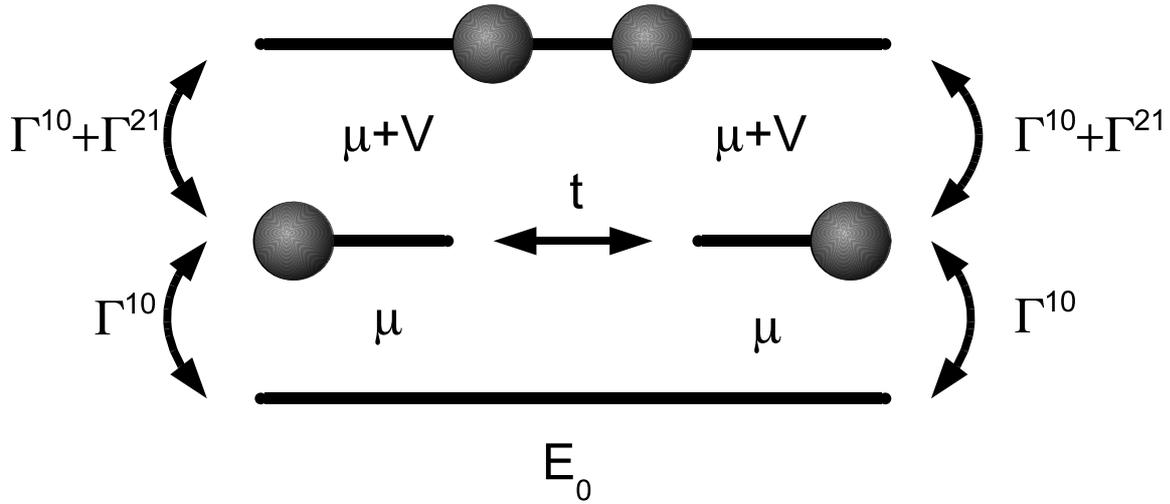


Abbildung 2.2: Darstellung der Energieniveaus des Doppel-Hardcore-Boson-Modells. Einzelne Symbole stehen für Differenzen zwischen benachbarten Energieniveaus, Pfeile markieren Übergänge durch Nichtdiagonalitäten und den Hopping-Term.

aufhalten. Der Hamiltonian des Modells wird durch

$$\begin{aligned}
 H = & E_0 \mathbb{1} + \mu \left(a_1^\dagger a_1 + a_2^\dagger a_2 \right) + V a_1^\dagger a_1 a_2^\dagger a_2 + t \left(a_1^\dagger a_2 + a_2^\dagger a_1 \right) \\
 & + \Gamma^{10} \left(a_1^\dagger + a_1 + a_2^\dagger + a_2 \right) + \Gamma^{21} \left(a_1^\dagger a_2^\dagger a_2 + a_1 a_2^\dagger a_2 + a_1^\dagger a_1 a_2^\dagger + a_1^\dagger a_1 a_2 \right)
 \end{aligned} \tag{2.5.20}$$

beschrieben. E_0 ist hierbei die Vakuumenergie des Systems; μ ist das chemische Potential und gibt den Energiebeitrag pro Boson wieder. V entspricht der Teilchen-Teilchen-Wechselwirkung; positive Werte entsprechen repulsiver Wechselwirkung und bestrafen Doppelbesetzung, negative Werte entsprechen anziehender Wechselwirkung und Erleichtern das Einbringen eines weiteren Teilchens. t ist ein Hoppingterm und gibt Hüpfprozesse des Teilchens von einem Gitterplatz auf den benachbarten wieder. Die Nichtdiagonalitäten Γ^{10} und Γ^{21} sind teilchenzahlverletzende Prozesse; sie bewirken die Erzeugung oder Vernichtung eines Hardcorebosons an einem Gitterplatz. Im Unterschied zu Γ^{10} wirkt Γ^{21} nur dann, wenn das jeweils andere Niveau besetzt ist.

3 Die CUT-Methode

Die Methode der kontinuierlichen unitären Transformationen (*continuous unitary transformations*, *CUT*, auch: Flussgleichungsmethode) wurde unabhängig von einander durch WEGNER [Weg94] sowie Glazek und Wilson [GW93, GW94] formuliert. Es handelt sich hierbei um ein nichtperturbatives Verfahren, das für komplexen Problemstellungen sowohl die direkte Bestimmung physikalischer Eigenschaften als auch die systematische Ableitung effektiver Modelle mit renormierten Parametern für den Niederenergiebereich ermöglicht. Eine ausführliche Darstellung im Blick auf die vielfältigen Anwendungen wird im Buch „The Flow Equation Approach to Many-Particle Systems“ von KEHREIN gegeben [Keh06].

3.1 Homogene Flußgleichung

Grundlage der CUT-Methode ist das Ziel, einen gegebenen Hamiltonian H in eine einfachere Darstellung zu überführen. Um das Eigenwertspektrum und damit die physikalischen Eigenschaften des Systems hierbei nicht zu verfälschen, muss die zugrundeliegende Transformation unitär sein. Da H ein selbstadjungierter und damit insbesondere auch normaler Operator ist, lässt er sich immer durch eine geeignete unitäre Transformation U in Diagonalfom bringen, so dass alle Eigenwerte direkt abgelesen werden können. Die entsprechende Transformation ist allerdings im Allgemeinen unbekannt.

In der CUT-Methode wird anstelle einer unitären Transformation in einem Schritt eine von einem kontinuierlichen Flussparameter ℓ abhängige Transformation $U(\ell)$ eingeführt, die den Hamiltonian

$$H(\ell) = U(\ell)H(0)U^\dagger(\ell) \quad \text{mit} \quad U(0) = \mathbb{1} \quad (3.1.1)$$

sukzessive näher an die gewünschte Gestalt bringt. Eine Ableitung nach ℓ ergibt

$$\partial_\ell H(\ell) = \frac{\partial U(\ell)}{\partial \ell} H(0)U^\dagger(\ell) + U(\ell) \frac{\partial H(0)}{\partial \ell} U^\dagger(\ell) + U(\ell)H(0) \frac{\partial U^\dagger(\ell)}{\partial \ell} \quad (3.1.2a)$$

$$= \frac{\partial U(\ell)}{\partial \ell} U^\dagger(\ell)U(\ell)H(0)U^\dagger(\ell) + U(\ell)H(0)U^\dagger(\ell)U(\ell) \frac{\partial U^\dagger(\ell)}{\partial \ell} \quad (3.1.2b)$$

$$= \frac{\partial U(\ell)}{\partial \ell} U^\dagger(\ell)H(\ell) + H(\ell)U(\ell) \frac{\partial U^\dagger(\ell)}{\partial \ell} \quad (3.1.2c)$$

An dieser Stelle wird der *Generator* der Transformation

$$\eta(\ell) := \frac{\partial U(\ell)}{\partial \ell} U^\dagger(\ell) \quad (3.1.3)$$

definiert. Auf Grund des Zusammenhangs

$$0 = \partial_\ell \mathbb{1} = \partial_\ell (U(\ell) U^\dagger(\ell)) = \frac{\partial U(\ell)}{\partial \ell} U^\dagger(\ell) + U(\ell) \frac{\partial U^\dagger(\ell)}{\partial \ell} = \eta(\ell) + \eta^\dagger(\ell) \quad (3.1.4)$$

ist der Generator antihermitesch. Damit ergibt sich aus (3.1.2) die homogene Flussgleichung

$$\begin{aligned} \partial_\ell H &= \frac{\partial U(\ell)}{\partial \ell} U^\dagger(\ell) H(\ell) + H(\ell) U(\ell) \frac{\partial U^\dagger(\ell)}{\partial \ell} \\ &= [\eta(\ell), H(\ell)]. \end{aligned} \quad (3.1.5)$$

Die unitäre Transformation kann dabei in der Umkehrung durch die Vorgabe eines beliebigen, antihermiteschen Generators $\eta(\ell)$ definiert werden.

Geometrisch kann $H(\ell)$ als Parametrisierung einer Raumkurve in der Algebra der auf dem System wirkenden linearen Operatoren verstanden werden. Die Ableitung $\partial_\ell H(\ell)$ entspricht dann dem Tangentialvektor. Die Abbildung $V(\ell) : A \rightarrow [\eta(\ell), A]$ definiert somit ein Vektorfeld, das für jeden Punkt (=Operator) des Raumes die Richtung der Transformation angibt.

In diesem Bild bedeutet Flussgleichung anschaulich die Forderung, dass die Raumkurve des Hamiltonians immer tangential entlang des durch $\eta(\ell)$ definierten Vektorfeldes $V(\ell)$ verlaufen muss. Dies ist gerade die Definition einer Flusslinie eines Vektorfeldes.

3.2 Generatorschemata

Das Problem, eine diagonalisierende Transformation U direkt zu bestimmen wurde durch Einführung des Flussparameters ℓ in die Aufgabe umformuliert, einen passenden Generatorverlauf $\eta(\ell)$ zu finden, der die Diagonalisierung von H herbeiführt. Der wesentliche Schritt zur Lösung des Problems ist hierbei die Bildung des Generators

$$\eta(\ell) := \hat{\eta}[H(\ell)] \quad (3.2.6)$$

aus dem transformierten Hamiltonian selbst anhand eines festen Generatorschemas $\hat{\eta}[\]$. Durch die Wahl des Generators in Abhängigkeit von $H(\ell)$ wird die Flussgleichung nichtlinear. Das Generatorschema ist hierbei so zu wählen, dass der Generator genau dann verschwindet, wenn $H(\ell)$ die gewünschte Form erreicht hat.

In der geometrischen Sichtweise vervollständigt sich damit das Bild der CUT-Methode: Durch die Vorgabe des Generatorschemas wird auf dem Raum der linearen Operatoren des Systems ein Vektorfeld definiert, das in denjenigen Raumregionen Fixpunkte besitzt, in denen

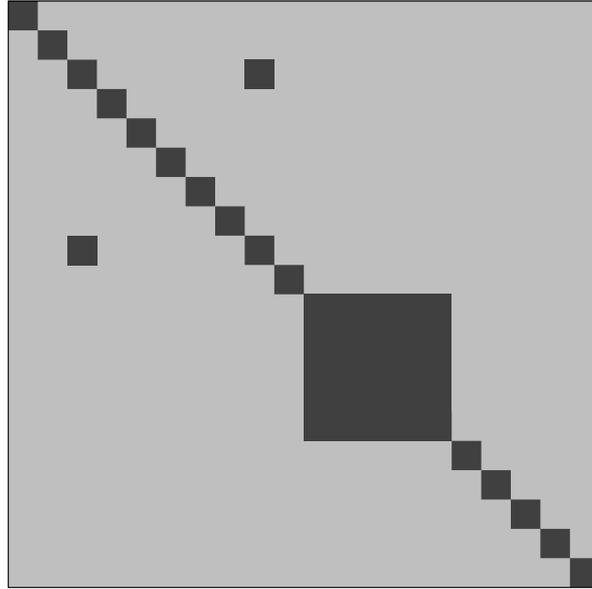


Abbildung 3.1: Matrixelemente des Hamiltonian während (grau) und nach (schwarz) der Integration der Flussgleichung beim Wegner-Generator. Entartete Unterräume werden nicht diagonalisiert.

der Hamiltonian die gewünschte Form annimmt. Durch ein manifest antihermitesches Generatorschema wird garantiert, dass das Vektorfeld immer tangential zur Untermannigfaltigkeit der Operatoren mit gleichem Eigenwertspektrum bleibt. Das Folgen der von $H(0)$ ausgehenden Flusslinie wird immer zu einem unitär transformierten Hamiltonian $H(\infty)$ führen, der die gewünschte Struktur aufweist, sofern die Rechnung gegen ein $H(\infty)$ konvergiert.

3.2.1 Wegner-Generator

Das erste Generatorschema wurde von WEGNER [Weg94] definiert. Hierbei wird der Hamiltonian

$$H(\ell) = H_{\text{diag}}(\ell) + H_{\text{nd}}(\ell) \quad (3.2.7)$$

in einen Diagonalanteil $H_{\text{diag}}(\ell)$ und einen Nichtdiagonalanteil $H_{\text{nd}}(\ell)$ aufgespalten. Der Wegner-Generator ist gegeben als der Kommutator aus $H(\ell)$ und dem Nichtdiagonalanteil $H_{\text{nd}}(\ell)$:

$$\hat{\eta}_{\text{Wegner}}[H(\ell)] = [H_{\text{diag}}(\ell), H(\ell)]. \quad (3.2.8)$$

Dieser Ausdruck verwindet, wenn der Hamiltonian keinen Nichtdiagonalanteil besitzt und somit selbst diagonal ist. Die Konvergenz des Wegner-Generators wurde allgemein bewiesen [Weg94, DU04]. Allerdings ist der Wegner-Generator nicht dazu in der Lage, entartete Energieniveaus zu entkoppeln. Der Hamiltonian kann nach dem Fluss noch nichtdiagonale, entartete Unterräume aufweisen, die mit anderen Verfahren nachdiagonalisiert werden müssen (siehe Abbildung 3.2.1).

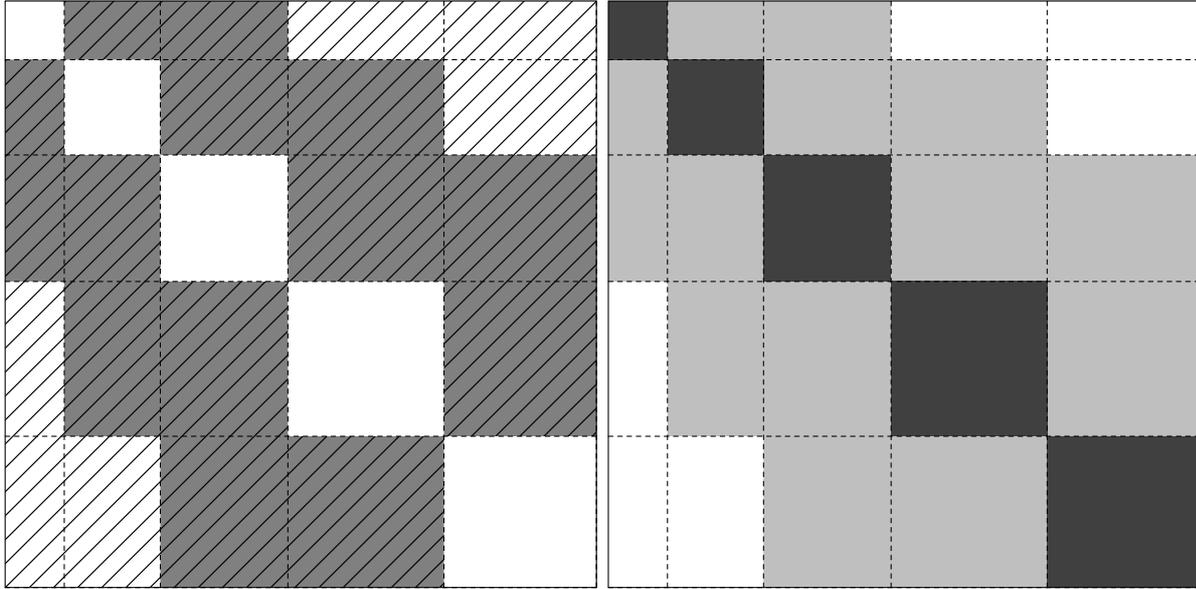


Abbildung 3.2: Links: Darstellung des MKU-Generators (schraffiert) in Besetzungszahldarstellung. Der grau markierte Starthamiltonian $H(0)$ weist keine Prozesse auf, die mehr als 2 Quasiteilchen erzeugen oder vernichten. Rechts: Der banddiagonale Hamiltonian während (grau) und nach (schwarz) der Integration der Flussgleichung.

3.2.2 Mielke-Knetter-Uhrig-Generator

Der unabhängig voneinander von MIELKE [Mie98] sowie KNETTER und UHRIG [KU00] formulierte MKU-Generator legt den Fokus die Beschreibung im Rahmen des Quasiteilchenbildes. Der Hamiltonian

$$H(\ell) = H^+(\ell) + H^0(\ell) + H^-(\ell) \quad (3.2.9)$$

wird hierbei in einen quasiteilchenzahlerhöhenden Anteil $H^+(\ell)$, einen quasiteilchenzahlerhaltenden Anteil $H^0(\ell)$ und einen quasiteilchenzahlverringern den Anteil $H^-(\ell)$ aufgespalten. Der MKU-Generator nimmt hierbei die Form

$$\hat{\eta}_{\text{MKU}}[H(\ell)] = H^+(\ell) - H^-(\ell) \quad (3.2.10)$$

an. Der MKU-Generator führt zu einem quasiteilchenzahlerhaltenden, blockdiagonalen Hamiltonian¹. Jeder Block beinhaltet nur Wechselwirkungen einer bestimmten Anzahl von Quasiteilchen. Zusätzlich werden die Quasiteilchenräume strikt nach Energien geordnet; das Quasiteilchenvakuum entspricht damit nach dem Fluss dem physikalischen Grundzustand des Systems und der Einteilchenraum den niedrigsten Anregungen des Systems. Dadurch lassen sich die Eigenschaften verschiedener Quasiteilchenräume getrennt von einander untersuchen. So kann etwa die Grundzustandsenergie als die Vakuumenergie des Hamiltonians abgelesen werden²,

¹Dies gilt sowohl für die Matrixdarstellung als auch für die Besetzungszahldarstellung im Operatorraum.

²Falls der Grundzustand entartet ist, sind weitere Umformungen nötig.

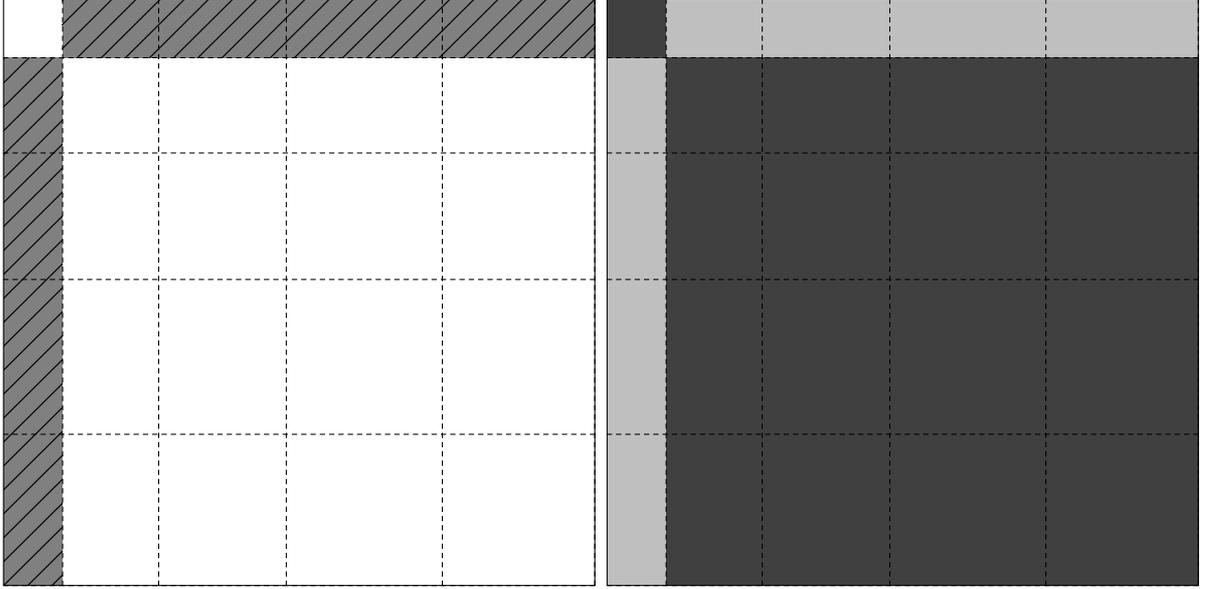


Abbildung 3.3: Links: Darstellung des 0:n-Generators in Besetzungszahldarstellung. Rechts: Der Hamiltonian während (grau) und nach (schwarz) der Integration der Flussgleichung.

die Dispersionsrelation kann durch Fouriertransformation der Einteilchenwechselwirkung gewonnen werden.

Ferner erhält der MKU-Generator die Bandstruktur des Hamiltonians. Treten in $H(0)$ keine Prozesse auf, die mehr als eine bestimmte Anzahl an Quasiteilchen erzeugen oder vernichten, bleibt diese Banddiagonalität während des Flusses unangetastet. Die Konvergenz wurde für das MKU-Generatorschema bewiesen, sofern ein Zustand minimaler Energie existiert³.

3.2.3 MKU-Varianten

Ausgehend von der Definition des MKU-Generatorschemas wurden in jüngster Zeit Varianten entwickelt, die die selektive Entkopplung tiefliegender Quasiteilchenräume ermöglichen. Der 0:n-Generator [FDU, Fis07] wird in Besetzungszahldarstellung definiert als

$$\hat{\eta}_{0:n}[H(\ell)] = H_0^+(\ell) - H_0^-(\ell), \quad (3.2.11)$$

wobei $H_0^+(\ell)$ alle Wechselwirkungsterme des Hamiltonians beinhaltet, die Quasiteilchen aus dem Vakuum erzeugen. Analog enthält $H_0^-(\ell)$ alle Wechselwirkungsterme, die die Vernichtung von Quasiteilchen in das Vakuum beinhalten. Es ist hervorzuheben, dass die Wirkung dieser Terme nicht allein auf das Vakuum beschränkt ist, sondern Auswirkungen auf Zustände mit beliebigen Quasiteilchenzahlen hat. Der 0:n-Generator bewirkt eine Entkopplung des Vakuumzustands von den höheren Teilchenräumen, so dass auch hier die Grundzustandsenergie

³Die Konvergenz ist nicht mehr gesichert, sofern ein trunkiertes System betrachtet wird (vergleiche Abschnitt 3.4).

abgelesen werden kann. Hierbei ist der Verlauf der Vakuumenergie $\langle 0 | H(\ell) | 0 \rangle$ bei dem 0:n- und dem MKU-Generatorschema identisch, sofern keine Trunkierungen vorgenommen werden [FDU].

Die Vorteile des 0:n-Generatorschemas gegenüber dem MKU-Generatorschema sind der günstigere numerische Aufwand für die Integration der Flussgleichung, da wesentlich weniger Terme in den Generator eingehen, und ferner eine verbesserte Stabilität der Rechnung⁴. Ein Nachteil des 0:n-Generatorschemas ist die hier fehlende Erhaltung der Banddiagonalität während des Flusses.

Neben dem 0:n-Generatorschema lassen sich auch andere Varianten formulieren, die eine wählbare Anzahl von tiefliegenden Quasiteilchenräumen separieren. So beinhaltet etwa der 1:n-Generator

$$\hat{\eta}_{1:n}[H(\ell)] = H_0^+(\ell) + H_1^+(\ell) - H_0^-(\ell) - H_1^-(\ell) \quad (3.2.12)$$

alle Wechselwirkungen, die (unter anderem) auf die Einteilchenzustände wirken, und separiert das Vakuum und den Einteilchenraum.

3.3 Bestimmung der Koeffizienten

Wird der Hamiltonian in Besetzungszahldarstellung notiert, lässt sich die Flussgleichung von einer Operatorgleichung in ein gewöhnliches Differentialgleichungssystem für die Koeffizienten umformen. Hierzu wird der Hamiltonian als

$$H(\ell) = \sum_k f_k(\ell) h_k \quad (3.3.13)$$

dargestellt. Die $f_k(\ell)$ sind die zugehörigen Koeffizienten der Basisoperatoren h_k . Verwendet man das MKU-Generatorschema oder dessen Varianten, so lässt sich der Generator als

$$\eta(\ell) = \sum_j \eta_j f_j(\ell) h_j \quad (3.3.14)$$

schreiben. Der Faktor η_j nimmt abhängig von der gewählten MKU-Variante und dem Operator h_j die Werte $\{1, 0, -1\}$ an. Die Flussgleichung schreibt sich damit als

$$\sum_i \partial_\ell f_i(\ell) h_i = \sum_{j,k} \eta_j f_j(\ell) f_k(\ell) [h_j, h_k] \quad (3.3.15)$$

$$=: \sum_{i,j,k} f_j(\ell) f_k(\ell) D_{ijk} h_i. \quad (3.3.16)$$

⁴Obwohl die Konvergenz des MKU-Generators für die exakte Lösung der Flussgleichung bewiesen ist, können in trunkierten Systemen Divergenzen auftreten.

Die Einträge des Differentialgleichungssystems D_{ijk} sind nach Ausführung des Kommutators durch Koeffizientenvergleich zu bestimmen.

Eine besondere Rolle kommt der Behandlung von Symmetrien zu, die sich in (bis auf ein Vorzeichen) gleichen Koeffizienten zu verschiedenen Basisoperatoren äußern. Für die Behandlung unendlicher Systeme ist die Nutzung der Translationssymmetrie unerlässlich. Die Symmetrienuutzung lässt sich durch Einführung eines Symmetriegruppenoperators $\hat{G} = \sum_G$ formalisieren [Rei06]. Für jede Symmetriegruppe von Termen muss genau ein Repräsentant eindeutig gewählt werden; die Anwendung von \hat{G} liefert zu diesem die volle Symmetriegruppe. Die Flussgleichung für Repräsentanten schreibt sich daher als

$$\sum_i \partial_\ell \tilde{f}_i(\ell) \hat{G} h_i = \sum_{j,k} \eta_j \tilde{f}_j(\ell) \tilde{f}_k(\ell) \left[\hat{G} h_j, \hat{G} h_k \right] \quad (3.3.17)$$

$$=: \sum_{i,j,k} \tilde{f}_j(\ell) \tilde{f}_k \tilde{D}_{ijk} h_i. \quad (3.3.18)$$

Diese Gleichung lässt sich analog durch Koeffizientenvergleich auswerten; allerdings müssen nur die Differentialgleichungen für die Repräsentanten berücksichtigt werden. Dies ermöglicht es, eine Summation über die Symmetriegruppe einzusparen. Die verbleibende Summation über die Symmetriegruppe im zweiten Argument des Kommutators bleibt allerdings bestehen und muss vollständig ausgewertet werden.

3.4 Trunkierung

Das Flussgleichungssystem (3.3.16) ist im Allgemeinen nicht geschlossen, da durch Ausführen des Kommutators im unendlichen System⁵ Wechselwirkung mit beliebig hoher Reichweite und unter Beteiligung beliebig vieler Quasiteilchen erzeugt werden können. Um das Differentialgleichungssystem zu schließen, müssen gezielt Wechselwirkungen vernachlässigt werden. Bei der S-CUT wird die Struktur des Hamiltonians zu Beginn durch ein Trunkierungsschema festgelegt; Terme, die das Trunkierungsschema nicht erfüllen, werden auf Null gesetzt.

Bei der hier vorgenommenen Trunkierung im Realraum orientiert sich die Trunkierung an der Anzahl der beteiligten Quasiteilchen und der Reichweite der Wechselwirkung. Für die Ableitung eines effektiven Niederenergiemodells für Systeme mit endlicher Anregungslücke und damit exponentiell abfallenden Korrelationen sind insbesondere Terme kurzer Reichweite und niedriger Quasiteilchenzahl wichtig. Bei den in dieser Arbeit verwendeten Trunkierungsschemata wird eine Mischung beider Aspekte vorgenommen; jeder Anzahl von Quasiteilchen wird eine maximale Reichweite zugeordnet, ab der trunkiert wird. Abbildung 3.4 veranschaulicht die Nomenklatur.

⁵Auch bei endlichen Systemen kann eine Trunkierung durch eine hohe Anzahl an Freiheitsgraden notwendig werden.

∞	∞	10	8	8
∞	10	8	8	6
10	8	8	6	6
8	8	6	6	3
8	6	6	3	3

Abbildung 3.4: Darstellung des 10-8-6-3-Trunkierungsschemas.

3.5 Observablen

Die unitäre Transformation $U(\ell)$ ist nicht allein auf den Hamiltonian beschränkt; auch andere Operatoren wie die Observable O werden durch den Fluss gemäß der Flussgleichung

$$O(\ell) = [\eta(\ell), O(\ell)] \quad (3.5.19)$$

transformiert. Eine Besonderheit besteht darin, dass in die Transformation der Observable der aus $H(\ell)$ anhand des Generatorschemas gebildete Generator $\eta(\ell)$ eingeht.

3.6 ROD

Um die Konvergenzgeschwindigkeit des Differentialgleichungssystems beurteilen zu können wird die verbleibende Nichtdiagonalität (*residual off-diagonality*, *ROD*) verwendet. Sie ist gemäß

$$\mathbf{ROD} = \sqrt{\sum_i |\eta_i f_i|^2} \quad (3.6.20)$$

definiert als die Wurzel der Summe der Betragsquadrate aller Koeffizienten des Generators in Besetzungszahldarstellung. In konvergierenden Rechnungen nimmt die ROD ab hinreichend

hohen Werten des Flussparameters exponentiell ab. Die absolute Höhe der ROD kann daher auch als Maß für die Geschwindigkeit der Konvergenz fungieren.

Teil II

Ergebnisse der Arbeit

4 Dimerisierte Heisenbergkette

Im vorliegenden Kapitel wird die CUT-Methode auf das Modell der dimerisierten Heisenbergkette mit besonderem Schwerpunkt auf der Untergittermagnetisierung im alternierenden Magnetfeld angewandt. Die Potentiale einer optimierten Basiswahl werden untersucht.

Zu Beginn wird die dimerisierte Heisenbergkette in einer Standardbasis behandelt; es werden der MKU- und der 0:n-Generator hinsichtlich Qualität, Rechenökonomie und Stabilität diskutiert. Grundzustandsenergie und Untergittermagnetisierung der Heisenbergkette werden für verschiedene Stärken der Interdimerkopplung und des alternierenden Magnetfeldes berechnet.

Im zweiten Abschnitt werden der Mischungswinkel zwischen Singulett- und z-Triplett-Zustand als neuer Variationsparameter zur Wahl der Basis eingeführt und die Auswirkungen auf Grundzustandsenergie, Konvergenz und Untergittermagnetisierung dargestellt.

Danach wird der optimale Winkel als stationärer Punkt der Grundzustandsenergie identifiziert. Die physikalischen Eigenschaften des Systems werden in der optimierten CUT ausgewertet und mit den vorhergehenden Resultaten verglichen.

4.1 Standardbasis

Der Hamiltonian der dimerisierten Heisenbergkette mit alternierendem Feld ist gegeben als

$$H = \sum_i J \left(\vec{S}_i^L \cdot \vec{S}_i^R + \lambda \vec{S}_i^R \cdot \vec{S}_{i+1}^L \right) - B \left(S_i^{R,z} - S_i^{L,z} \right) \quad \text{mit } J > 0. \quad (4.1.1)$$

Zur besseren Übersicht wird die Stärke der magnetischen Kopplung J auf 1 normiert; alle Energien und Feldstärken werden in Einheiten von J gemessen. Ebenso wird im Folgenden von Einsteins Summationskonvention Gebrauch gemacht und über doppelt vorkommende Indizes summiert.

$$H = \sum_i -\frac{3}{4}\mathbb{1} + t_i^\dagger t_i^\alpha \quad (4.1.2a)$$

$$+ \frac{1}{4}\lambda \left(t_i^\dagger + t_i^\alpha \right) \left(t_{i+1}^\dagger + t_{i+1}^\alpha \right) \\ + \frac{i}{4}\lambda \epsilon_{\alpha\beta\gamma} \left(\left(t_i^\dagger + t_i^\alpha \right) t_{i+1}^\dagger t_{i+1}^\gamma - t_i^\dagger t_i^\gamma \left(t_{i+1}^\dagger + t_{i+1}^\alpha \right) \right) \quad (4.1.2b)$$

$$+ \frac{1}{4}\lambda \left(t_i^\dagger t_i^\gamma t_{i+1}^\dagger t_{i+1}^\beta - t_i^\dagger t_i^\beta t_{i+1}^\dagger t_{i+1}^\gamma \right) \\ + B \left(t_i^\dagger + t_i^z \right) \quad (4.1.2c)$$

Ein Umschreiben in die zuvor vorgestellte Hardcore-Boson-Algebra der Triplonen liefert den Ausdruck (4.1.2); hierbei entspricht (4.1.2a) der inneren Dimerkopplung, (4.1.2b) der Kopplung zwischen verschiedenen Dimeren und (4.1.2c) der Ankopplung des alternierenden Magnetfeldes.

Der Hamiltonian weist drei Arten von Symmetrien auf, die zur Verringerung der Laufzeit des Programms ausgenutzt werden können:

1. algebraische Symmetrie: der Hamiltonian ist invariant gegen das Adjungieren; transponierte Terme besitzen komplex konjugierte Vorfaktoren.

2. geometrische Symmetrie: der Hamiltonian ist invariant gegen das Spiegeln¹ der Koordinaten ($i \rightarrow -i$) bei gleichzeitiger Vertauschung von linkem und rechtem Spin (letzteres entspricht dem Transponieren der Triplettoperatoren oder, in Kombination mit der Selbstadjungiertheit, dem komplex Konjugieren).

3. flavourartige Symmetrie: der Hamiltonian ist symmetrisch gegenüber einer Rotation im Spinraum. Ohne das symmetriebrechende Magnetfeld erhielte man die volle $SU(2)$ -Symmetrie, wodurch bis zu sechs Operatorkombinationen durch einen Repräsentanten beschrieben werden könnten. Durch die Anwesenheit des Magnetfeldes bleibt hiervon nur eine $U(1)$ -Symmetrie in der xy -Ebene des Spinraums.

Jede der genannten Symmetrien ermöglicht die Einsparung eines Faktors 2 hinsichtlich der Zahl der nötigen Repräsentanten, sofern ein Term die entsprechende Symmetrie nicht aufweist. Da speziell in weit gefassten Trunkierungsschemata unsymmetrische Terme die überwiegende Mehrheit stellen, kann tatsächlich nahezu der volle Faktor 8 eingespart werden, was die Integration der Flussgleichung in erheblichem Umfang beschleunigt.

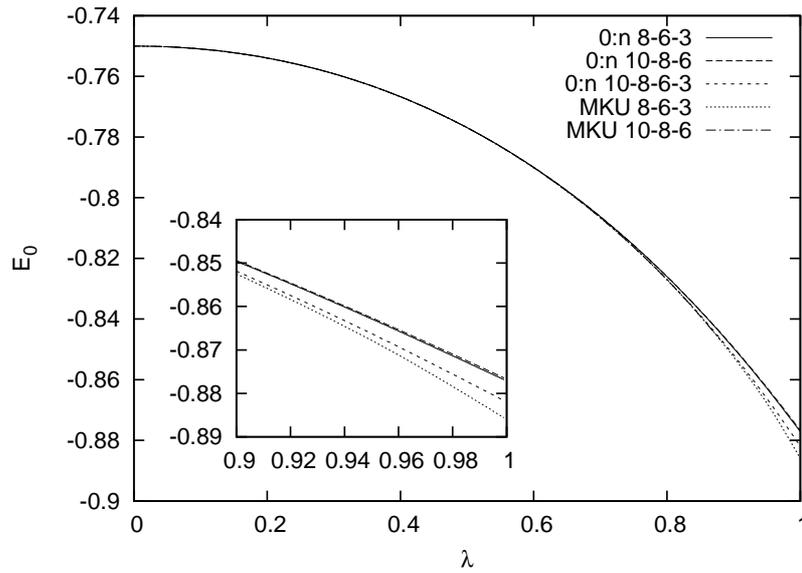


Abbildung 4.1: Berechnete Grundzustandsenergie pro Dimer E_0 in Abhängigkeit von der Interdimerkopplung λ für den MKU- und den 0:n-Generator mit verschiedenen Trunkierungsschemata.

Generator	Trunkierung	Repräsentanten	Einträge	$\frac{\Delta E_0}{E_0} (\lambda = 1)$
0:n	8-6-3	4.489	247.456	1,033 %
0:n	10-8-6	53.145	2.431.408	1,080 %
0:n	10-8-6-3	113.058	36.720.000	0,485 %
MKU	8-6-3	4.464	1.486.694	0,035 %
MKU	10-8-6	59.120	69.888.047	-

Tabelle 4.1: Anzahl der Repräsentanten im Hamiltonian nach dem Fluss, die Größe des Differentialgleichungssystems in Einträgen sowie die Abweichung vom analytischen Referenzwert bei $\lambda = 1$ für den 0:n- und den MKU-Generator bei verschiedenen Trunkierungen. In allen Fällen wurden Adjungieren, spiegeln und $U(1)$ -Spinsymmetrie benutzt, um die Anzahl von Repräsentanten und Einträgen im DGL-System zu reduzieren. Im Fall des MKU-Generators mit 10-8-6-Trunkierung divergierte die Rechnung bei $\lambda = 1$.

4.1.1 Generatoren & Trunkierung

Die S-CUT-Methode lässt durch die Wahlfreiheit des Trunkierungsschemas hinsichtlich der Reichweite der Wechselwirkungen im selbstähnlichen Hamiltonian einen breiten Variationsraum zur Optimierung von Geschwindigkeit, Qualität und Stabilität der Rechnung zu. Erfahrungsgemäß verbessert ein weit gefasstes Trunkierungsschema, das viele Repräsentanten zulässt, die Qualität der Ergebnisse, benötigt allerdings auch deutlich mehr Rechenzeit. Damit verbunden ist auch die Wahl des Generatorschemas, denn auch hier müssen Qualität der Ergebnisse und Rechenökonomie gegeneinander abgewogen werden.

¹Die Spiegelung am Nullpunkt ist in Kombination mit der Translationssymmetrie äquivalent zur Spiegelung an einem beliebigen Gitterplatz.

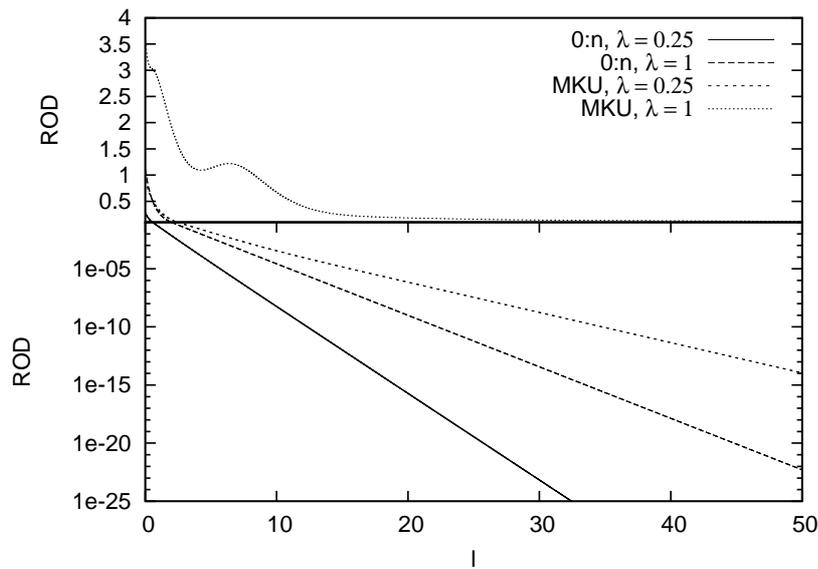


Abbildung 4.2: Verlauf der verbleibenden Nichtdiagonalität (ROD) während des Flusses in Abhängigkeit des Flussparameters ℓ für den MKU- und den 0:n-Generator. Verglichen werden ein gut konvergierender ($\lambda = 0,25$) und ein schlecht konvergierender Fall ($\lambda = 1$) ohne Magnetfeld.

Während das MKU-Generatorschema eine Ordnung aller Quasiteilchenräume nach ihrer Energie durchführt, wurde das 0:n-Generatorschema speziell dafür entwickelt, nur den Grundzustand zu separieren. Jede der in den 0:n-Generator eingehenden Wechselwirkungen bewirkt unter anderem die Erzeugung von Quasiteilchen aus und deren Vernichtung in das Vakuum, während der MKU-Generator zusätzlich auch alle höheren quasiteilchenzahlverletzenden Prozesse beinhaltet. Daher ist zu erwarten, dass bei der Auswertung des Kommutators mehr Terme generiert werden und das dabei erhaltene Differentialgleichungssystem bei gleicher Trunkierung erheblich dichter besetzt sein wird. Tatsächlich wirkt sich dieser Effekt nicht ganz so dramatisch aus, da das MKU-Generatorschema die Banddiagonalität erhält und daher bestimmte Terme im Vorhinein ausgeschlossen werden können. Dennoch zeigt ein Blick auf Tabelle 4.1.1, dass das MKU-DGL-System bei gleicher Trunkierung ein Vielfaches der Einträge des 0:n-Systems besitzt. Da Rechenzeit und Speicherbedarf zur numerischen Lösung der Flussgleichung nahezu proportional zur Anzahl der Einträge im Differentialgleichungssystem sind, stellt das 0:n-Generatorschema deutlich geringere Ressourcenanforderungen, insbesondere bei weiter gefassten Trunkierungen.

Abbildung 4.1 zeigt die Abhängigkeit der berechneten Grundzustandsenergie von der Interdimerkopplung λ für verschiedene Generator- und Trunkierungsschemata. Da wachsende Werte von λ eine zunehmende Delokalisierung bedeuten, ist dieser Bereich für die S-CUT schwieriger zu behandeln. Die Trunkierung im Realraum macht sich durch stärkere Trunkierungsfehler bemerkbar. Entsprechend sind die Werte der berechneten Grundzustandsenergie für niedrige und mittlere Werte von λ kaum voneinander zu unterscheiden. Erst bei hohen λ zeigen sich sichtbare Abweichungen. Ein Vergleich mit dem für $\lambda = 1$ aus analytischer Rechnung [Hul38]

bekanntem exaktem Wert der Grundzustandsenergie pro Dimer von $E_0 = \frac{1}{2} - 2 \ln 2$ [Hul38] zeigt die in Tabelle 4.1.1 aufgeführten Abweichungen. Bemerkenswert ist der sehr genaue Wert des MKU-Generatorschemas bei einer 8-6-3-Trunkierung mit einer Abweichung von nur 0,035%, was vom 0:n-Generatorschema auch bei deutlich weiteren Trunkierungen nicht erreicht wird. Allerdings muss betont werden, dass eine gute² Trunkierung zwar einen guten Wert der Grundzustandsenergie erwarten lässt; der Umkehrschluss, eine einzelne sehr gut berechnete Grundzustandsenergie käme bereits einem sehr guten effektiven Modell gleich, ist jedoch nicht zutreffend.

Das dritte wichtige Kriterium ist die Stabilität der Konvergenz. In Abbildung 4.2 ist die verbleibende Nichtdiagonalität für die beiden Generatorschemata bei einer 8-6-3-Trunkierung für den leicht zu berechnenden Fall $\lambda = 0,25$ und den schwierigen Fall $\lambda = 1$ wiedergegeben; man erkennt deutlich die wesentlich schnellere Konvergenz für schwache Interdimerkopplungen. Im direkten Vergleich besitzt das 0:n-Generatorschema klare Vorteile; da nicht der komplette Fockraum umgeordnet werden muss, startet die Nichtdiagonalität bei niedrigeren Werten und konvergiert wesentlich schneller als beim MKU-Generator. Dies wird insbesondere bei $\lambda = 1$ deutlich, wo die ROD bei $\ell = 20$ einen Unterschied von 20 Größenordnungen aufweist. Im Bereich von $\ell = 8$ findet sich weiterhin ein Bereich kurzzeitig wieder ansteigender ROD. Dies wird als Folge von Umordnungsprozessen interpretiert. In kritischen Fällen kann dies sogar zu einer Divergenz der trunkierten Rechnung führen; dies wurde bei der 10-8-6-Trunkierung im Bereich ab einer Interdimerkopplung von 0,92 beobachtet.

Insgesamt wurde für die folgende Untersuchung dem 0:n-Generatorschema der Vorzug gegenüber dem MKU-Generatorschema gegeben, da es eine bessere Konvergenz und Stabilität aufweist. Als Trunkierungsschema wird im Folgenden das 8-6-3-Schema verwendet. Es liefert in weiten Bereichen des Parameterbereichs nahezu identische Resultate wie umfassendere Schemata und ermöglicht durch seine sehr hohe Rechenökonomie die Untersuchung von breiten Parameterbereichen. Dadurch ergibt sich ein guter Ausgangspunkt für die Optimierung durch die angepasste Basiswahl.

4.1.2 Grundzustandsenergie

Da das 0:n-Generatorschema (wie auch MKU) die Eigenschaft hat, dass im abgeleiteten effektiven Modell im Limes $\ell \rightarrow \infty$ der Vakuumzustand vom restlichen Fockraum separiert wird und ferner der niedrigsten Energie zugeordnet wird, lässt sich die Grundzustandsenergie durch Integrieren der Flussgleichung direkt bestimmen; sie entspricht dann direkt dem Vakuumserwartungswert des Hamiltonians $\langle 0 | H(\infty) | 0 \rangle$. Weil hierbei der Hamiltonian in der Basis normalgeordneter Operatoren dargestellt wurde, liefert nur ein einziger Term einen Bei-

²Dabei muss ein weiter gefasstes Trunkierungsschema nicht automatisch für das Problem besser geeignet sein. Eine systematische Qualitätsaussage ist hierbei ein schwieriges Problem, auf das in den nächsten Kapiteln ausführlich eingegangen wird.

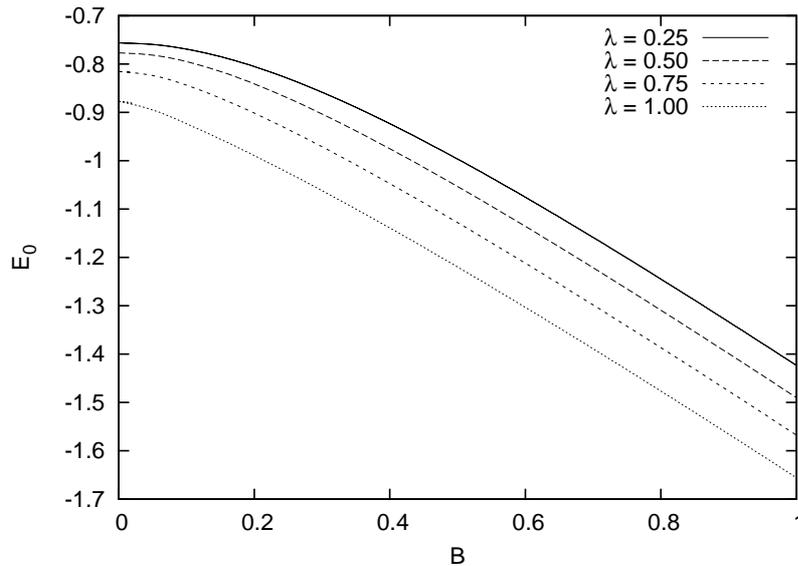


Abbildung 4.3: Berechnete Grundzustandsenergie pro Dimer E_0 in Abhängigkeit von der Stärke des alternierenden Feldes B bei verschiedenen Interdimerkopplungsstärken für den 0:n-Generator nach dem 8-6-3-Trunkierungsschema.

trag, nämlich der Identitätsoperator $\mathbb{1}$. Dessen Vorfaktor ist somit identisch mit der gesuchten Grundzustandsenergie³ und kann direkt abgelesen werden.

In Abbildung 4.1 wurde bereits die Grundzustandsenergie pro Gitterplatz in Abhängigkeit der Interdimerkopplung dargestellt; sie zeigt beginnend mit der Energie des isolierten Heisenberg-Dimers bei $\lambda = 0$ eine weitere Absenkung bis zum Punkt $\lambda = 1$, der der homogenen Heisenbergkette entspricht. Der Parameterbereich ab $\lambda > 1$ lässt sich über die Transformation $J \rightarrow \lambda J$, $\lambda \rightarrow \frac{1}{\lambda}$ auf den betrachteten Bereich abbilden und wird daher nicht weiter diskutiert.

Die Abhängigkeit der Grundzustandsenergie von einem alternierenden Magnetfeld B ist in Abbildung 4.3 wiedergegeben. Die Grundzustandsenergie beginnt mit waagerechter Tangente und senkt sich bei allen Kopplungsstärken mit zunehmendem Magnetfeld ab; sie verläuft für hohe Magnetfeldstärken ($B \approx 1$) nahezu linear. Dieses Verhalten entspricht einer induzierten Untergittermagnetisierung, die bei hohen Feldstärken in die Sättigung übergeht.

4.1.3 Untergittermagnetisierung

Zur Bestimmung der Untergittermagnetisierung (im Grundzustand) führen zwei prinzipiell äquivalente Wege:

³Aufgrund der Translationssymmetrie wird der Identitätsoperator als Summe über Identitätsoperatoren auf jedem Gitterplatz dargestellt; der Koeffizient des dazugehörigen Repräsentanten gibt daher die Grundzustandsenergie pro Gitterplatz wieder.

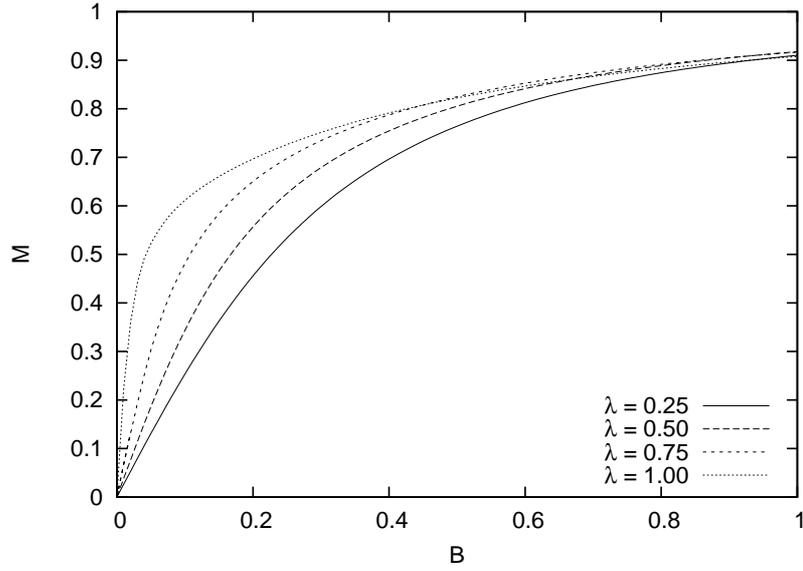


Abbildung 4.4: Berechnete Untergittermagnetisierung pro Dimer M in Abhängigkeit von der Stärke des alternierenden Feldes B bei verschiedenen Interdimerkopplungsstärken für den 0:n-Generator nach dem 8-6-3-Trunkierungsschema.

- Ableiten der inneren Energie des Systems nach der Feldstärke.
- direktes Bilden des Grundzustandserwartungswertes $\langle \psi | \sum_i (S_i^{R,z} - S_i^{L,z}) | \psi \rangle$.

Für Letzteres müsste der Operator $\hat{M} = \sum_i S_i^{R,z} - S_i^{L,z}$ gemäß der Flussgleichung für Observablen

$$\partial_t \hat{M}(\ell) = [\eta(\ell), \hat{M}(\ell)] \quad (4.1.3)$$

transformiert werden.

Wie schon zuvor bei der Grundzustandsenergie liefert dann der Koeffizient des Identitätsoperators die Untergittermagnetisierung des Grundzustands. Zusätzlich zu den Trunkierungsfehlern am Hamiltonian, durch die eine Diskrepanz zwischen dem transformierten Vakuum und dem exakten Grundzustand des Systems auftreten wird, muss bei dieser Vorgehensweise auch für die Transformation der Observable ein Trunkierungsschema verwendet werden.

In dieser Arbeit wird stattdessen die Untergittermagnetisierung über die Ableitung der inneren Energie zu

$$\mathcal{M}(\lambda, B, T) = - \left. \frac{\partial U(\lambda, B, T)}{\partial B} \right|_{\lambda, T} \quad (4.1.4)$$

gewonnen. Am absoluten Nullpunkt $T = 0$ befindet sich das System im Grundzustand und die innere Energie U ist gerade die Grundzustandsenergie. Durch Ableiten der Grundzustandsenergie pro Dimer E_0 nach der Stärke des alternierenden Magnetfelds wird also gerade die Untergittermagnetisierung pro Dimer bei $T = 0$ berechnet.

In Abbildung 4.4 ist die so berechnete Untergittermagnetisierung pro Dimer für verschiedene Werte der Interdimerkopplung in Abhängigkeit von der alternierenden Magnetfeldstärke dargestellt. In allen Fällen beginnt die Magnetisierungskurve im Nullpunkt (keine spontane Magnetisierung), steigt mit der Feldstärke und geht langsam in eine Sättigung über; bei $B=1$ werden bereits $> 90\%$ des theoretischen Maximums erreicht⁴. Der Anstieg der Magnetisierung zu Beginn wird mit zunehmender Interdimerkopplung immer ausgeprägter; dies ist einleuchtend, da wachsende antiferromagnetische Kopplung zwischen den Dimeren die Ausbildung einer Untergittermagnetisierung erleichtert. Im Fall $\lambda = 1$ ist das System kritisch, man erwartet aus der analytischen Lösung [MTBB81] im Ursprung einen senkrechten Anstieg der Magnetisierung. Hier liefert die CUT zwar eine hohe, aber noch endliche Steigung, da Prozesse unendlicher Reichweite durch die Trunkierung im Ortsraum nicht erfasst werden können.

4.2 Gedrehte Basis

Mit dem MKU- und dem 0:n-Generator wird der Hamiltonian des Systems sukzessive in eine Form gebracht, in der das Vakuum dem Grundzustand entspricht. Obwohl im Prinzip jede Basis geeignet ist, kann ein bereits gut gewählter Ausgangspunkt die Qualität und Geschwindigkeit der Rechnung spürbar verbessern. DUSUEL und UHRIG verwendeten in ihrer Studie des quartisch gestörten harmonischen Oszillators [DU04] die mit einem Variationsparameter σ modifizierten Eigenzustände des ungestörten harmonischen Oszillators. Hierbei zeigten sie, dass stationäre Punkte der Grundzustandsenergie und der Energielücke besonders gut die exakten Lösungen des Problems wiedergeben, und formulierten dies als ein Variationsprinzip⁵ für die CUT-Methode.

Die Abhängigkeit der Ergebnisse von der Wahl der Basis erscheint zunächst paradox. In einer exakten Rechnung sollte dies auch niemals vorkommen; der Grund hierfür liegt tatsächlich bei den eingehenden Näherungen: der Trunkierung und numerischen Fehlern bei der Integration. Die Optimierung der Basis hat hierbei zwei Einflüsse:

- veränderter Startpunkt: befindet sich der Hamiltonian durch eine vorangestellte Basis-transformation bereits nahe an der diagonalen Gestalt, muss der Hamiltonian durch die CUT kaum noch verändert werden. Also werden die hierbei auftretenden Fehler klein gehalten.

⁴Der Untergittermagnetisierung 1 entspricht gerade vollständig ausgerichteten Spins.

⁵Von der Praxis, stationäre Punkte mit optimal gewählten Parametern zu identifizieren, wird im Rahmen von Mean-Field-Rechnungen häufig Gebrauch gemacht.

- angepasste Trunkierung: das Wirken des Trunkierungsschema selbst ist explizit von der verwendeten Basis abhängig. Wird eine Basis gewählt, in der die im Fluss auftretenden Terme eine kompaktere Gestalt haben, reduziert sich der Trunkierungsfehler.

4.2.1 Heisenberg-Dimer im Magnetfeld

Den Ausgangspunkt für die CUT-Rechnungen des letzten Abschnitts bildeten die Basis der Eigenzustände einer Kette isolierter Dimere ohne Magnetfeld. Durch das Anlegen eines äußeren Feldes wird in der Kette eine Untergittermagnetisierung ausgebildet, während der Referenzzustand des Singulettproduktzustands selbst keine Magnetisierung aufweist. Als einfachste Untersuchungsmöglichkeit eines Referenzzustands mit Untergittermagnetisierung bietet sich hierfür das isolierte Dimer im alternierenden Feld an. Der Hamiltonian ergibt sich zu

$$\begin{aligned} H &= \vec{S}^L \cdot \vec{S}^R + B (S^{L,z} - S^{R,z}) \\ &= -\frac{3}{4} \mathbb{1} + t^{\alpha\dagger} t^\alpha + B (t^{\dagger z} + t^z). \end{aligned} \quad (4.2.5)$$

Dieser Hamiltonian lässt sich analytisch diagonalisieren. Die Eigenzustände sind gegeben durch

$$\begin{aligned} |\tilde{s}(\theta)\rangle &= \cos \theta |s\rangle + \sin \theta |z\rangle \\ |\tilde{x}(\theta)\rangle &= |x\rangle \\ |\tilde{y}(\theta)\rangle &= |y\rangle \\ |\tilde{z}(\theta)\rangle &= \cos \theta |z\rangle - \sin \theta |s\rangle \end{aligned} \quad (4.2.6)$$

mit dem Drehwinkel

$$\tan \theta = \frac{B}{\sqrt{1 + B^2}}. \quad (4.2.7)$$

Die Grundzustandsenergie des Dimers beträgt

$$E_0 = -\frac{1}{4} - \frac{1}{2} \sqrt{1 + 4B^2} \quad (4.2.8)$$

und die Untergittermagnetisierung gegenüber dem alternierenden Feld

$$M = -\frac{dE_0}{dB} = \frac{2B}{\sqrt{1+4B^2}}. \quad (4.2.9)$$

Das Verhalten des Dimers im alternierenden Feld lässt sich damit recht einfach charakterisieren:

- Ohne Feld tritt die bekannte Singulett-Triplettstruktur auf. Der Winkel θ hat den Wert 0 und die Untergittermagnetisierung verschwindet.
- Bei wachsendem Feld enthält der Grundzustand immer stärkere Anteile des Triplettzustands $|z\rangle$, die Untergittermagnetisierung wächst mit zunehmendem Feld an.
- Im Grenzfall unendlich hoher Feldstärke wird das System bei einem Mischungswinkel von $\theta = \frac{\pi}{4}$ in den Néel-geordneten Zustand $\frac{|s\rangle+|z\rangle}{\sqrt{2}} = |\uparrow\downarrow\rangle$ gezwungen⁶. Die Untergittermagnetisierung sättigt bei 1.

Um einen möglichst günstigen Ausgangspunkt für die CUT im Falle der dimerisierten Heisenbergkette zu gewinnen, bietet es sich daher an, bereits mit einer um einen Winkel θ gedrehten Basis zu beginnen. Es ist davon auszugehen dass sich der (noch unbestimmte) optimale Winkel durch die Interdimerkopplung verschiebt. Wir werden θ als Variationsparameter nutzen.

Der Übergang zu einer gedrehten Basis bietet noch eine zusätzliche Perspektive für die Verallgemeinerung in zwei Dimensionen:

Während in der Kette eine Untergittermagnetisierung nur durch ein äußeres, symmetriebrechendes Feld hervorgerufen wird, tritt diese in zwei Dimensionen bereits ohne Feld spontan auf [Sac99]. Sowohl das Triplettvakuum als auch der Starthamiltonian selbst sind $SU(2)$ -symmetrisch; daher würde eine CUT-Rechnung stets auch auf einen symmetrischen Vakuumzustand führen und nie den tatsächlichen Grundzustand erreichen (dieser liegt dagegen in einem entarteten Unterraum).

Die Einführung einer gedrehten Basis kann dieses Problem umgehen, da hierbei die Wahl des Referenzzustands bereits die Symmetriebrechung unterstützt.

⁶Entsprechend führt eine Feldstärke $B = -\infty$ auf einen Mischungswinkel von $-\frac{\pi}{4}$ und den Zustand $|\downarrow\uparrow\rangle$.

4.2.2 Gestalt der Operatoren

Durch den Wechsel der lokalen Basis werden der Singulett- und der z-Triplettzustand durch eine unitäre Transformation

$$\begin{aligned}
 U(\theta) : \quad & |s\rangle \rightarrow |\tilde{s}\rangle = \cos\theta |s\rangle + \sin\theta |z\rangle \\
 & |x\rangle \rightarrow |\tilde{x}\rangle = |x\rangle \\
 & |y\rangle \rightarrow |\tilde{y}\rangle = |y\rangle \\
 & |z\rangle \rightarrow |\tilde{z}\rangle = \cos\theta |z\rangle - \sin\theta |s\rangle
 \end{aligned} \tag{4.2.10}$$

mit einander gemischt ⁷. Die gedrehten Triplettzustände können erneut als Quasiteilchenanregungen des Referenzzustands $|\tilde{s}\rangle$ aufgefasst werden; die entsprechenden gedrehten Erzeugungsoperatoren ergeben sich dabei zu

$$\begin{aligned}
 \mu^{z\dagger} &:= |\tilde{z}\rangle \langle \tilde{s}| = \cos^2\theta |z\rangle \langle s| - \sin^2\theta |s\rangle \langle z| + \sin\theta \cos\theta (|z\rangle \langle z| - |s\rangle \langle s|) \\
 &= \cos^2\theta t^{z\dagger} - \sin^2\theta t^{z^z} + \sin\theta \cos\theta (t^{x\dagger}t^x + t^{y\dagger}t^y + 2t^{z\dagger}t^z - \mathbb{1}) \\
 \mu^{x\dagger} &:= |\tilde{x}\rangle \langle \tilde{s}| = \cos\theta t^{x\dagger} + \sin\theta t^{x\dagger}t^z \\
 \mu^{y\dagger} &:= |\tilde{y}\rangle \langle \tilde{s}| = \cos\theta t^{y\dagger} + \sin\theta t^{y\dagger}t^z.
 \end{aligned} \tag{4.2.11}$$

Die entsprechenden Vernichtungsoperatoren ergeben sich durch Adjungieren. Man beachte insbesondere, dass der Basiswechsel Auswirkungen auf alle drei Triplonpolarisationen nach sich zieht, da sich das gemeinsame Vakuum geändert hat.

Unverändert durch den Basiswechsel bleibt die Bedingung

$$|\tilde{s}\rangle \langle \tilde{s}| + |\tilde{x}\rangle \langle \tilde{x}| + |\tilde{y}\rangle \langle \tilde{y}| + |\tilde{z}\rangle \langle \tilde{z}| = \mathbb{1}. \tag{4.2.12}$$

Ferner genügen auch die gedrehten Triplonoperatoren wieder der Hardcore-Algebra

$$[\mu_i^{\alpha\dagger}, \mu_j^\beta] = \delta_{ij} \left(\mu_i^{\alpha\dagger} \mu_i^\beta - \delta_{\alpha\beta} \left(\mathbb{1} - \mu_i^{\gamma\dagger} \mu_i^\gamma \right) \right). \tag{4.2.13}$$

Hierbei wurde die Erweiterung der in der lokalen Basis wirkenden Operatoren μ und μ^\dagger zu an Platz i im ausgedehnten System wirkenden Operatoren μ_i und μ_i^\dagger vorweggenommen.

⁷Vergleiche hierzu [Koe02,RNM⁺08]

4.2.3 Variation des Drehwinkels

Es ist erkennbar, dass die Parametrisierung der neuen Basis 2π -periodisch im Drehwinkel ist. Tatsächlich werden alle physikalischen Eigenschaften sogar eine π -Periodizität aufweisen, da hierbei nur ein reiner Phasenfaktor -1 anfällt. Der physikalisch interessante Bereich für $B \geq 0$ reduziert sich nochmals auf $0 \leq \theta \leq \frac{\pi}{4}$; hier geht der Referenzzustand vom reinen Singulett-Zustand in den Néel-geordneten Zustand über, wie er sich im Grenzfall unendlich hoher alternierender Magnetfeldstärken als Grundzustand ergibt. Über diesen Winkel hinaus werden immer größere Anteile des z-Triplettzustands in den Referenzzustand eingebracht; so entspricht bei einem Winkel von $\theta = \frac{\pi}{2}$ dem gedrehten Vakuum in der Standardbasis eine globale Anregung von Triplonen auf jedem Gitterplatz, was als ein energetisch sehr hoch liegender Zustand einen ausgesprochen schlechten Startpunkt für eine CUT-Rechnung darstellt⁸.

4.2.3.1 Grundzustandsenergie

In den Abbildungen 4.5 und 4.6 ist die Abhängigkeit der berechneten Grundzustandsenergie von der gewählten Basis aufgeführt. Die Abhängigkeit ist erwartungsgemäß nur gering und zeigt Schwankungen im Bereich von 10^{-4} bis 10^{-6} ; es gibt jedoch stets ein ausgeprägtes Minimum in der berechneten Grundzustandsenergie. Es liegt bei verschwindendem Feld bei der ungedrehten Basis und verschiebt sich mit zunehmender Feldstärke systematisch zu höheren Winkeln hin.

Die Abhängigkeit der Grundzustandsenergie vom Drehwinkel lässt sich auch über den physikalisch relevanten Bereich bis $\frac{\pi}{4}$ fortsetzen; als einzig nennenswerte Auffälligkeit zeigt sich hierbei ein deutliches Ausbrechen aus dem üblichen Schwankungsbereich bei einem Versatz von $\approx \frac{\pi}{2}$ gegenüber dem beobachteten Minimum. Dies liefert ein recht anschauliches Bild: dem optimalen Winkel entsprechen ein Vakuumzustand und ein Trunkierungsschema, die dem realen Grundzustand offenbar vergleichsweise nahe kommen. Eine Drehung um $\frac{\pi}{2}$ bedeutet, dass der eigentlich optimale Vakuumzustand gegen einen energetisch hochliegenden Zustand getauscht wird.

4.2.3.2 Konvergenzgeschwindigkeit

Die Konvergenzgeschwindigkeit hängt ausgesprochen stark von der Basiswahl ab; ein günstig gewählter Startpunkt kann die verbleibende Nichtdiagonalität um 3 Größenordnungen ($\ell = 20$) und mehr gegenüber der ungedrehten Basis verbessern; das Minimum ist sehr scharf ausgeprägt

⁸Dies gilt, solange kein Magnetfeld anliegt, denn wie der optimale Winkel verschiebt sich auch der ungeeignete Winkel mit der Magnetfeldstärke. Im Grenzfall des unendlich starken alternierenden Magnetfeldes mit Grundzustand $|\dots \uparrow \downarrow \dots\rangle$ (entsprechend einem Drehwinkel von $\frac{\pi}{4}$) sind die Winkel 0 und $\frac{\pi}{2}$ gleichbedeutend; der schlechtestmögliche Startpunkt ist der Zustand $|\dots \downarrow \uparrow \dots\rangle$ (entsprechend einem Drehwinkel von $\frac{3}{4}\pi$).

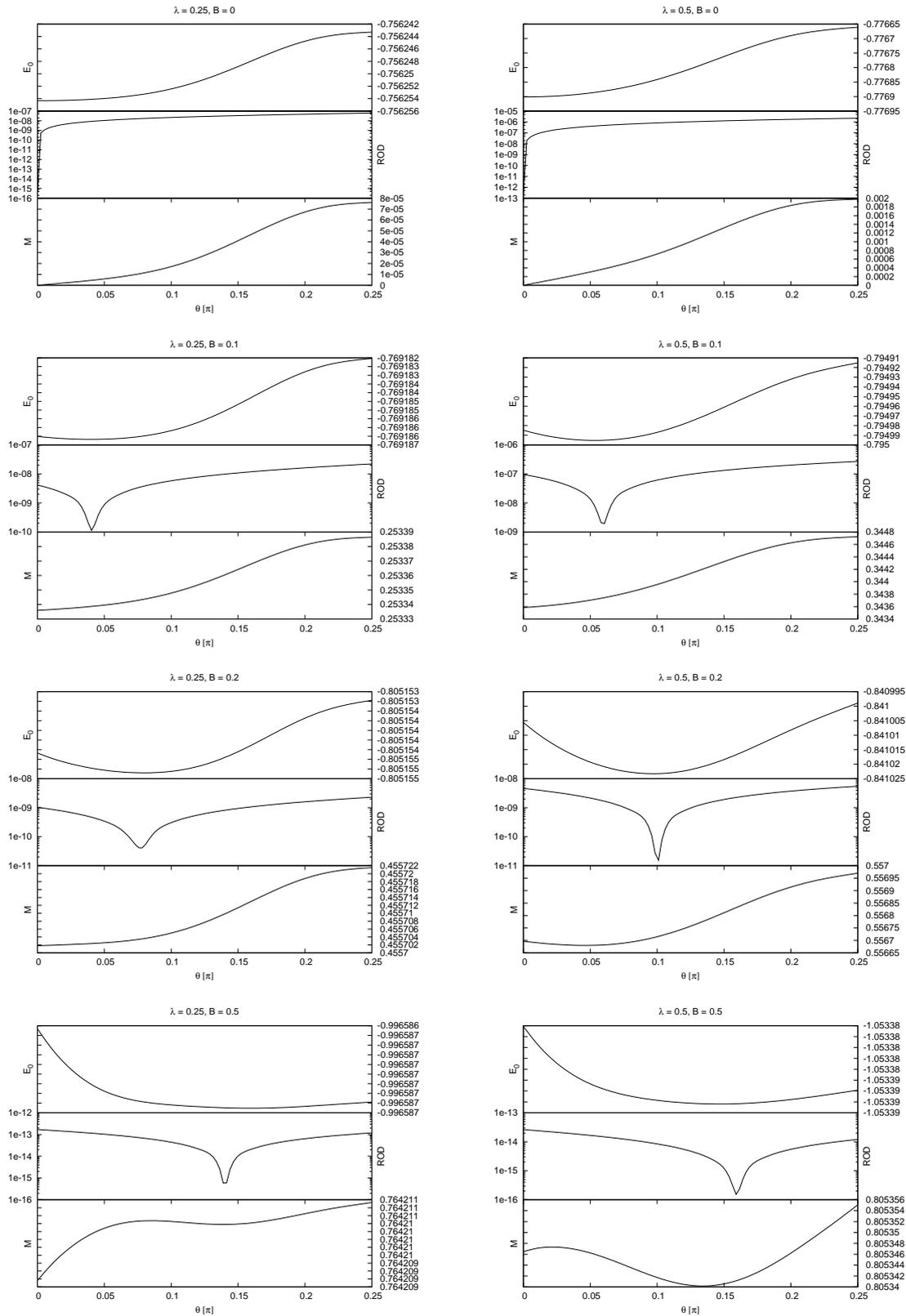


Abbildung 4.5: Abhängigkeit der Grundzustandsenergie pro Dimer E , der verbleibenden Nichtdiagonalität (ROD) bei $\ell = 20$ und Untergittermagnetisierung pro Dimer M für verschiedene alternierende Feldstärken B und Interdimerkopplungen λ vom Drehwinkel θ der Basistransformation. Verwendet wurde der 0:n-Generator in einer 8-6-3-Trunkierung.

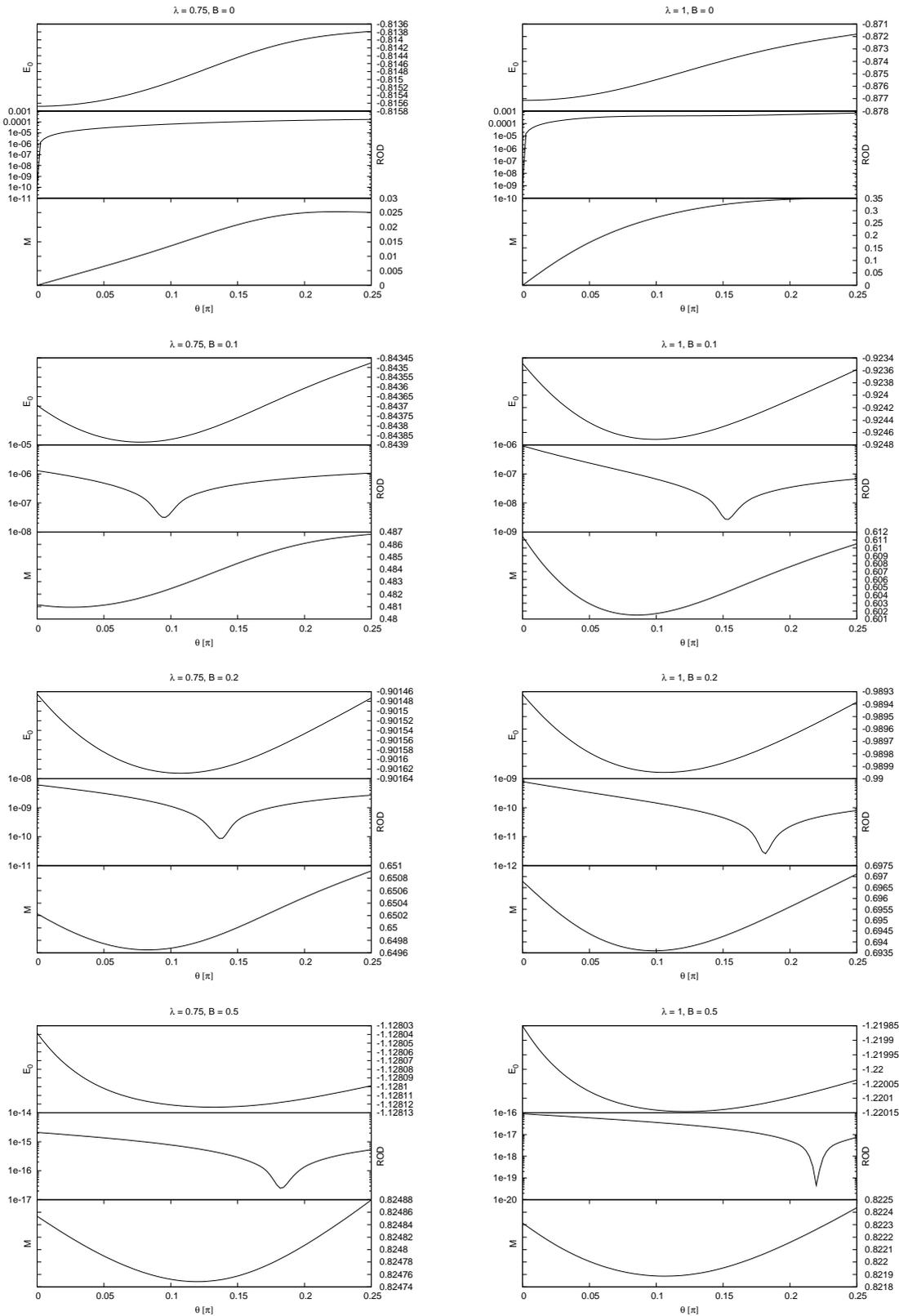


Abbildung 4.6: Abhängigkeit der Grundzustandsenergie pro Dimer E , der verbleibenden Nichtdiagonalität (ROD) $\ell = 20$ und Untergittermagnetisierung pro Dimer M für verschiedene alternierende Feldstärken B und Interdimerkopplungen λ vom Drehwinkel θ der Basistransformation. Verwendet wurde der 0:n-Generator in einer 8-6-3-Trunkierung.

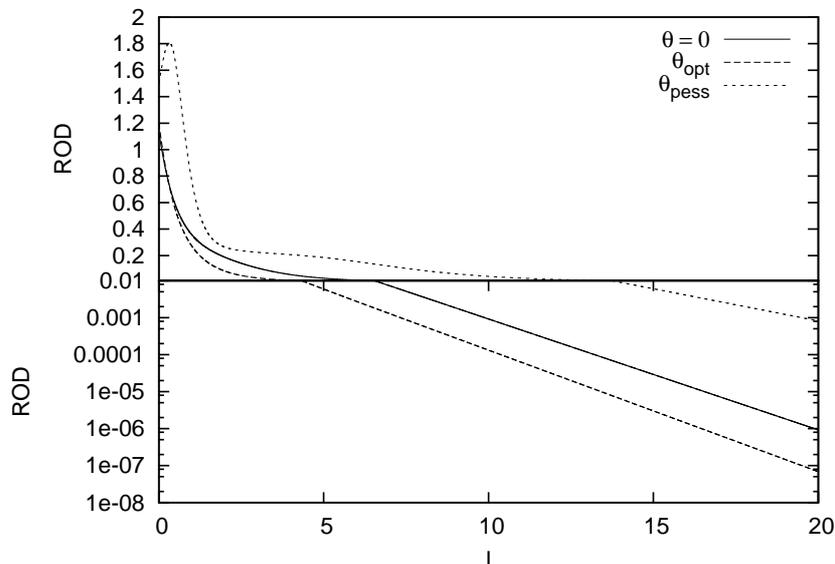


Abbildung 4.7: Vergleich der verbleibenden Nichtdiagonalität während des Flusses für $\lambda = 1$ und $B = 0, 1$. Aufgeführt sind die Standardbasis mit $\theta = 0$, der Winkel minimaler Grundzustandsenergie θ_{opt} sowie der demgegenüber um $\frac{\pi}{2}$ verschobene Winkel θ_{pess} .

und gut ablesbar. Bei schwacher Interdimerkopplung fällt es mit dem Minimum der Grundzustandsenergie sehr gut zusammen; bei starker Interdimerkopplung verlagert es sich dagegen weiter zu höheren Winkeln.

Dies ist ein auffälliger Unterschied zum Verhalten trunkierungsfreier Systeme. Im Rahmen einer Voruntersuchung wurde die Variation des Drehwinkels in einem 4-Dimer-System behandelt; als kleines, endliches System ließen sich die Flussgleichungen ohne Trunkierung untersuchen. Dennoch zeigten sich auch hier schwache Abhängigkeiten der Grundzustandsenergie ($\leq 10^{-6}$) und ROD vom Drehwinkel auf Grund von Unsicherheiten durch die numerische Integration. Im Gegensatz zum unendlichen System befanden sich die stationären Punkte von Grundzustandsenergie und ROD in allen untersuchten Fällen lediglich im Abstand von $\approx 10^{-3}$ bei einander. In beiden Fällen ist offenbar die Nähe des gewählten Startpunktes zum tatsächlichen Grundzustand ausschlaggebend.

Im unendlichen trunkierten System ist die Eignung des Startpunktes für die Konvergenzgeschwindigkeit ebenfalls ausschlaggebend. Im Fall der Grundzustandsenergie zeigt jedoch offenbar ebenfalls das Trunkierungsschema⁹ deutliche Auswirkungen und führt dazu, dass sich der stationäre Punkt der Grundzustandsenergie bei einem deutlich abweichenden Winkel befinden kann.

Abbildung 4.7 zeigt den Verlauf der verbleibenden Nichtdiagonalität (ROD) ohne Drehwinkel,

⁹Die Wahl der Basis beeinflusst direkt die Trunkierung.

für den Winkel minimaler Grundzustandsenergie θ_{opt} und den um $\frac{\pi}{2}$ verschobenen Winkel θ_{pess} . Obwohl nicht identisch mit dem ROD-Minimum zeigt θ_{opt} eine sichtlich verbesserte Konvergenz gegenüber dem Normalfall, wogegen die Konvergenz bei θ_{pess} erwartungsgemäß deutlich schlechter ist. Gut erkennbar ist dabei die gleich zu Beginn ansteigende ROD; diese liefert einen Hinweis auf Umordnungsprozesse im Hamiltonian, die durch das künstliche Vertauschen des optimalen Vakuumstartwertes mit der globalen Anregung von \tilde{z} -Triplonen nötig werden.

4.2.3.3 Untergittermagnetisierung

Die Abhängigkeit der berechneten Magnetisierung vom Drehwinkel zeigt kein einheitliches Verhalten. Häufig findet sich in direkter Nähe zum Minimum der Grundzustandsenergie auch ein lokales Minimum der Magnetisierung; die weitere Gestalt der Kurve kann allerdings komplizierter sein (vergleiche Abbildung 4.5, $B = 0,5$). Generell ist der Schwankungsbereich der Magnetisierung stärker als bei der Grundzustandsenergie. Hervorzuheben ist der kritische Fall $\lambda = 1, B = 0$; hier wird bei schlechter Wahl des Drehwinkels sogar der Wert $\approx 0,35$ berechnet, während in der analytischen Lösung keine Untergittermagnetisierung auftritt.

4.3 Optimierter Drehwinkel

4.3.1 Wahl des optimalen Winkels

Als optimaler physikalischer Drehwinkel wird der Winkel extremaler Grundzustandsenergie nach Lösen der Flussgleichung gewählt. Tatsächlich erweist sich diese Wahl auch zur Bestimmung der Magnetisierung als günstig. Da die berechnete Grundzustandsenergie von der Wahl des optimierten Drehwinkels $\theta_{\text{opt}}(\lambda, B)$ abhängt, muss diese strenggenommen auch in die Bildung der Ableitung eingehen. Nach der Kettenregel findet man daher den Zusammenhang

$$\begin{aligned} M(\lambda_0, B_0) &= - \left. \frac{dE_0(\lambda, B, \theta_{\text{opt}}(\lambda, B))}{dB} \right|_{\lambda_0, B_0} \\ &= - \left. \frac{\partial E_0(\lambda, B, \theta_{\text{opt}}(\lambda, B))}{\partial B} \right|_{\lambda_0, B_0} - \left. \frac{\partial E_0(\lambda, B, \theta)}{\partial \theta} \right|_{\lambda_0, B_0, \theta_{\text{opt}}} \cdot \left. \frac{\partial \theta_{\text{opt}}(\lambda, B)}{\partial B} \right|_{\lambda_0, B_0}. \end{aligned} \quad (4.3.14)$$

Dieser Ausdruck ist nur umständlich zu bestimmen, da neben der partiellen Ableitung der Grundzustandsenergie nach der Feldstärke auch die partielle Ableitung nach dem Drehwinkel und insbesondere auch eine partielle Ableitung des optimierten Drehwinkels selbst gebildet werden müssen. Abhängig davon, auf welche Weise die Wahl von θ_{opt} getroffen wird, kann gerade dieser Schritt einen erheblichen Mehraufwand bedeuten. Umgekehrt kann ein einfaches Ignorieren dieses Terms eine zusätzliche Fehlerquelle generieren.

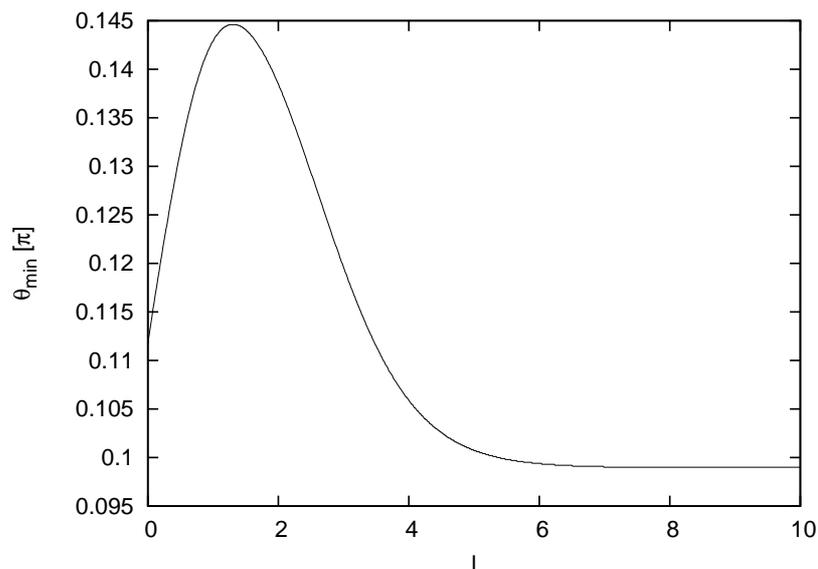


Abbildung 4.8: Verschiebung des Winkels niedrigster Vakuumenergie $\theta_{\min}(\ell)$ während des Flusses für die Parameter $\lambda = 1$ und $B = 0,1$ (0:n-Generator, Trunkierungsschema 8-6-3).

Die Wahl des optimalen Drehwinkels als stationärer Punkt der Grundzustandsenergie bietet nun den entscheidenden Vorteil, dass die partielle Ableitung der Grundzustandsenergie nach dem Winkel definitionsgemäß gerade verschwindet; dadurch fällt der komplette Term weg, und es besteht Gleichheit zwischen totaler und partieller Ableitung. Entsprechend sollten die auf diese Weise berechneten Untergittermagnetisierungen für den so gewählten Winkel eine besonders hohe Genauigkeit aufweisen.

Eine Alternative stellt der Winkel höchster Konvergenzgeschwindigkeit dar, denn die verbleibende Nichtdiagonalität (ROD) zeigt ein äußerst scharfes Minimum über mehrere Größenordnungen, dessen Lage insbesondere bei starker Interdimerkopplung sich deutlich vom stationären Punkt der Grundzustandsenergie unterscheidet.

Obwohl eine hohe Konvergenzgeschwindigkeit eine sehr wünschenswerte Eigenschaft des Flussgleichungssystems ist, lässt sie jedoch keine Aussage über die physikalische Qualität der Ergebnisse zu. Denn während die Grundzustandsenergie und Magnetisierung physikalische Observablen sind, die während des Flusses schnell gegen einen endlichen Grenzwert konvergieren, ist die ROD ausschließlich eine interne (numerische) Kenngröße des Verfahrens, die letztlich nur eine numerisch unvermeidliche Folge einer unvollständigen Integration ist: im Limes $\ell \rightarrow \infty$ verschwindet die ROD für alle Drehwinkel.

Ein Vergleich der ROD bei einem endlichen Wert des Flussparameters für verschiedene Drehwinkel ist zwar unter numerischen Gesichtspunkte möglich, aber aus physikalischer Sicht völlig willkürlich. Denn durch die Wahl des Drehwinkels wird tatsächlich eine Schar von Raumkurven $H_{\theta}(\ell)$ in der Algebra verglichen; da jede Kurve von einem anderen Startpunkt aus beginnt,

sind die Raumkurven prinzipiell verschieden und ihre Parametrisierungen $\ell \rightarrow H_\theta(\ell)$ stehen zu einander in keinem Zusammenhang.

Der Vergleich der ROD zwischen verschiedenen Winkeln bei gleichem Flussparameter bedeutet also, Punkte aus verschiedenen Raumkurven anhand des Wertes des jeweiligen Kurvenparameters auszuwählen und miteinander zu vergleichen. Da die Parametrisierung jeder Kurve aber unabhängig und willkürlich gewählt werden kann, kann auf diese Weise keine physikalisch relevante Aussage über die Raumkurven selbst getroffen werden. Objektiv vergleichbar sind daher allein die Endpunkte der Raumkurven entsprechend dem Grenzwert $H_\theta(\ell \rightarrow \infty)$, bei welchem die ROD aber gerade verschwindet¹⁰.

Abbildung 4.8 zeigt den Verlauf des Drehwinkels minimaler Vakuumenergie¹¹ während des Flusses. Wie zu erkennen ist, schwankt die Lage des Minimums zu Beginn noch recht stark, während ab einem Flussparameterwert von $\ell \approx 7$ bereits die endgültige Lage für $\ell \rightarrow \infty$ gut ablesbar ist; dieser Wert liegt in der Umgebung des ursprünglichen Minimums der Vakuumenergie bei $\ell = 0$. Zur Bestimmung des optimalen Drehwinkels wird daher zunächst das Minimum der Vakuumenergie pro Dimer

$$\frac{\langle 0 | H_\theta(0) | 0 \rangle}{N} = -\frac{3}{4} + (1 - \lambda) \sin^2 \theta \cos^2 \theta - 2B \sin \theta \cos \theta + \sin^4 \theta \quad (4.3.15)$$

mit Brents Algorithmus bestimmt¹². Dieses dient dann als Startpunkt für die eigentliche Optimierung.

4.3.2 Abhängigkeit von B und λ

In Abbildung 4.9 ist die Abhängigkeit des optimierten Drehwinkels von der Stärke des alternierenden Magnetfelds dargestellt. Wie beim isolierten Dimer erwartet, steigt der Wert des optimalen Drehwinkels mit dem Magnetfeld streng monoton an; ein entsprechend gewählter Startpunkt ist die bestmögliche Annäherung an den tatsächlichen Grundzustand der Kette. Mit zunehmender Interdimerkopplungsstärke wird der Anstieg im Anfangsbereich immer stärker ausgeprägt; dies passt zu dem schon in Abbildung 4.4 erkennbaren deutlichen Anstieg in der Magnetisierung für hohe Werte von λ . Während allerdings die Magnetisierung im betrachteten Parameterbereich bei allen Kopplungsstärken auf ca. 90% des Maximalwertes

¹⁰Tatsächlich gibt es genau eine ausgezeichnete Art, verschiedene Raumkurven objektiv vergleichbar zu parametrisieren, nämlich anhand ihrer Bogenlänge $\int_\gamma ds = \int_0^\ell \left| \frac{dH(\ell')}{d\ell'} \right| d\ell'$. Die Berechnung der Bogenlänge erfordert jedoch das Vorhandensein einer Metrik; auf die Schwierigkeit, Norm und Metrik für diese Operatoren zu formulieren, wird im Rahmen der Betrachtung von Trunkierungsfehlern in Kapitel 6 noch eingegangen.

¹¹Wie zuvor bei der ROD gilt auch hier: physikalisch bedeutsam ist am Ende nur der Vergleich bei $\ell \rightarrow \infty$.

¹²Hierbei wird aus berechneten Funktionswerten in der erwarteten Umgebung des Minimums eine Parabel interpoliert; die Funktion wird am berechneten Scheitelpunkt ausgewertet. Dieser Vorgang wird bis zur gewünschten Genauigkeit iteriert.

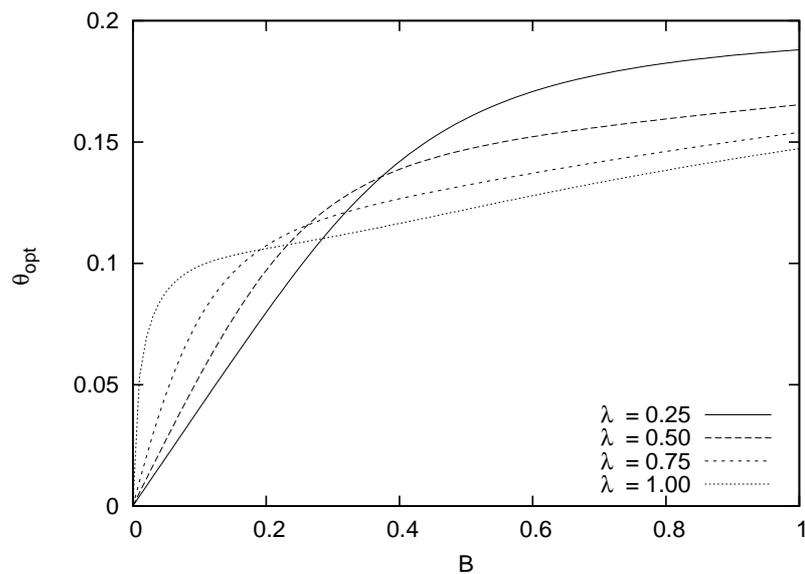


Abbildung 4.9: Abhängigkeit des optimierten Drehwinkels θ_{opt} von der Stärke des alternierenden Magnetfelds B für verschiedene Werte der Interdimerkopplung λ (0:n-Generator, 8-6-3-Trunkierung).

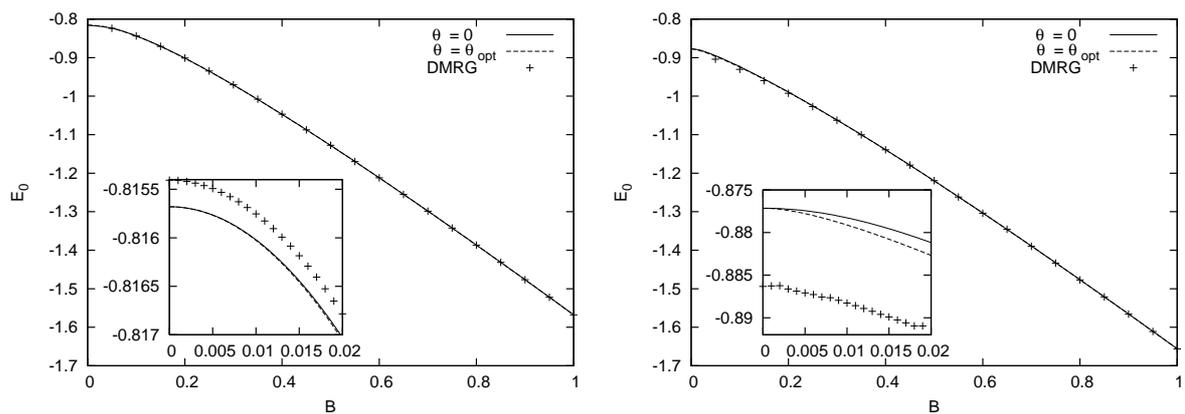


Abbildung 4.10: Grundzustandsenergie E_0 pro Dimer mit und ohne Optimierung im Vergleich zu DMRG-Referenzdaten für eine Interdimerkopplung λ von 0,75 und 1 in Abhängigkeit von der Stärke des alternierenden Magnetfelds B (0:n-Generator, Trunkierung 8-6-3). Im Fall $\lambda = 0,75$ sind die Grundzustandsenergien für $\theta = 0$ und θ_{opt} kaum zu trennen.

ansteigt, nimmt der optimale Drehwinkel nach dem schnellen Anstieg zu Beginn speziell bei starker Interdimerkopplung nur noch langsam zu.

4.3.3 Grundzustandsenergie

In weiten Teilen des Parameterbereichs, bei niedriger und mäßiger Interdimerkopplungen führt die Optimierung des Winkels nur zu geringen Korrekturen der Grundzustandsenergie (Abbildung 4.10 links). Die Ergebnisse decken sich sehr gut mit einer DMRG-Referenzrechnung; im

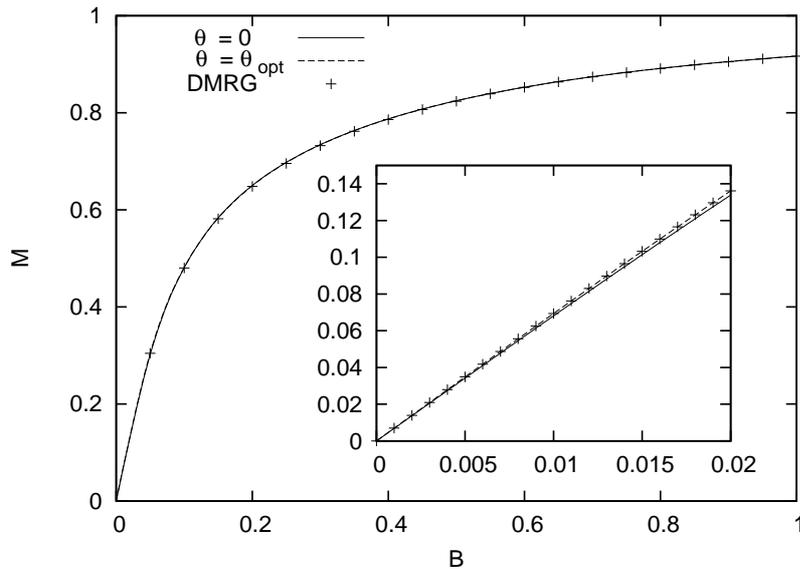


Abbildung 4.11: Untergittermagnetisierung M pro Dimer mit und ohne Optimierung im Vergleich zu DMRG-Referenzdaten für eine Interdimerkopplung λ von 0,75 in Abhängigkeit von der Stärke des alternierenden Magnetfelds B (0:n-Generator, Trunkierung 8-6-3).

direkten Vergleich bestehen speziell im Bereich niedriger Feldstärken systematische Abweichungen zur DMRG-Rechnung ($\approx 10^{-4}$ für $\lambda = 0,75$).

Deutlicher zu Tage treten die Unterschiede bei hoher Interdimerkopplung ($\lambda = 1$, Abbildung 4.10 rechts); die Abweichungen zur DMRG-Referenz sind auch hier bei geringer Feldstärke am größten (bis zu $\approx 10^{-2}$). Hier liefert die Optimierung des Drehwinkels eine sichtbare Verbesserung (Abbildung 4.10, kleines Bild).

4.3.4 Untergittermagnetisierung

Im Bereich niedriger und mittlerer Interdimerkopplung erzielt auch hier bereits die nicht optimierte CUT sehr gute Ergebnisse (Abbildung 4.11); Verbesserungen durch die Optimierung sind im Bereich niedriger Feldstärken erkennbar.

Eine starke Verbesserung durch die Optimierung des Drehwinkels zeigt sich bei der Untergittermagnetisierung im kritischen Fall $\lambda = 1$ bei niedriger Feldstärke (Abbildung 4.12). An dieser Stelle erwartet man eine sehr rasch ansteigende Untergittermagnetisierung mit senkrechter Steigung im Nullpunkt. Dieser Fall stellt eine besondere Herausforderung an die CUT dar, da die Triplonmasse verschwindet, magnetische Korrelationen nicht mehr exponentiell abfallen und damit die Trunkierung im Realraum schwieriger wird.

Bei der gewöhnlichen Rechnung mit 8-6-3-Trunkierung wird dieser steile Anstieg bei geringer

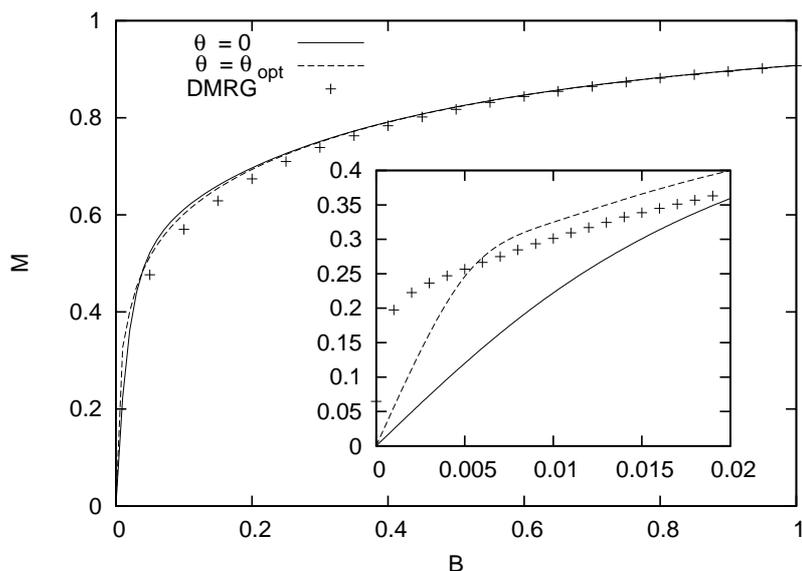


Abbildung 4.12: Untergittermagnetisierung M pro Dimer mit und ohne Optimierung im Vergleich zu DMRG-Referenzdaten für eine Interdimerkopplung λ von 1 in Abhängigkeit von der Stärke des alternierenden Magnetfelds B (0:n-Generator, Trunkierung 8-6-3).

Feldstärke stark ausgeschmiedt; die berechnete Untergittermagnetisierung steigt von Beginn an gleichmäßig an, kreuzt die Referenzkurve und nähert sich bei mittleren Feldstärken dieser wieder von oben an.

Gerade das physikalische Verhalten der unendlichen Steigung im Nullpunkt wird durch die Optimierung des Drehwinkels wesentlich besser wiedergegeben; die Magnetisierungskurve zeigt einen deutlich steileren Anstieg bei niedrigen Feldstärken und verläuft danach nahe der Referenzkurve. Auch bei mittleren Feldstärken liegen die optimierten Werte näher an der DMRG-Referenz (Abbildung 4.12 außen).

4.4 Technische Implementierung

Als Ausgangspunkt für das Aufstellen des Flussgleichungssystems diente ein von DUFFE und FISCHER [DF07] zur Untersuchung von Spinleitern entwickeltes Programm¹³ in der Programmiersprache C++. Es wurde um die Behandlung von Polynomen aus Parametern als Startwerte sowie die automatisierte Durchführung von Basistransformationen erweitert. Die Integration erfolgte über ein Runge-Kutta-Verfahren 4. Ordnung mit konstanter Schrittweite [PTVF07]. Die in diesem Abschnitt gezeigten Rechnungen wurden, soweit nicht anders vermerkt, mit einer Schrittweite von 10^{-3} bis zum Flussparameter $\ell = 20$ integriert.

¹³Ein Überblick über den prinzipiellen Aufbau eines Programms zum Aufstellen von Flussgleichungen findet sich in [Rei06].

Das Lösen der Flussgleichung wurde über die Open-MP-Schnittstelle parallelisiert.

Für die Bildung der Ableitung zur Berechnung der Untergittermagnetisierung wurde Ridders Methode [PTVF07] verwendet. Die numerische Bestimmung des Minimums der Grundzustandsenergie erfolgte nach Brents Algorithmus [PTVF07]; als Ausgangspunkt für die Optimierung diente das Minimum der Vakuumenergie vor der Integration der Flussgleichung. Beide Algorithmen wurden gemäß ihrer Formulierung in den Numerical Recipies verwendet.

Zur Gewinnung der Referenzwerte mittels DMRG [Whi92, Whi93, Sch05, PWKH99] wurde das ALPS-Programmpaket [Ac07] verwendet. Die Randbedingungen wurden periodisch gewählt; für die Anzahl der Sweeps erwies sich bereits ein Wert von 2 als ausreichend, lediglich für den Bereich niedriger Magnetfeldstärken (Abb. 4.11) wurden 4 Sweeps benötigt. Für jeden Datenpunkt wurde zunächst ein Finite-Size-Scaling über die Anzahl der Zustände (32, 64, 128, 256) und die Kettenlängen (32, 64, 128, 256) durchgeführt. Hierbei wurden E_0 und M zunächst gegen die inverse Anzahl der Zustände aufgetragen und mit einem Polynom 2. Grades mit dem Programm GNUPLOT über den Marquardt-Levenberg-Algorithmus der Wert für unendlich viele Zustände extrapoliert. Anschließend wurde diese Vorgehensweise für die Systemgröße analog durchgeführt.

4.5 Zusammenfassung und Ausblick

Die Grundzustandsenergie und Magnetisierung der Heisenbergkette konnten in der Standardbasis erfolgreich berechnet werden. Das System zeigte im kritischen Fall $\lambda = 1$ eine besonders steile, allerdings immer noch endlich ansteigende Magnetisierungskurve.

Mit Einführung des Drehwinkels als Variationsparameter wurde erwartungsgemäß eine schwache Abhängigkeit der Grundzustandsenergie beobachtet; hierbei zeichnete sich ein klares Minimum ab. Weiterhin wurde ein Winkel schnellster Konvergenz gefunden, der bei schwacher Interdimerkopplung nahe am Minimum der Grundzustandsenergie liegt, sich bei stärkeren Feldern allerdings zu deutlich höheren Winkeln hin verschiebt.

Die optimierte Basis wurde als das Minimum der Grundzustandsenergie eingeführt und zeichnete sich gegenüber der Standardbasis durch eine genauere Grundzustandsenergie bei starker Interdimerkopplung und niedrigen Feldstärken, sowie durch eine deutlich schnellere Konvergenz aus. Hinsichtlich der Untergittermagnetisierung konnte in diesem Bereich eine signifikante Verbesserung erzielt werden.

Insgesamt erscheint die optimierte Basis daher geeignet, gerade in kritischen Fällen, in denen starke Trunkierungsfehler auftreten, die Genauigkeit und physikalische Aussagekraft des effektiven Modells gezielt zu verbessern. Die gesteigerte Konvergenzgeschwindigkeit ist hierbei gemischt zu bewerten. Zwar verbessert diese Tatsache die Laufzeit in der Integration, dennoch

müssen, je nach gewählter Genauigkeit, zwischen 3 und 8 Integrationen der Flussgleichung durchgeführt werden. Dieser Mehraufwand ist allerdings geringer als der Übergang zu einem weiter gefassten Trunkierungsschema zur Folge hat.

Besonders vielversprechend ist die Aussicht auf eine Erweiterung auf das zweidimensionale Heisenbergmodell. Hier erscheint die Nutzung der gedrehten Basis für die Behandlung spontaner Magnetisierung sogar zwingend erforderlich, da nur durch eine Symmetriebrechung schon in den Anfangsbedingungen der physikalische Grundzustand für die CUT zugänglich wird.

5 Analyse des Trunkierungsfehlers

Durch die Formulierung in Besetzungszahldarstellung ermöglicht die S-CUT-Methode die direkte Arbeit in unendlich ausgedehnten Systemen (thermodynamischer Limes). Durch die Formulierung in Besetzungszahldarstellung muss der Hilbertraum des Systems nicht begrenzt werden. Allerdings müssen in der S-CUT-Methode gezielt Wechselwirkungsterme mit hoher Reichweite oder unter Beteiligung vieler Quasiteilchen vernachlässigt werden. Dieser Trunkierungsfehler kann bisher nur durch den Vergleich von Ergebnissen verschiedener Trunkierungsschemata¹ [KM94] oder den Vergleich mit Resultaten anderer Verfahren abgeschätzt werden.

Die Kenntnis des Trunkierungsfehlers allein aus der trunkierten Rechnung selbst heraus (a priori) ist daher von großem Interesse und würde verschiedene neue Möglichkeiten eröffnen:

- Es ließen sich feste Fehlerschranken auf physikalische Kenngrößen des Systems bestimmen.
- Es stünde eine Möglichkeit zur Verfügung, Trunkierungsschemata zu vergleichen und hinsichtlich der Qualität der Ergebnisse eine objektive Bewertung durchführen.
- Darüber hinaus könnten verwendete Methode und Trunkierungsschemata gezielt optimiert werden; sollte sich etwa in einer Untersuchung herausstellen, dass bestimmte Freiheitsgrade einen Großteil des Trunkierungsfehlers bedingen, würde eine Trunkierung von Termen nach ihrer *Wichtigkeit* nicht nur die Qualität der Ergebnisse verbessern, sondern zugleich noch massive Einsparungen von Rechen- und Speicherressourcen ermöglichen.

In diesem Kapitel wird der aus der Trunkierung erwachsende Fehler analysiert und erstmals gezeigt, wie dieser sich durch eine inhomogene Flussgleichung mathematisch erfassen lässt. Mit ihr wird ein intrinsisches Maß für den Trunkierungsfehler der S-CUT-Methode hergeleitet, in welches ausschließlich aus numerischer Integration der trunkierten Flussgleichung bekannte Größen eingehen. Es wird der Zusammenhang zum Fehler der Grundzustandsenergie hergestellt und die Methode anhand des Doppel-Hardcore-Boson-Systems² illustriert.

¹Im Allgemeinen ist davon auszugehen, dass der Trunkierungsfehler um so kleiner wird, je weiter das Trunkierungsschema gefasst ist, das heißt, je mehr Terme im Hamiltonian berücksichtigt werden.

²Die Rechnungen wurden mit der Mathematikumgebung MAPLE durchgeführt.

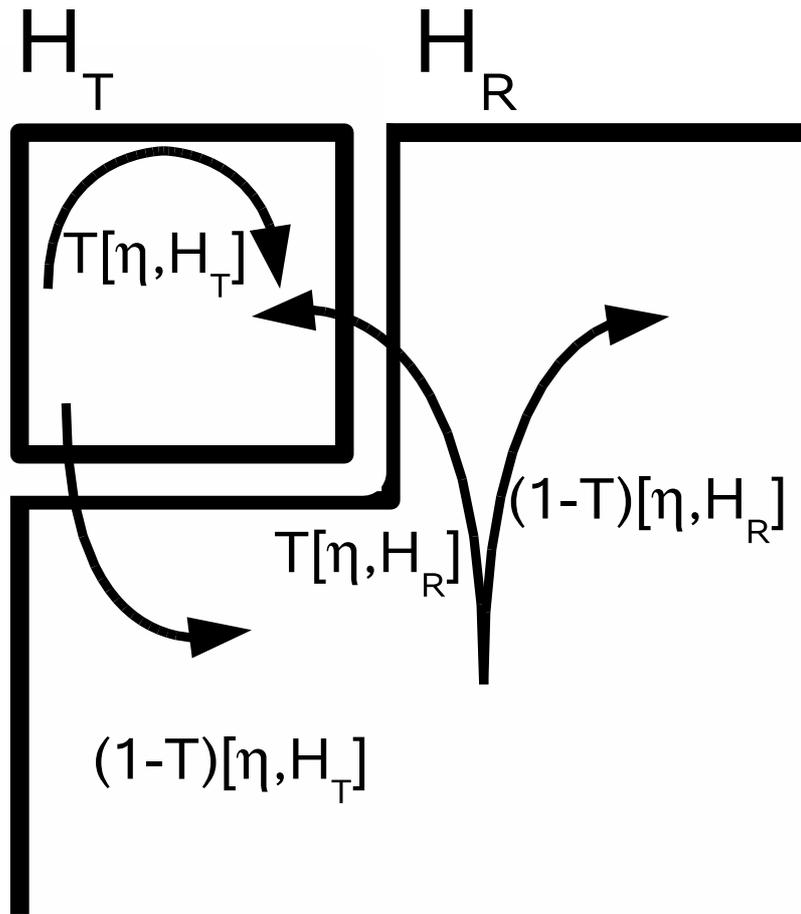


Abbildung 5.1: Der Informationsfluss innerhalb des Hamiltonians; Koeffizienten innerhalb des Trunkierungsschemas H_T werden auch von den unbekannt Koeffizienten H_R außerhalb beeinflusst. T bezeichnet die Trunkierung aller Terme, die das Trunkierungsschema nicht erfüllen (vergleiche Abschnitt 5.3).

5.1 Auswirkungen der Trunkierung

Die Trunkierung des Hamiltonians äußert sich in vielfältigen Aspekten.

Im Sinne der Besetzungsdarstellung wird ein Matrixelement als kommutierte Wirkung verschiedener Wechselwirkungsterme verstanden. Die Streuung mehrerer Quasiteilchen wird daher zunächst als unabhängiges Einteilchenverhalten verstanden (entsprechend Termen der Bauart $a^\dagger a$), zu dem paarweise Wechselwirkungen hinzukommen ($a^\dagger a^\dagger a a$), und der weitere Korrekturen durch Dreiteilchen- und höhere Wechselwirkungen erfährt. Das Verhalten vieler Quasiteilchen wird also durch das Verhalten weniger extrapoliert und der Hamiltonian in den expliziten Korrekturen der Wechselwirkung entwickelt; sofern das System gut durch ein Quasiteilchenbild beschreibbar ist, erwartet man immer kleinere Beiträge für höhere Wechselwirkungen. Bei der Trunkierung werden gerade diese Korrekturen in Vielteilchenwechselwirkungen trunkiert. Eine Trunkierung von Dreiteilchen-Wechselwirkungen bedeutet also nicht die Unterdrückung von Dreiteilchen-Streuungen, sondern lediglich eine Extrapolation aus dem Verhalten von zwei und

weniger Teilchen. Ähnliches gilt für die Trunkierung nach Reichweite; hier wird eine Wechselwirkung über weite Distanzen als eine Folge von kommulierte Wechselwirkungen über kurze Distanzen verstanden.

Vom Gesichtspunkt des Differentialgleichungssystems bedeutet die Trunkierung, dass Terme des Hamiltonians außerhalb des Trunkierungsschemas ignoriert werden und damit die Information über sie verloren geht. Auch wenn diese Korrekturen von hochenergetischen Wechselwirkungen nicht von Interesse sind, wird der mit ihnen in der Flussgleichung gebildete Kommutator auch Terme enthalten, die das Trunkierungsschema erfüllen. Durch die Trunkierung verliert man auch Information über Terme innerhalb des Trunkierungsschemas (vergleiche Abbildung 5.1).

Schließlich führt das Trunkieren von Termen dazu, dass die trunkierte Flussgleichung nicht in Form eines Kommutators mit einem antihermiteschen Generator η geschrieben werden kann. Dadurch kann nicht mehr garantiert werden, dass die Transformation noch unitär ist. Der Hamiltonian ist durch das Trunkierungsschema an einen (flachen) Unterraum gebunden; Beiträge des durch die Flussgleichung beschriebenen Vektorfeldes werden durch die Trunkierung wegprojiziert; die Flusslinie kann damit der unitären Untermannigfaltigkeit nicht mehr folgen.

Dieser Verlust an Unitariät soll am Beispiel des Doppel-Hardcore-Bosons deutlich gemacht werden. Das Doppel-Hardcore-Boson-Modell wurde auf Seite 14 eingeführt; der Hamiltonian schreibt sich nach Gleichung (2.5.20) als

$$H = E_0 \mathbb{1} + \mu \left(a_1^\dagger a_1 + a_2^\dagger a_2 \right) + V a_1^\dagger a_1 a_2^\dagger a_2 + t \left(a_1^\dagger a_2 + a_2^\dagger a_1 \right) \\ + \Gamma^{10} \left(a_1^\dagger + a_1 + a_2^\dagger + a_2 \right) + \Gamma^{21} \left(a_1^\dagger a_2^\dagger a_2 + a_1 a_2^\dagger a_2 + a_1^\dagger a_1 a_2^\dagger + a_1^\dagger a_1 a_2 \right).$$

Die vollen Flussgleichungen [Fis08] des MKU-Generatorschemas ergeben sich zu

$$\partial_t E_0 = -4\Gamma^{10}\Gamma^{10} - 2\Gamma^{20}\Gamma^{20} \quad (5.1.1a)$$

$$\partial_t \mu = 4\Gamma^{10}\Gamma^{10} + 2\Gamma^{20}\Gamma^{20} - 2\Gamma^{21}\Gamma^{21} - 4\Gamma^{10}\Gamma^{21} \quad (5.1.1b)$$

$$\partial_t V = 16\Gamma^{10}\Gamma^{21} + 8\Gamma^{21}\Gamma^{21} \quad (5.1.1c)$$

$$\partial_t t = -4\Gamma^{10}\Gamma^{21} - 2\Gamma^{21}\Gamma^{21} \quad (5.1.1d)$$

$$\partial_t \Gamma^{10} = -\Gamma^{10}\mu - \Gamma^{10}t - 2\Gamma^{20}(\Gamma^{10} + \Gamma^{21}) \quad (5.1.1e)$$

$$\partial_t \Gamma^{21} = -\Gamma^{10}V + 2\Gamma^{10}(2\Gamma^{20} + t) + \Gamma^{21}(2\Gamma^{20} + t) - \Gamma^{21}(\mu + V) \quad (5.1.1f)$$

$$\partial_t \Gamma^{20} = -2\Gamma^{20}(\mu + V). \quad (5.1.1g)$$

Als minimales Trunkierungsschema wird die Vernachlässigung des durch V beschriebenen Dichte-Dichte Terms $b_1^\dagger b_1 b_2^\dagger b_2$ vorgenommen. Dies stellt für ein System dieser Größe bereits einen gewichtigen Teil der Freiheitsgrade dar; dennoch sollte die Beschreibung der tiefliegen-

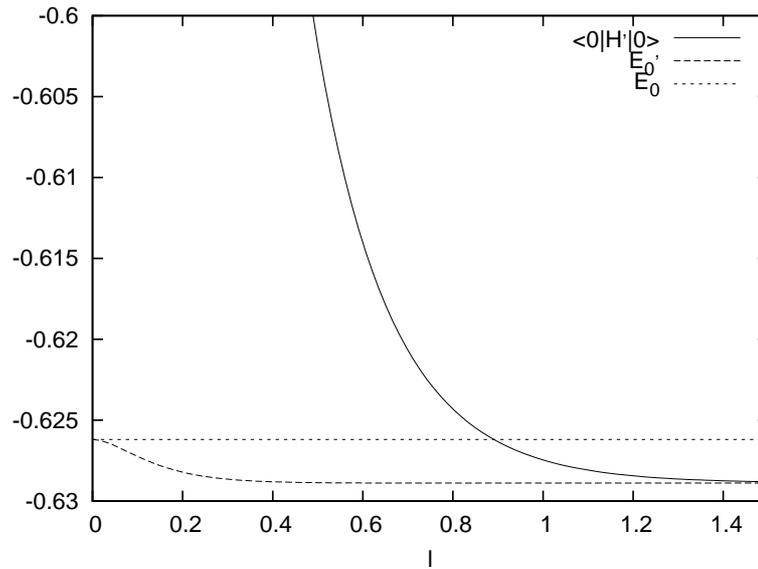


Abbildung 5.2: Abhängigkeit der Vakuumenergie $\langle 0|H'|0\rangle$ und Grundzustandsenergie E'_0 des trunkierten Hamiltonians in Abhängigkeit des Flussparameters ℓ ; zum Vergleich ist auch die exakte Grundzustandsenergie E_0 aufgetragen ($\mu = 2, t = 1, \Gamma^{10} = 1$).

den Energieeigenwerte noch gut gelingen. Im Folgenden wird der Hamiltonian des trunkierten Flussgleichungssystem gestrichen dargestellt.

Abbildung 5.1 zeigt die Ergebnisse für eine Lösung bei einer starken Nichtdiagonalität von $\Gamma^{10} = 1$; übrige Nichtdiagonalitäten wurden zu Beginn auf 0 gesetzt. Der Verlust an Unitariät bewirkt eine Veränderung der Eigenwerte des Hamiltonians durch die CUT; die Grundzustandsenergie des transformierten Hamiltonians sinkt während des Flusses um 0,43% ab, was in Anbetracht starker Trunkierung und hoher Nichtdiagonalität ein sehr genauer Wert ist. Gut erkennbar ist, dass die CUT tatsächlich weiterhin zu einer Diagonalisierung des Hamiltonians führt; die Vakuumenergie $\langle 0|H'|0\rangle$ konvergiert sehr schnell, wenngleich gegen die Grundzustandsenergie des trunkierten Hamiltonians.

5.2 Finite-Size-Effekte

Da bei der S-CUT der volle Zustandsraum des unendlichen Systems erhalten bleibt, erwartet man keine Finite-Size-Effekte im klassischen Sinn. Allerdings sorgt die durch die Trunkierung bedingte endliche Reichweite der Wechselwirkung dafür, dass sich die physikalischen Eigenschaften eines trunkierten, unendlichen Systems sich nicht mehr von einem endlichen, periodischen³ System in der gleichen Trunkierung unterscheiden lassen; die erhaltenen Differentialgleichungssysteme werden identisch.

³Bei anderen Randbedingungen zerstört die fehlende Translationssymmetrie diesen Zusammenhang.

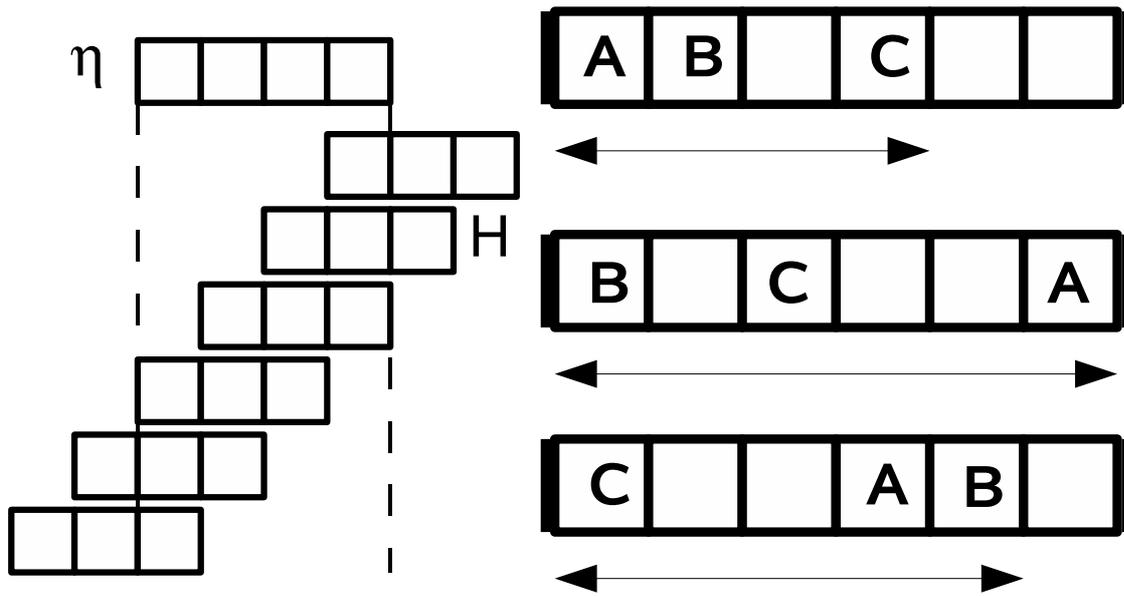


Abbildung 5.3: Links: aus dem Kommutator eines Generator- und Hamiltonianterms mit Längen l_i und l_j können im unendlichen System Terme mit einer Länge bis zu $l_1 + l_2 - 1$ entstehen. Rechts: je nach Wahl des vordersten und hintersten lokalen Operators lassen sich dem abgebildeten Term im periodischen System verschiedene Längen zuordnen.

Beim Aufstellen der Flussgleichung muss für alle Repräsentanten der Ausdruck $\left[\eta_i, \sum_G h_j \right]$ ausgewertet werden; als Teil der Symmetriegruppe müssen insbesondere auch alle Translationen des Terms h_j berücksichtigt werden. Da die Algebra lokal⁴ ist, kann der Kommutator Terme generieren, so lange sich die Argumente mit mindestens einem Gitterplatz überschneiden (siehe Abbildung 5.2 links). Die Länge der im Kommutator kann daher bis zu $l_i + l_j - 1$ betragen, wobei l_i und l_j für die Termlängen der entsprechenden Repräsentanten stehen. Ist n nun die höchste vom Trunkierungsschema noch zugelassene Termlänge im System, auf diese Weise können vor der Trunkierung Terme der Länge

$$l_{\max} = 2n - 1 \quad (5.2.2)$$

erzeugt werden. Aufgrund der gegebenenfalls nötigen Rückfaltung in die Systemgrenzen ist offensichtlich, dass ein endliches System mindestens diese Größe haben muss um das gleiche DGL-System besitzen zu können wie ein unendliches System.

Tatsächlich hat die endliche Systemgröße aber noch subtilere Auswirkungen auf die Trunkierung.

Nach Bilden des Kommutators durchlaufen die Terme die Trunkierungsvorschrift; Terme mit einer Länge $l > n$ werden entfernt. Im periodischen System ist die Länge eines Terms allerdings ein komplizierter Begriff, da kein erster oder letzter lokaler Operator existieren. Frei nach

⁴Dies wird im Folgenden stillschweigend vorausgesetzt.

Kettenlänge	E_0			
	$\lambda = 0.5, h = 0$	$\lambda = 0.5, h = 1$	$\lambda = 1.0, h = 0$	$\lambda = 1.0, h = 1$
3	-0,7821366540	-1,4902122772	-0,9342579563	-1,6564052921
4	-0,7778813863	-1,4901436487	-0,9019258071	-1,6559017262
5	-0,7770436419	-1,4902415504	-0,8836215559	-1,6565930762
6	-0,7768700368	-1,4901407551	-0,8745235739	-1,6557881786
7	-0,7768649893	-1,4901394101	-0,8740959679	-1,6557685935
8	-0,7768649893	-1,4901394101	-0,8740959679	-1,6557685935
9	-0,7768649893	-1,4901394101	-0,8740959679	-1,6557685935
10	-0,7768649893	-1,4901394101	-0,8740959679	-1,6557685935

Tabelle 5.1: Abhängigkeit der Grundzustandsenergie pro Dimer E_0 der dimerisierten Heisenbergkette mit periodischen Randbedingungen von der Systemgröße. Die Trunkierungslänge n liegt bei 3; dies entspricht einer effektiven Systemgröße $\tilde{L} = 7$.

Wahl könnten demselben Term verschiedene Längen zugeordnet werden (siehe Abbildung 5.2 rechts). Da Eindeutigkeit hier zwingend geboten ist, muss das Minimum der Termlänge über alle möglichen Wahlen des ersten und letzten Operators gebildet werden.

Diese besondere Definition sorgt dafür, dass ein Term gewissermaßen „über den (gedachten) Rand umklappen“ kann; auf diese Weise kann auch die Kombination zweier weit ausgedehnter Terme im Kommutator zu einem Term kleiner Länge als Ergebnis führen. Den maximalen Effekt hat das Umklappen bei Termen, die nur aus zwei lokalen Operatoren bestehen. Beide Plätze müssen sich vor und nach dem Umklappen im jeweils betrachteten Inneren des Terms befinden. Zwischen der Länge l vor und l' nach dem Umstülpen und der Systemgröße L besteht daher der Zusammenhang

$$L + 2 = l + l' \quad \Leftrightarrow \quad l' = L + 2 - l. \quad (5.2.3)$$

Damit eine Trunkierung sowohl im unendlichen als auch im endlichen System zu einer Trunkierung des Terms führt, muss die umgeklappte Länge ebenfalls größer sein als die maximale Trunkierungslänge:

$$n < L + 2 - l. \quad (5.2.4)$$

Wird nun die maximal mögliche Länge l_{\max} der beim Kommutator gebildeten Terme aus Gleichung 5.2.2 eingesetzt, ergibt sich damit die Bedingung

$$n < L - 2n + 3 \quad \Leftrightarrow \quad L > 3n - 3. \quad (5.2.5)$$

Man erkennt also, dass für ein translationssymmetrisches, trunkiertes System das Flussgleichungssystem der Repräsentanten unabhängig von der Systemlänge L wird, sofern diese größer

ist als $3n - 3$. Dieser Zusammenhang ist in Tabelle 5.2 am Beispiel der dimerisierten Heisenbergkette gezeigt. Im Umkehrschluss bedeutet diese Überlegung:

Durch den Einfluss der Trunkierung verhalten sich die ermittelten physikalischen Größen wie bei einem endlichen System mit der effektiven Größe $\tilde{L} = 3n - 2$; Effekte auf höheren Längenskalen lassen sich nicht mehr auflösen. Änderungen in den physikalischen Eigenschaften durch Variation der Systemgröße über \tilde{L} werden durch den Trunkierungsfehler vollständig maskiert. Allerdings bleibt hervorzuheben, dass gerade bei einer Konzentration auf den Niederenergiebereich die Trunkierungslänge durch Berücksichtigung langreichweitiger Wechselwirkungen unter Beteiligung weniger Quasiteilchen sehr hoch gewählt werden kann.

5.3 Maß für den Trunkierungsfehler

5.3.1 Trunkierte Flußgleichung

Zur Entwicklung eines Kalküls muss zunächst die Trunkierung formalisiert werden; hierzu wird der abstrakte lineare Operator

$$\hat{T}[A] := \begin{cases} A & | \text{ Trunkierungsvorschrift erfüllt} \\ 0 & | \text{ Trunkierungsvorschrift nicht erfüllt} \end{cases} \quad (5.3.6)$$

eingeführt; seine Anwendung auf Terme bewirkt eine Projektion auf das Trunkierungsschema. Es handelt sich hierbei nicht um einen Operator im Sinne der Quantenmechanik; \hat{T} wirkt nicht auf Zustände, sondern auf quantenmechanische Operatoren selbst.

Auf diese Weise kann nun die trunkierte Flussgleichung formal als

$$\partial_\ell H'(\ell) = \hat{T}[[\eta(\ell), H'(\ell)]] \quad (5.3.7)$$

geschrieben werden. Der Generator $\eta(\ell) = \eta[H'(\ell)]$ wird hierbei anhand des Generatorschemas aus dem Hamiltonian bestimmt. Die trunkierte Flussgleichung besitzt ebenfalls Fixpunkte bei Diagonalgestalt; die hierbei erfolgte Transformation des Hamiltonian ist aber im Allgemeinen nicht mehr unitär.

5.3.2 Aufspalten der Flußgleichung

Da der Trunkierungsfehler in der fehlenden Unitarität der Transformation (5.3.7) begründet liegt, äußert er sich als Abweichung vom unitär transformierten Hamiltonian $H(\ell)$ mit

$$\partial_\ell H(\ell) = [\eta(\ell), H(\ell)]. \quad (5.3.8)$$

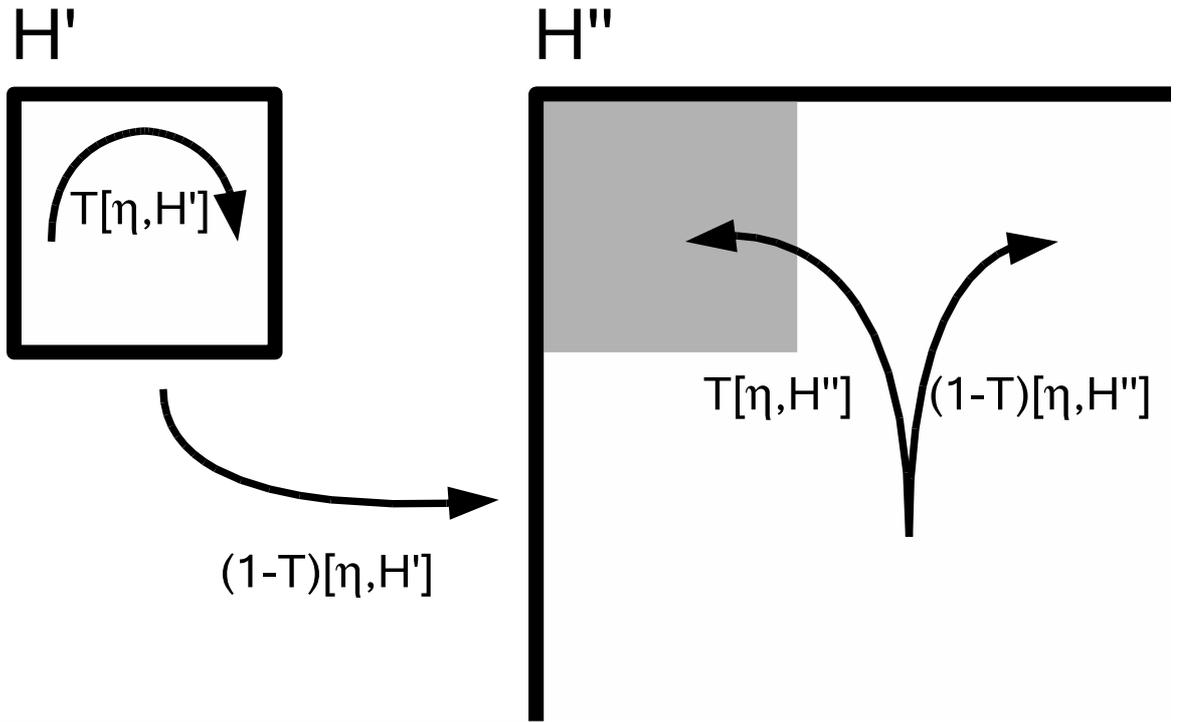


Abbildung 5.4: Durch die Aufspaltung der Flussgleichung enthält H' ausschließlich wohldefinierte Koeffizienten innerhalb des Trunkierungsschemas ohne äußere Abhängigkeiten. Alle Unsicherheiten, insbesondere auch Koeffizienten innerhalb des Trunkierungsschemas betreffend, akkumulieren sich in H'' .

Man beachte hierbei, dass sowohl $H'(\ell)$ als auch $H(\ell)$ vom selben, aus $H'(\ell)$ gebildeten Generator transformiert werden⁵. Durch die Transformation wird zwar $H'(\ell)$ diagonalisiert, nicht aber $H(\ell)$.

Die Differenz der beiden Hamiltonians definiert den Operator

$$H''(\ell) := H(\ell) - H'(\ell), \quad (5.3.9)$$

der damit der Differentialgleichung

$$\partial_\ell H''(\ell) = \partial_\ell H(\ell) - \partial_\ell H'(\ell) \quad (5.3.10a)$$

$$= [\eta(\ell), H'(\ell) + H''(\ell)] - \hat{T}[[\eta(\ell), H'(\ell)]] \quad (5.3.10b)$$

$$= [\eta(\ell), H''(\ell)] + \kappa(\ell) \quad (5.3.10c)$$

mit

$$\kappa(\ell) = (1 - \hat{T})[\eta(\ell), H'(\ell)] \quad (5.3.11)$$

⁵Obwohl $H'(\ell)$ nicht unitär transformiert wird, ist die von Gleichung (5.3.8) beschriebene Transformation in jedem Fall unitär, da $\eta(\ell)$ immer antihermitesch ist.

genügt. Es handelt sich bei (5.3.10) um eine Flussgleichung mit Inhomogenität $\kappa(\ell)$; dieses erstmalige Auftreten einer inhomogenen Flussgleichung ist sehr bemerkenswert.

Insgesamt kann also die Flussgleichung (5.3.8) in das Gleichungssystem

$$\partial_\ell H'(\ell) = \hat{T}[[\eta(\ell), H'(\ell)]] \quad (5.3.12a)$$

$$\partial_\ell H''(\ell) = [\eta(\ell), H''(\ell)] + \kappa(\ell) \quad (5.3.12b)$$

aufgespalten werden:

- $H'(\ell)$ ist das Ergebnis der trunkierten Rechnung; seine Koeffizienten lassen sich aus dem endlichen, geschlossenen DGL-System (5.3.12a) durch numerische Integration vollständig bestimmen.
- $H''(\ell)$ enthält den reinen Trunkierungsfehler der Rechnung. Im Allgemeinen wird (5.3.12b) auf ein sehr großes DGL-System führen, dessen Integration nicht praktikabel ist⁶; ferner geht in dieses System auch $H'(\ell)$ über die Inhomogenität $\kappa(\ell)$ ein.

5.3.3 Inhomogene Flussgleichung

Als Nächstes wird die inhomogene Flussgleichung (5.3.12b) formal gelöst werden. Die Lösung der homogenen Flussgleichung (5.3.10) lautet wie aus Kapitel 2 bekannt

$$H(\ell) = U(\ell)AU^\dagger(\ell) \quad \text{mit} \quad A = H(0). \quad (5.3.13)$$

Die Bestimmung der partikulären Lösung der inhomogenen Flussgleichung erfolgt nun mittels Variation der Konstanten:

$$H''(\ell) = U(\ell)A(\ell)U^\dagger(\ell) \quad (5.3.14)$$

⁶Andernfalls bestünde kein Grund, überhaupt eine Trunkierung vorzunehmen.

$$\partial_\ell H''(\ell) = \frac{\partial U(\ell)}{\partial \ell} A(\ell) U^\dagger(\ell) + U(\ell) \frac{\partial A(\ell)}{\partial \ell} U^\dagger(\ell) + U(\ell) A(\ell) \frac{\partial U^\dagger(\ell)}{\partial \ell} \quad (5.3.15a)$$

$$= \frac{\partial U(\ell)}{\partial \ell} U^\dagger(\ell) H''(\ell) + U(\ell) \frac{\partial A(\ell)}{\partial \ell} U^\dagger(\ell) + H''(\ell) U(\ell) \frac{\partial U^\dagger(\ell)}{\partial \ell} \quad (5.3.15b)$$

$$= \eta(\ell) H''(\ell) + U(\ell) \frac{\partial A(\ell)}{\partial \ell} U^\dagger(\ell) + \eta^\dagger(\ell) H''(\ell) \quad (5.3.15c)$$

$$= [\eta(\ell), H''(\ell)] + U(\ell) \frac{\partial A(\ell)}{\partial \ell} U^\dagger(\ell) \quad (5.3.15d)$$

$$\stackrel{!}{=} [\eta(\ell), H''(\ell)] + \kappa(\ell). \quad (5.3.15e)$$

Damit reduziert sich die inhomogene Flussgleichung auf die Bedingung

$$\kappa(\ell) = U(\ell) \frac{\partial A(\ell)}{\partial \ell} U^\dagger(\ell) \quad (5.3.16)$$

$$\Leftrightarrow \frac{\partial A(\ell)}{\partial \ell} = U^\dagger(\ell) \kappa(\ell) U(\ell); \quad (5.3.17)$$

mit der Anfangsbedingung $H''(0)$ erhält man somit

$$A(\ell) = H''(0) + \int_0^\ell U^\dagger(\ell') \kappa(\ell') U(\ell') d\ell'. \quad (5.3.18)$$

Insgesamt wird damit die inhomogene Flussgleichung (5.3.12b) durch

$$\boxed{H''(\ell) = U(\ell) H''(0) U^\dagger(\ell) + U(\ell) \left(\int_0^\ell U^\dagger(\ell') \kappa(\ell') U(\ell') d\ell' \right) U^\dagger(\ell)} \quad (5.3.19)$$

gelöst. Anschaulich bedeutet dies, dass während des Flusses angefallene Beiträge durch die Inhomogenität $\kappa(\ell)$ zum gemeinsamen Startpunkt zurückgedreht und aufsummiert werden; anschließend wird die Summe bis zum entsprechenden Flussparameter wie eine Observable transformiert.

5.3.4 Trunkierungsfehler

Mit Gleichung (5.3.19) ist der Hamiltonian des Trunkierungsfehlers $H''(\ell)$ formal bestimmt. Für praktische Zwecke ist dieser Ausdruck allerdings nicht direkt berechenbar, da der Aufwand hierzu einer exakten Lösung des Systems gleichkommt. Tatsächlich effizient berechnbar ist nur die Inhomogenität $\kappa(\ell)$, die nach Gleichung (5.3.11) während der numerischen Integration der trunkierten Flussgleichung (5.3.7) anfällt; eine effiziente Beschreibung des Trunkierungsfehlers wird allein auf diesen Ausdruck zurückgreifen können.

Um ein einfach zu handhabendes Maß für den Trunkierungsfehler zu gewinnen, wird der Normwert

$$\|H''(\ell)\| = \left\| U(\ell) \left(\int_0^\ell U^\dagger(\ell') \kappa(\ell') U(\ell') d\ell' \right) U^\dagger(\ell) \right\| \quad (5.3.20)$$

untersucht. Hierbei wurde ausgenutzt, dass die Startwerte des Hamiltonians $H(\ell)$ nicht trunziert werden; daher gilt $H''(\ell) = 0$. Stellt man nun an die Norm $\| \cdot \|$ die Voraussetzung, dass sie invariant gegen unitäre Transformationen sein muss, reduziert sich die Gleichung zu

$$\|H''(\ell)\| = \left\| \int_0^\ell U^\dagger(\ell') \kappa(\ell') U(\ell') d\ell' \right\|. \quad (5.3.21)$$

Um Gleichung (5.3.21) weiter zu vereinfachen, wird die Dreiecksungleichung auf das Riemann-Integral angewandt:

$$\|H''(\ell)\| \leq \int_0^\ell \left\| U^\dagger(\ell') \kappa(\ell') U(\ell') \right\| d\ell' \quad (5.3.22)$$

$$= \int_0^\ell \|\kappa(\ell')\| d\ell' \quad (5.3.23)$$

Dieser Ausdruck ist nun ein einfaches Riemann-Integral einer skalaren Funktion und weist damit eine erheblich geringere Komplexität als $H''(\ell)$ auf; der einzig aufwändige Schritt bleibt das Registrieren der trunzierten Terme $\kappa(\ell)$ und die Berechnung der Norm. Dieser Aufwand kann als realisierbar betrachtet werden. Daher wird dieser Ausdruck als der *Trunkierungsfehler*

$$\Lambda(\ell) := \int_0^\ell \left\| (1 - \hat{T})[\eta(\ell), H'(\ell)] \right\| d\ell' \geq \|H''(\ell)\| \quad (5.3.24)$$

definiert.

Im geometrischen Bild ist Gleichung (5.3.24) so zu verstehen:

- $H(\ell)$ und $H'(0)$ liegen in derselben unitären Untermannigfaltigkeit.
- Der Abstand zwischen $H'(\ell)$ und der Untermannigfaltigkeit, in der sich $H'(0)$ befindet, ist kleiner als der Abstand zwischen $H'(\ell)$ und $H(\ell)$.
- Der Tangentialvektor von $H(\ell)$ ist $V(\ell) = [\eta(\ell), H(\ell)]$.
- Der Tangentialvektor von $H'(\ell)$ ist die Projektion $\hat{T}[V(\ell)] = \hat{T}[[\eta(\ell), H'(\ell)]]$ auf den Tangentialraum des Trunkierungsraums, da $H'(\ell)$ immer im durch das Trunkierungsschema bestimmten Unterraum liegen muss.
- Schlimmstenfalls vergrößert jede Vektorkomponente von $\hat{T}[V(\ell)]$ senkrecht zu $V(\ell)$ den

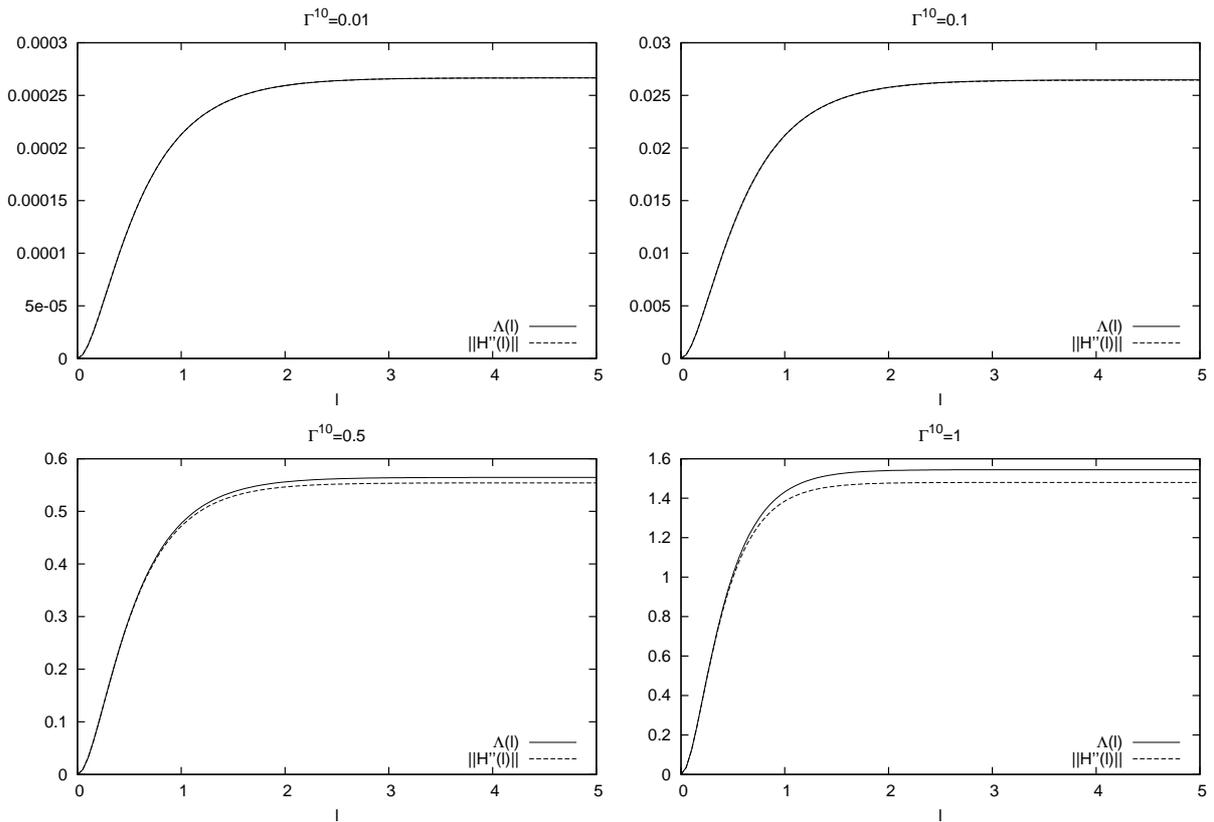


Abbildung 5.5: Entwicklung des Trunkierungsfehlers $\Lambda(\ell)$ und des Abstandes in der Spektralnorm $\|H''(\ell)\|$ während des Flusses für $t = 1$ und $\mu = 2$ für verschiedene Werte von der Nichtdiagonalität Γ^{10} .

Abstand von $H'(\ell)$ und $H(\ell)$ im selben Maße (Dreiecksungleichung).

Der Abstand zwischen exakter und trunkierter CUT $\|H''(\ell)\|$ sowie der Trunkierungsfehler $\Lambda(\ell)$ aus Gleichung (5.3.24) sind in Abbildung 5.5 für das Doppel-Hardcore-Boson-System bei verschieden starker Nichtdiagonalität Γ^{10} wiedergegeben. Der Trunkierungsfehler steigt während des Flusses gleichmäßig an und geht in die Sättigung über, während der Hamiltonian auskonvergiert. Auffällig ist, dass der Trunkierungsfehler den tatsächlichen Abstand sehr genau wiedergibt. In Abbildung 5.6 ist die Abhängigkeit der Endwerte von Λ und $\|H''\|$ gegen die Nichtdiagonalität Γ^{10} aufgetragen. Erst, wenn die Nichtdiagonalterme sich in derselben Größenordnung wie die Diagonalterme bewegen, ist ein Unterschied überhaupt erkennbar; selbst bei sehr starker Nichtdiagonalität $\Gamma^{10} = 10$ ist der Unterschied noch gering.

5.3.5 Normen

Bei der Formulierung des Trunkierungsfehlers wurde als Voraussetzung an die Norm die Invarianz gegen unitäre Transformationen gestellt; eine konkrete Wahl wurde jedoch noch nicht getroffen. Hierzu bieten sich zwei Möglichkeiten an:

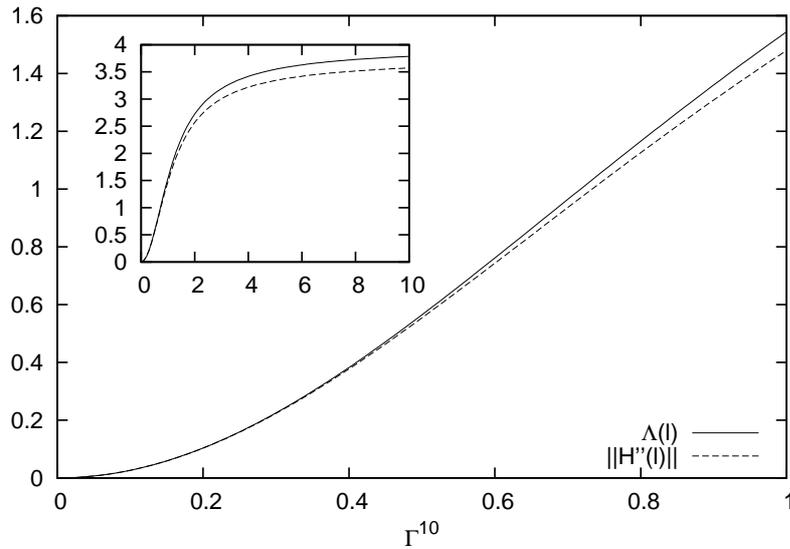


Abbildung 5.6: Abhängigkeit des Trunkierungsfehlers $\Lambda(\ell)$ und des Abstandes in der Spektralnorm $\|\|H''(\ell)\|$ von der Nichtdiagonalität Γ^{10} für $t = 1$ und $\mu = 2$.

Spektralnorm

Die Spektralnorm eines linearen Operators A ist definiert über den maximalen Eigenwert von $A^\dagger A$ als

$$\|A\|_S := \sqrt{\max \text{EV}(A^\dagger A)}. \quad (5.3.25)$$

Ist A ein hermitescher Operator, was für Hamiltonians immer erfüllt ist, dann ist die Spektralnorm gerade der höchsten Eigenwertsbetrag von A . Die Auswertung der Spektralnorm gestaltet sich als schwierig, da eine Diagonalisierung von κ in großen Systemen nicht in Frage kommt; hier müssen Abschätzungen verwendet werden.

Frobeniusnorm

Die Frobeniusnorm eines linearem Operators A ist definiert als Wurzel des Betragsquadrats der Matrixelemente

$$\|A\|_F := \sqrt{\sum_{n,m} |a_{nm}|^2} = \sqrt{\text{Tr} A^\dagger A}. \quad (5.3.26)$$

Insbesondere die Möglichkeit, die Norm mit Hilfe der Spur zu schreiben, macht die Verwendung in Besetzungszahldarstellung attraktiv. Man beachte, dass in (5.3.26) tatsächlich das Betragsquadrat der *Matrixelemente* eingeht, nicht etwa die Koeffizienten aus der Beschreibung in Besetzungszahldarstellung, wie bei der ROD⁷.

⁷Das Bildungsgesetz der ROD erfüllt in der Tat die Kriterien einer Norm. Dennoch ist sie nicht zur Untersuchung des Trunkierungsfehlers geeignet, da die Invarianz gegen unitäre Transformationen im Zustandsraum fehlt.

Im Fall des verwendeten Doppel-Hardcore-Bosonmodells indes hat die Wahl der Norm für den Trunkierungsfehler Λ keine Auswirkungen; die Norm des einzigen zu trunkierenden Operators $b_1^\dagger b_1 b_2^\dagger b_2$ beträgt in beiden Fällen eins.

5.4 Fehlerschranken

Ein wesentlicher Vorzug der Spektralnorm ist die Möglichkeit, eine feste Fehlerschranke für die Grundzustandsenergie abzuleiten. Da die Spektralnorm bei hermiteschen Operatoren dem größten Eigenwertsbetrag entspricht, kann durch die Addition von H'' der niedrigste Eigenwert von H' höchstens um den Normwert angehoben oder weiter abgesenkt werden. Das bedeutet, dass die Grundzustandsenergie von H' sich von der wahren Grundzustandsenergie E_0 höchstens um $\|H''\| \leq \Lambda$ unterscheiden kann⁸.

Im formalen Beweis von UHRIG [Uhr08] stehen $|\psi\rangle$ und $|\psi'\rangle$ für die Grundzustände von H und H' ; E_0 und E'_0 sind die entsprechenden Grundzustandsenergien.

$$\|H''\| \geq \langle \psi' | H'' | \psi' \rangle \quad (5.4.27a)$$

$$= \langle \psi' | H | \psi' \rangle - \langle \psi' | H' | \psi' \rangle \quad (5.4.27b)$$

$$\geq \langle \psi | H | \psi \rangle - \langle \psi' | H' | \psi' \rangle \quad (5.4.27c)$$

$$= E_0 - E'_0 =: \Delta E_0 \quad (5.4.27d)$$

In Schritt (5.4.27a) wurde ausgenutzt, dass die Norm dem betragsgrößten Eigenwert entspricht; an Stelle (5.4.27c) wurde verwendet, dass der Grundzustand stets den niedrigsten Energieerwartungswert besitzt⁹. In umgekehrter Richtung gilt entsprechend

$$\|H''\| \geq -\langle \psi' | H'' | \psi' \rangle \quad (5.4.28a)$$

$$= \langle \psi | H' | \psi \rangle - \langle \psi | H | \psi \rangle \quad (5.4.28b)$$

$$\geq \langle \psi' | H' | \psi' \rangle - \langle \psi | H | \psi \rangle \quad (5.4.28c)$$

$$= E'_0 - E_0 = -\Delta E_0, \quad (5.4.28d)$$

insgesamt ergibt sich so die Abschätzungskette

$$\Lambda(\ell) \geq \|H''(\ell)\| \geq |\Delta E_0| = \left| E_0 - \lim_{\ell \rightarrow \infty} \langle 0 | H'(\ell) | 0 \rangle \right|. \quad (5.4.29)$$

Damit wird es erstmals möglich, in einer CUT-Rechnung a priori eine feste Fehlerschranke für die Grundzustandsenergie anzugeben. In analoger Weise gilt die Abschätzung auch für die

⁸Die Spektralnorm erlaubt auch die Aussage, dass zu jedem Eigenzustand $|\phi'\rangle$ von H' die Abweichung des Eigenwertes vom Erwartungswert $\langle \phi' | H | \phi' \rangle$ kleiner als Λ sein muss. Allerdings ist diese Information für sich genommen noch nicht aussagekräftig, da $|\phi'\rangle$ kein Eigenzustand von H zu sein braucht.

⁹Diese Aussage entspricht dem Ritzschen Variationsverfahren (siehe hierzu beispielsweise [Czy00]).

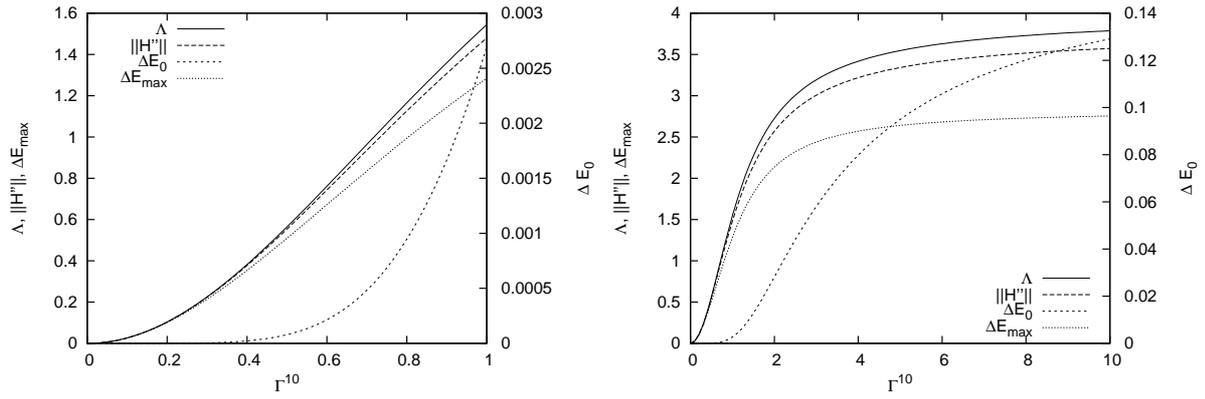


Abbildung 5.7: Trunkierungsfehler Λ , Spektraldistanz $\|H''\|$ sowie die Abweichung der Grundzustandsenergie ΔE_0 und der Energie des höchsten angeregten Zustands ΔE_{\max} in Abhängigkeit von der Nichtdiagonalität Γ^{-10} . Für die Abweichung der Grundzustandsenergie ΔE_0 wurde eine gesonderte Skala verwendet.

Energiedifferenz des höchsten angeregten Zustands ΔE_{\max} .

Abbildung 5.4 zeigt den Fehler der Grundzustandsenergie ΔE_0 und der maximalen Energie ΔE_{\max} für die trunkierte Rechnung des Doppel-Hardcore-Boson-Modells im Vergleich zu den zuvor ermittelten Fehlerschranken durch $\|H''\|$ und Λ . Die Abschätzung wird klar bestätigt; der Fehler der Grundzustandsenergie bleibt mehrere Größenordnungen unter der Fehlerschranke. Es ist deutlich erkennbar, dass der Trunkierungsfehler seinen Hauptbeitrag aus der Abweichung der höchsten Anregungsenergie ΔE_{\max} zieht; die Abschätzung liegt auch bei hoher Nichtdiagonalität nur gering darüber. Diese Beobachtung ist gut nachvollziehbar, da die einzige Trunkierung in der Vernachlässigung der Energiekorrektur des hochliegenden doppelt besetzten Zustands durch den Dichte-Dichte-Term $b_1^\dagger b_1 b_2^\dagger b_2$ besteht.

5.5 Observablen

Bei der Herleitung des Trunkierungsfehlers wurde nicht näher auf das Bildungsgesetz des Generators aus dem Hamiltonian eingegangen. Entsprechend ist die Aufspaltung in Gleichung (5.3.12) für jede kontinuierliche unitäre Transformation möglich, einschließlich der Transformation einer Observablen $O(\ell)$. Für diese kann ebenfalls ein Trunkierungsfehler

$$\Lambda_O(\ell) := \int_0^\ell \left\| (1 - \hat{T}_O)[\eta(\ell'), O'(\ell')] \right\| d\ell' \leq \|O''(\ell)\| \quad (5.5.30)$$

definiert werden. Hierbei steht \hat{T}_O für das Trunkierungsschema der Observablen, das unabhängig von dem des Hamiltonian gewählt werden kann. In analoger Weise liefert Λ_O eine Abschätzung für die Abweichung des niedrigsten und höchsten Eigenwertes durch die Trunkierung. Allerdings ist zu berücksichtigen, dass die Eigenzustände der Observablen nicht mit denen des Hamiltonians übereinstimmen müssen; entsprechend lassen sich hieraus keine konkreten Aussagen über den Fehler der Observablen im Grundzustand treffen.

5.6 Fazit

Die Auswirkungen des Trunkierungsfehlers wurden detailliert untersucht. Es konnten Finite-Size-Effekte durch die Trunkierung nachgewiesen werden, die auf die effektive Systemgröße $\tilde{L} = 3n - 2$ führten. Diese effektive Systemgröße resultiert aus der Beschränkung in der Reichweite der betrachteten physikalischen Prozesse.

Das Problem der Trunkierung wurde in einen konsistenten mathematischen Rahmen eingebunden, wobei die Flussgleichung in einen trunkierten Fluss und einen reinen Fehleranteil aufgespalten wurde. Bei der Untersuchung trat erstmals eine inhomogene Flussgleichung in Erscheinung, die formal gelöst wurde. Hieraus wurde der Trunkierungsfehler Λ abgeleitet, in den ausschließlich aus der trunkierten CUT-Rechnung bekannte Größen eingehen und der damit erstmals eine intrinsische Qualitätsaussage für CUT-Ergebnisse erlaubt. Ferner ermöglicht es die Verwendung der Spektralnorm, feste Schranken für den durch Trunkierung verursachten Fehler der Grundzustandsenergie und des höchsten angeregten Niveaus anzugeben.

Die Ergebnisse der theoretischen Untersuchung wurden durch Rechnungen am trunkierten Doppel-Hardcore-Boson-System untermauert. Es zeigte sich, dass der Trunkierungsfehler Λ den tatsächlichen Abstand zum untrunkierten Ergebnis sehr genau wiedergeben konnte. Die Fehlerschranken wurden bestätigt; hierbei zeigte sich, dass das höchste Energieniveau die Fehlerschranke nahezu ausschöpft, während im Grundzustand nur geringe Abweichungen auftreten.

Insgesamt scheint der abgeleitete Trunkierungsfehler eine aussichtsreiche neue Perspektive zum Umgang mit dem Problem der Trunkierung zu eröffnen; er kann als nützliches Werkzeug dienen, um Trunkierungseffekte besser zu untersuchen und gezielte Optimierungen vorzunehmen. Besonders hervorzuheben ist, dass neben der abstrakten Spektraldistanz $\|H''(\ell)\|$ auch eine konkrete Fehlerschranke für echte physikalische Größen angegeben werden können. Beim Übergang in ein System thermodynamischer Größe sind allerdings neue Herausforderungen in der praktischen Verwendung zu erwarten.

Gemischt zu bewerten ist der sehr niedrige Fehler der Grundzustandsenergie im Vergleich zur ermittelten Fehlerschranke. Diese wird durch die hohen Abweichungen im höchstliegenden

Niveau verursacht, das als Einziges von der Trunkierung betroffen war. Aufgrund der sehr geringen Systemgröße kann die Trunkierung eines Terms bereits erhebliche Auswirkungen auf das System zeigen. Möglicherweise kann hier die Untersuchung eines thermodynamischen Systems mit den üblichen, sehr weit ausgedehnten Trunkierungsschemata tatsächlich zu besseren Resultaten führen.

Für eine weitergehende Bewertung des Trunkierungsfehlers ist daher eine Untersuchung im thermodynamischen System unabdingbar. Hierauf und auf sich ergebende praktische Herausforderungen wird im folgenden Kapitel eingegangen.

6 Trunkierungsfehler der dimerisierten Heisenbergkette

In diesem Kapitel wird der zuvor entwickelte Formalismus des Trunkierungsfehlers

$$\Lambda(\ell) := \int_0^\ell \left\| (1 - \hat{T})[\eta(\ell), H'(\ell)] \right\| d\ell' = \int_0^\ell \|\kappa(\ell')\| d\ell' \geq \|H''(\ell)\|$$

auf ein ausgedehntes physikalisches System angewandt. Hierzu wird zunächst ausführlich auf die Berechnung der Norm und die notwendigen Abschätzungen für die Arbeit mit Trunkierungsfehlern in unendlichen Systemen aus Hardcorebosonen eingegangen. Danach werden die entwickelten Techniken auf das aus Kapitel 4 bekannte dimerisierte Heisenbergmodell im äußeren Magnetfeld angewandt. Die sich hieraus ergebenden Fragestellungen führen auf eine weitergehende Untersuchung im endlichen System.

6.1 Berechnung in ausgedehnten Hardcore-Boson-Systemen

Um die Inhomogenität κ zu berechnen, müssen die trunkierten Terme aus dem Kommutator $[\eta(\ell), H'(\ell)]$ berechnet werden. Hierbei wird der Hamiltonian als $H'(\ell) = \sum_k f_k(\ell) h_k$ dargestellt, wobei die $f_k(\ell)$ die Koeffizienten des Hamiltonian und die h_k die zugehörigen Elemente der Operatorbasis sind. Entsprechend wird der Generator als $\eta(\ell) = \sum_j \eta_j f_j(\ell) h_j$ geschrieben, wobei η_j einen von der Wahl des Generatorschemas bestimmten Vorfaktor darstellt.

Das Gleichungssystem für die Inhomogenität κ lässt sich dann als

$$\kappa(\ell) = (1 - \hat{T}) [\eta(\ell), H'(\ell)] \tag{6.1.1a}$$

$$= \sum_{j,k} \eta_j f_j(\ell) f_k(\ell) (1 - \hat{T}) [h_j, h_k] \tag{6.1.1b}$$

$$= \sum_{i,j,k} f_j(\ell) f_k(\ell) N_{ijk} h_i \tag{6.1.1c}$$

schreiben. Hierbei sind die N_{ijk} Einträge eines Gleichungssystems, das analog zu den Einträgen

des Differentialgleichungssystems D_{ijk} des trunkierten Hamiltonians durch Koeffizientenvergleich bestimmt wird.

6.1.1 Norm lokaler Operatoren

Zunächst soll die Norm eines linearen Operators A für ein System mit nur einem Gitterplatz und f Quasiteilchen-Freiheitsgraden (flavour) berechnet werden.

Lässt sich der Operator als $A = \alpha a^{\dagger n} a^m$ schreiben, so ist

$$A^\dagger A = |\alpha|^2 a^{\dagger m} a^m = |\alpha|^2 |m\rangle \langle m|. \quad (6.1.2)$$

Der einzige nichtverschwindende Eigenwert von $A^\dagger A$ ist damit $|\alpha|^2$; sowohl Spektral- als auch Frobeniusnorm liefern als Normwert $|\alpha|$. Dies gilt auch, wenn A entweder die Erzeugung eines Quasiteilchens aus dem Vakuum ($A = \alpha a^{\dagger m}$) oder die Vernichtung in das Vakuum beinhaltet ($A = \alpha a^n$).

Die einzige Ausnahme ergibt sich, wenn $A = \alpha \mathbb{1}$ ein Vielfaches der Identität ist; in diesem Fall gilt

$$A^\dagger A = |\alpha|^2 \mathbb{1}. \quad (6.1.3)$$

Damit ist der Eigenwert $|\alpha|^2$ f -fach entartet. Somit ergibt sich für die Spektralnorm erneut der Wert $|\alpha|$, für die Frobeniusnorm hingegen $\sqrt{f} |\alpha|$.

6.1.2 Norm ausgedehnter Terme

Untersucht man einen ausgedehnten Term $A = \alpha \prod_j A_{i(j)}^{n(j)}$ hinsichtlich seiner Norm, ist es sinnvoll, zwischen seiner Wirkung auf dem Cluster und dem Rest des Systems zu unterscheiden. Auf dem Cluster wirkt auf jedem Gitterplatz ein normalgeordneter Hardcore-Boson-Operator. Jeder lokale Operator $\mathcal{A}_i = |b_1(i)\rangle_i \langle b_2(i)|_i$ in A besitzt genau ein Matricelement für die Umwandlung des zum jeweiligen Vernichter passenden Zustands $|b_2(i)\rangle_i$ in den zum Erzeuger passenden Zustand $|b_1(i)\rangle_i$. Entsprechend bewirkt A als Tensorprodukt der lokalen Operatoren gerade den Übergang des Clusters vom Zustand $|B_2\rangle = \bigotimes_i |b_2(i)\rangle_i$ in den Zustand $|B_1\rangle = \bigotimes_i |b_1(i)\rangle_i$.

Außerhalb seines Clusters C bewirkt der Operator A hingegen keine Änderung des Zustands. Insgesamt lässt sich das Wirken des Operators A also als

$$A = \alpha |B_1\rangle_C \langle B_2|_C \otimes \left(\bigotimes_{i \notin C(A)} \mathbb{1} \right) \quad (6.1.4)$$

zusammenfassen¹. Da

$$A^\dagger A = |\alpha|^2 |B_2\rangle_C \langle B_2|_C \otimes \left(\bigotimes_{i \notin C(A)} \mathbb{1} \right). \quad (6.1.5)$$

in ein einfaches Tensorprodukt zerfällt, kann das Eigenwertspektrum leicht abgelesen werden. Alle Eigenzustände von $A^\dagger A$ mit nichtverschwindendem Eigenwert müssen im Unterraum der Zustände liegen, die auf dem Cluster den Anteil $|B_2\rangle$ enthalten. Alle dieser Bedingung genügenden Zustände tragen den Eigenwert $|\alpha|^2$. Jede der lokalen Identitäten erhöht die Entartung um einen Faktor $f = \dim \mathbb{H}$. Ist n die Anzahl der Gitterplätze im Cluster von A , ist der Eigenwert d^{N-n} -fach entartet.

Damit beträgt die Spektralnorm des Terms A

$$\|A\|_S = |\alpha| \quad (6.1.6)$$

und die Frobeniusnorm

$$\|A\|_F = |\alpha| \cdot f^{\frac{N-n}{2}}. \quad (6.1.7)$$

6.1.3 Renormierung im unendlichen System

Aufgrund der Translationssymmetrie des Systems kann eine Translationsgruppe von Termen durch einen einzelnen Repräsentanten beschrieben werden; umgekehrt muss für jeden Repräsentanten vor der Normberechnung über die gesamte Translationsgruppe von Termen summiert werden, was zu einem unendlichen Normwert führen würde. Daher muss die Definition der Normen aus Abschnitt 5.3.5 auf einen endlichen Wert renormiert werden.

Man betrachtet hierzu die Norm des Operators

$$I := \sum_i^N \mathbb{1} = N \cdot \mathbb{1}, \quad (6.1.8)$$

der für jeden Gitterplatz des Systems einen Identitätsoperator enthält.

Als Vielfaches der Identität wirkt I auf einem Cluster der Größe N ; der Ausdruck $I^\dagger I = I = N^2 \cdot \mathbb{1}$ hat den f^N -fach entarteten Eigenwert N^2 . Damit ist also

$$\|I\|_S = N \quad \text{und} \quad (6.1.9)$$

$$\|I\|_F = N \cdot f^{\frac{N}{2}}. \quad (6.1.10)$$

¹In Gleichung (6.1.4) muss bei der Ausführung des Tensorproduktes darauf geachtet werden, die Ordnung des Terms nach Gitterplätzen nicht zu verletzen.

In beiden Fällen ergibt sich ein konstanter, von der Systemgröße N abhängiger Ausdruck. Hiermit wird die renormierte Spektralnorm

$$\|A\|_{RS} := \frac{\|A\|_S}{N} \quad (6.1.11)$$

und die renormierte Frobeniusnorm

$$\|A\|_{RF} := \frac{\|A\|_F}{N f^{\frac{N}{2}}} \quad (6.1.12)$$

definiert, die auch im unendlichen System für Translationsgruppen von Termen endliche, wohldefinierte Werte annehmen. Die Division durch einen konstanten Faktor beeinträchtigt die Gültigkeit der Normaxiome nicht. Für die Fehlerschranke ist zu beachten, dass die renormierte Spektralnorm nun eine obere Schranke für den Fehler der Grundzustandsenergie pro Gitterplatz liefert.

6.1.4 Dichte-Auswahlregel der Frobeniusnorm

Die Frobeniusnorm zeigt eine besondere Auffälligkeit in Verbindung mit der Translationssymmetrie des unendlichen Systems. Man betrachtet hierzu exemplarisch den Operator

$$A = \sum_i a_i, \quad (6.1.13)$$

der die Summe über die Translationsgruppe eines Vernichtungsoperators a_i für jeden Gitterplatz des Systems ausdrückt.

Die Frobeniusnorm wird zu

$$\|A\|_F = \sqrt{\text{Tr} A^\dagger A} = \sqrt{\sum_k \langle k | \left(\sum_i a_i^\dagger \right) \left(\sum_j a_j \right) | k \rangle} \quad (6.1.14)$$

$$= \sqrt{\sum_{k,i,j} \langle k | a_i^\dagger a_j | k \rangle} \quad (6.1.15)$$

gebildet. Hierbei entspricht die Laufvariable k den Zuständen des Gitters. Die Diagonalelemente in Gleichung (6.1.15) können allerdings aufgrund der Orthogonalität der Zustände $|k\rangle$ nur dann einen Beitrag zur Spur liefern, wenn der von a_j durch Vernichtung eines Teilchens am Gitterplatz j veränderte Zustand durch a_i wiederhergestellt wird. Hierfür müssen beide

Operatoren am selben Gitterplatz wirken. Es gilt daher weiter

$$\|A\|_F = \sqrt{\sum_{k,i,j} \delta_{i,j} \langle k | a_i^\dagger a_j | k \rangle} = \sqrt{\sum_{k,i} \langle k | a_i^\dagger a_i | k \rangle} = \sqrt{N \sum_k \langle k | a_i^\dagger a_i | k \rangle} = \sqrt{N} \|a_i\|_F. \quad (6.1.16)$$

Die Frobeniusnorm wächst damit für die Summe der lokalen Vernichter nur subextensiv; daher verschwindet die renormierte Frobeniusnorm im thermodynamischen Limes. Dieses Argument lässt sich für die Translationsgruppen aller Terme endlicher Ausdehnung² fortsetzen, die lokal Teilchen erzeugen oder vernichten. Demnach liefern ausschließlich Teilchendichteterme einen extensiven Beitrag.

Ein über die renormierte Frobeniusnorm definierter Trunkierungsfehler verschwindet daher, wenn keine Dichteterme trunkiert werden³, während die physikalischen Eigenschaften des Systems fehlerbehaftet bleiben. Dieses Verhalten ist unphysikalisch; daher wird für Rechnungen im unendlichen System ausschließlich die Spektralnorm verwendet.

6.1.5 Zerlegung mittels Dreiecksungleichung

Bisher wurde ausgenutzt, dass es sich bei den zu untersuchenden Operatoren um Vielfache der Operatorbasis des Systems handelte. Tatsächlich muss bei der Fehlerabschätzung beim Ausdruck

$$\Lambda(\ell) \geq \|H''(\ell)\| \geq |\Delta E_0| = \left| E_0 - \lim_{\ell \rightarrow \infty} \langle 0 | H'(\ell) | 0 \rangle \right| \quad (6.1.17)$$

die Norm einer Linearkombination von außerordentlich vielen Termen⁴ berechnet werden. Insbesondere enthält der Trunkierungshamiltonian $H''(\ell)$ immer auch die volle Translationsgruppe des Gitters, die im unendlichen System entsprechend eine unendliche Mächtigkeit erreicht.

Eine exakte Berechnung des Normwertes anhand des Eigenwertspektrums von $H''(\ell)^\dagger H''(\ell)$ ist damit praktisch unmöglich. Es bleibt daher nur die Möglichkeit, die jeder Norm innewohnende Dreiecksungleichung

$$\|A + B\| \leq \|A\| + \|B\| \quad (6.1.18)$$

auszunutzen, um den Ausdruck (6.1.17) sukzessive bis zu einzelnen Basisoperatoren auszureduzieren.

²Die Argumentation versagt, wenn A eine Periodizität aufweist, also im endlichen System oder bei unendlich weit ausgedehnten Termen. Diese können in einer im Ortsraum trunkierten Rechnung nicht auftreten.

³Die Zahl der Repräsentanten bleibt auch bei dieser Trunkierung endlich, da Dichteterme keine Änderung der Teilchenzahl bewirken und daher nicht im Generator auftreten.

⁴Die Anzahl der zur Darstellung nötigen Repräsentanten überschritt bereits bei der 8-6-3-Trunkierung die Millionenmarke.

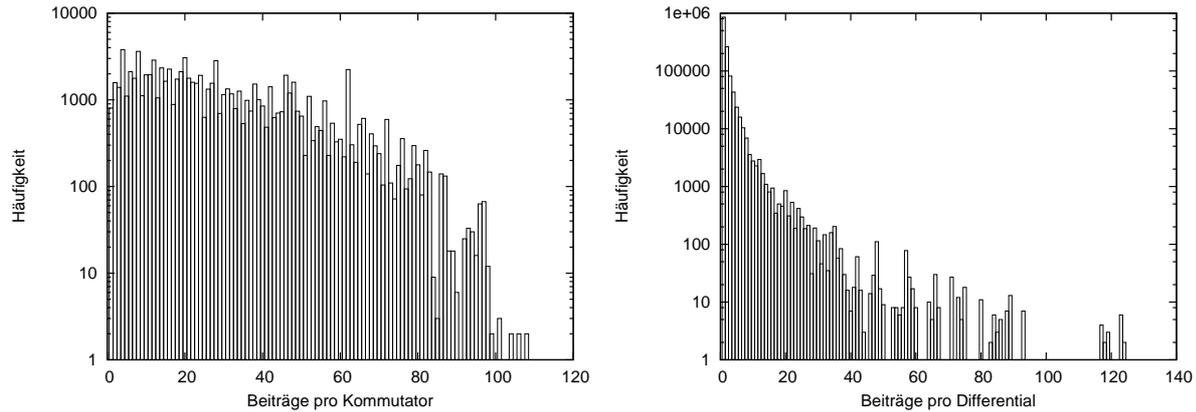


Abbildung 6.1: Darstellung des möglichen Einsparungspotentials für die Normberechnung durch die gemeinsame Abschätzung von Termgruppen. Links: Häufigkeitsverteilung für die Mächtigkeit der Gruppen von Termen, die bei der Bildung desselben Kommutators entstehen. Rechts: Häufigkeitsverteilung für die Mächtigkeit der Gruppen von Termen, die denselben Operator h_i bei der Kommutatorbildung ergeben. Verwendet wurde der 0:n-Generator mit 8-6-3-Trunkierung.

Für den Trunkierungsfehler $\Lambda(\ell)$ erhält man damit ausgehend vom Normgleichungssystem (6.1.1) die Abschätzung

$$\partial_\ell \Lambda(\ell) = \|\kappa(\ell)\| = \left\| \sum_{i,j,k} f_j(\ell) f_k(\ell) N_{ijk} h_i \right\| \quad (6.1.19)$$

$$\leq \sum_{i,j,k} |f_j(\ell)| |f_k(\ell)| |N_{ijk}| \|h_i\| := \partial_\ell \tilde{\Lambda}(\ell). \quad (6.1.20)$$

Damit wurde die Größe $\tilde{\Lambda}(\ell) \geq \Lambda(\ell)$ eingeführt, die den Trunkierungsfehler nach oben hin abschätzt. $\tilde{\Lambda}(\ell)$ lässt sich wesentlich einfacher berechnen als $\Lambda(\ell)$. Anstelle der Berechnung des Spektrums müssen lediglich Koeffizienten multipliziert werden. Die Berechnung der N_{ijk} ist einmalig beim Aufstellen der Flussgleichung vorzunehmen. Diese Methode hat allerdings den Preis, den abgeschätzten Trunkierungsfehler durch intensive Verwendung der Dreiecksungleichung möglicherweise drastisch zu vergrößern. Die Eignung dieses Verfahrens muss in der Praxis untersucht werden.

6.1.6 Zusammenfassen des DGL-Systems

Um die Auswirkungen der Abschätzung möglichst klein zu halten ist es günstig, die Dreiecksungleichung möglichst sparsam zu verwenden und, soweit möglich, die Norm einer Summe von Termen gemeinsam zu bestimmen. Während die Koeffizienten im Allgemeinen beliebige Werte annehmen, können zusätzliche Strukturinformationen aus den Normgleichungen genutzt werden, um Terme gleicher Vorfaktoren gemeinsam abzuschätzen. Hierbei wurden zwei Wege gefunden:

6.1.6.1 Zusammenfassen nach Kombinationen

In Gleichung (6.1.20) wurde die Dreifachsumme \sum_{ijk} vollständig nach der Dreiecksungleichung aufgespalten. An dieser Stelle ist es möglich, eine schwächere Abschätzung

$$\left\| \sum_{i,j,k} f_j(\ell) f_k(\ell) N_{ijk} h_i \right\| \leq \sum_{j,k} |f_j(\ell)| |f_k(\ell)| \left\| \sum_i N_{ijk} h_i \right\| \quad (6.1.21)$$

$$= \sum_{j,k} |f_j(\ell)| |f_k(\ell)| \left\| \sum_{jk} [\eta_j h_j, h_k] \right\| =: \sum_{j,k} |f_j(\ell)| |f_k(\ell)| w_{jk} \quad (6.1.22)$$

vorzunehmen. Hierbei werden Terme, die sich aus der Bildung des Kommutators $[\eta_j h_j, h_k]$ ergeben, gemeinsam abgeschätzt. Da dieser Ausdruck unabhängig von den Koeffizienten $f_j(\ell)$ und $f_k(\ell)$ ist, kann das Gewicht w_{jk} einmalig beim Aufstellen des Normgleichungssystems bestimmt werden. Hierzu wird im Allgemeinen eine numerische Diagonalisierung in einem endlichen System nötig werden, das groß genug ist, die Cluster aller entstandenen Terme abzudecken. Dies kann angesichts der hohen Zahl von Termen mit gegebenenfalls hoher Ausdehnung einen deutlichen Mehraufwand bedeuten. Abbildung 6.1.6 (links) zeigt ein Histogramm für die Häufigkeitsverteilung der Kommutatorkombinationen eingeteilt nach der Anzahl der Terme, die gemeinsam abgeschätzt werden können. Es zeigt sich eine recht breite Verteilung; am häufigsten treten Gruppen mit ≤ 20 Termen auf. Durchschnittlich können im Fall des 0:n-Generators bei 8-6-3-Trunkierung 30 Terme in einer Gruppe gemeinsam abgeschätzt werden.

6.1.6.2 Zusammenfassen nach erzeugten Termen

Die Abschätzung in Gleichung (6.1.20) kann aber auch zu

$$\left\| \sum_{i,j,k} f_j(\ell) f_k(\ell) N_{ijk} h_i \right\| \leq \sum_i \|h_i\| \left| \sum_{j,k} f_j(\ell) f_k(\ell) N_{ijk} \right| \quad (6.1.23)$$

aufgespalten werden. Hierbei werden alle Vorfaktoren des gleichen erzeugten Operators h_i zusammengefasst. Die Norm des Operators kann auch hier wieder einmalig bestimmt werden. Allerdings ist hierzu keine numerische Diagonalisierung erforderlich, sondern kann wie in diesem Kapitel gezeigt direkt abgelesen werden. Im Gegensatz zur Zusammenfassung nach Kommutatorkombinationen bleibt die volle Strukturinformation über den Term erhalten.

Ein Nachteil gegenüber der Zusammenfassung nach Kommutatorkombinationen ist das geringere Potential zur gemeinsamen Abschätzung vieler Terme. In Abbildung 6.1.6 rechts ist zu erkennen, dass das Normgleichungssystem nur dünn besetzt ist. Durchschnittlich tritt jeder trunkierte Term bei einer Rechnung mit dem 0:n-Generator in 8-6-3-Trunkierung 2,6 mal

Symmetrie	Beispiel	w_0	w_A	$w_{A,S}$
$\mathbb{1}, A$	$t_x^\dagger t_x$	2	1	1
$\mathbb{1}, S$	t_z	2	2	1
$\mathbb{1}, AS$	$t_x^\dagger t_y$	2	2	1
$\mathbb{1}, A, S, AS$	$t_z^\dagger t_z$	1	1	1
$\mathbb{1}$	t_x	4	1	$\sqrt{2}$

Tabelle 6.1: Übersicht der Gewichte für Repräsentanten geordnet nach ihrer Symmetrie. A entspricht der Adjunktion, S gegenüber der xy -Spinsymmetrie. Das Gewicht ohne Nutzung von Symmetrien ist w_0 ; w_A ist das Gewicht bei Nutzung der Adjunktionssymmetrie, $w_{A,S}$ dasjenige bei Nutzung von Adjunktions- und Spinsymmetrie.

auf, daher sind die erwarteten Einsparungseffekte durch die gemeinsame Abschätzung hier geringer.

Ein entscheidender Vorteil dieser Art der Abschätzung ist allerdings, dass die Struktur der trunkierten Terme direkt bekannt ist. Hierdurch können weitere Optimierungen wie die Ausnutzung von Symmetriegruppen vorgenommen werden. Weiterhin wird genau bekannt, welche trunkierten Terme wie stark in den Trunkierungsfehler eingehen. Damit steht ein Zugang zur Verfügung, Terme zu untersuchen, die den Gesamtfehler besonders stark beeinflussen, und das Trunkierungsschema gezielt zu optimieren. Aufgrund dieser Möglichkeiten wird im Folgenden diese Art des Zusammenfassens vollzogen.

6.1.7 Ausnutzen von Symmetrien

Neben dem Bildungsgesetz des Normgleichungssystems können auch Symmetrien ausgenutzt werden, um Terme gleichen Vorfaktors gemeinsam abzuschätzen. Hierdurch lässt sich den Repräsentanten des Normgleichungssystems ein geringerer Gewichtungsfaktor zuordnen als bei Abschätzung über die Dreiecksungleichung.

Diese Ausnutzung zur Normberechnung ist strikt zu trennen von der Ausnutzung der Symmetrien bei der Aufstellung des Normgleichungssystems. Bei der Aufstellung des Normgleichungssystems werden Symmetrien genutzt, um zu einander symmetrische Terme durch einen gemeinsamen Repräsentanten auszudrücken und so das Gleichungssystem kompakter zu schreiben. An den Normwerten der Terme ändert sich dabei nichts. Ziel der Nutzung zur Normberechnung ist es dagegen, für die ganze Symmetriegruppe eine Normabschätzung zu bestimmen, die kleiner ist als die Summe der Normen pro Term der Symmetriegruppe.

Wird keine Symmetrie ausgenutzt, wird die Norm der Symmetriegruppe zu einem Repräsen-

tantan B

$$\left\| \sum_G B \right\| \leq w_0 \|B\| \quad (6.1.24)$$

durch das Produkt aus Norm des Repräsentanten B und der Anzahl der Terme w_0 in der Symmetriegruppe abgeschätzt. Dies lässt sich daher als Gewicht des Repräsentanten auffassen. Nach Kapitel 3 ist w_0 hierbei der Quotient aus Faltigkeit der Symmetriegruppe und Multiplizität des Repräsentanten.

Tatsächlich lässt sich die Abschätzung effizienter realisieren, wenn die Kenntnis über die Symmetrieeigenschaften der Terme eingeht. Exemplarisch betrachte man hierzu zwei adjungierte Operatoren $B = |b_1\rangle \langle b_2|$ und $B^\dagger = |b_2\rangle \langle b_1|$ auf ihrem gemeinsamen Cluster. Jeder für sich besitzt als Spektralnorm den Wert eins. Für die Summe beider Operatoren gilt aber

$$\|B + B^\dagger\|_S = \sqrt{\max \text{EV} (|b_1\rangle \langle b_2| + |b_2\rangle \langle b_1|)^\dagger (|b_1\rangle \langle b_2| + |b_2\rangle \langle b_1|)} \quad (6.1.25)$$

$$= \sqrt{\max \text{EV} |b_1\rangle \langle b_1| + |b_2\rangle \langle b_2|} = 1 \quad (6.1.26)$$

$$< \|B\|_S + \|B^\dagger\|_S. \quad (6.1.27)$$

Damit ergibt sich durch Ausnutzen der Adjunktionssymmetrie in der Normabschätzung eine Verbesserung um den Faktor zwei für nicht-selbstadjungierte Repräsentanten. Für selbstadjungierte Repräsentanten ergibt sich keine Änderung.

Analog lässt sich auch die xy -Spinsymmetrie behandeln; die Resultate für die Gewichte finden sich in 6.1.7. Bei Repräsentanten, die keinerlei Symmetrie aufweisen, ist eine Einsparung von einem Gewicht von 4 auf $\sqrt{2}$ möglich. Da der dominante Anteil der trunkierten Terme unsymmetrisch ist, wird dieser Faktor fast vollständig in der gesamten Normabschätzung eingespart.

Die Behandlung der Spiegelsymmetrie ist komplizierter, da sich hierbei der Cluster des Terms ändern kann. Die Spiegelsymmetrie wird daher nur beim Aufstellen des Normgleichungssystems genutzt⁵, aber nicht in der Normabschätzung verwendet.

6.2 Trunkierungsfehler der unendlichen Kette

6.2.1 Fehlerabschätzung

Mit zunehmender Interdimerkopplung kommt es zur Delokalisierung der Triplonen und langreichweitige Wechselwirkungen gewinnen an Bedeutung; hierdurch ist ein Anstieg des Trun-

⁵Hierdurch verdoppeln sich die Gewichte nicht spiegelsymmetrischer Terme gegenüber Tabelle 6.1.7.

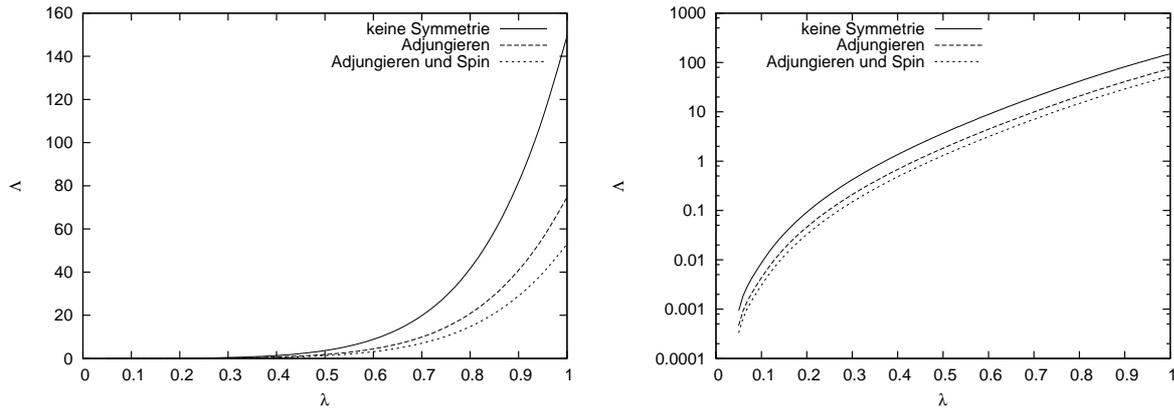


Abbildung 6.2: Abhängigkeit der oberen Trunkierungsfehlerschranke $\tilde{\Lambda}$ von der Stärke der Interdimerkopplung λ für den 0:n-Generator in einer 8-6-3-Trunkierung ohne Magnetfeld. Aufgetragen sind die Werte ohne Berücksichtigung der Symmetrien, unter Ausnutzung der reinen Adjunktionssymmetrie sowie unter Berücksichtigung von Adjunktions- und Spinsymmetrie (links: lineare Skala, rechts: logarithmische Skala).

kierungsfehlers zu erwarten. In Abbildung 6.2.1 ist die ermittelte obere Schranke des Trunkierungsfehlers $\tilde{\Lambda}$ in Abhängigkeit von der Interdimerkopplung λ wiedergegeben. Tatsächlich schlägt sich die erwartete Delokalisierung ausgesprochen stark in $\tilde{\Lambda}$ wieder, der abgeschätzte Trunkierungsfehler steigt über weite Teile des Parameterbereichs nahezu exponentiell an und übersteigt bei $\lambda = 1$ die Grundzustandsenergie um mehr als eine Größenordnung.

Es zeigt sich, dass die ermittelte obere Beschränktheit des Fehlers der Grundzustandsenergie ΔE_0 durch $\tilde{\Lambda}$ unzweckmäßig wird. Erst bei einer schwachen Interdimerkopplung von $\lambda < 0,1$ kann die Gültigkeit der Grundzustandsenergie bis auf 10^{-2} durch $\tilde{\Lambda}$ garantiert werden, während der Vergleich mit Referenzresultaten aus einer DMRG-Rechnung bereits bis auf 10^{-6} übereinstimmende Resultate liefert.

In Abschnitt 6.1.7 wurde dargelegt, wie der Wert des Trunkierungsfehlers Λ durch Ausnutzung von Symmetrien effizienter abgeschätzt werden kann. Wie in Abbildung 6.2.1 zu erkennen ist, wird die theoretisch optimal mögliche Einsparung eines Faktors 2 bei Nutzung der Adjunktionssymmetrie und eines zusätzlichen Faktors $\sqrt{2}$ mit der Spinsymmetrie nahezu vollständig umgesetzt. Im Folgenden wird daher ausschließlich die durch Ausnutzung der Adjunktions- und Spinsymmetrie optimierte obere Schranke des Trunkierungsfehlers verwendet.

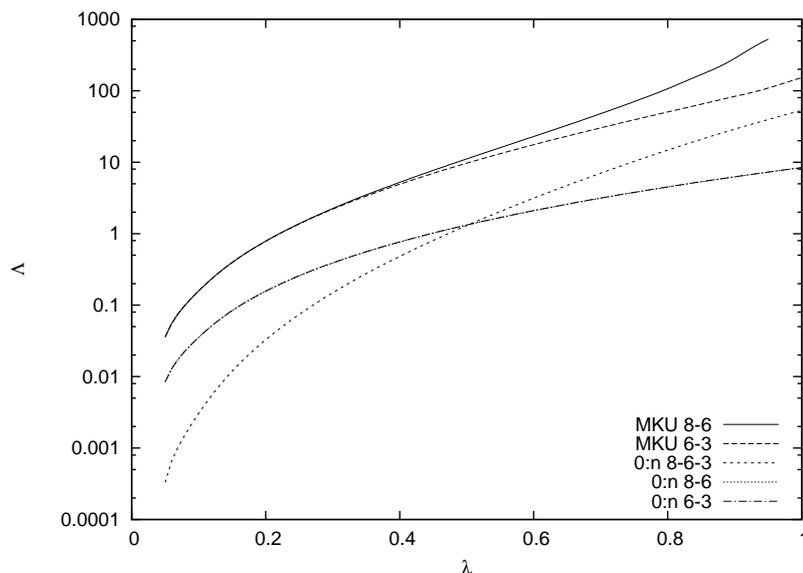


Abbildung 6.3: Abhängigkeit der Trunkierungsfehlerschranke $\tilde{\Lambda}$ von der Stärke der Interdimerkoppelung λ für verschiedene Generator- und Trunkierungsschemata. Die Werte der 8-6-Rechnung mit dem 0:n-Generator liegen äußerst knapp unter denen der 6-3-Rechnung; die Graphen überdecken sich. Die Rechnung des MKU-Generators in der 8-6-Trunkierung divergierte bei $\lambda = 1$.

6.2.2 Das Trunkierungsparadoxon

Abbildung 6.2.2 zeigt den Verlauf des abgeschätzten Trunkierungsfehlers für verschiedene Generatoren und Trunkierungsschemata. Die Werte des MKU-Generators liegen bei den betrachteten Trunkierungen um eine Größenordnung über denen des 0:n-Generators; dieser Sachverhalt lässt sich dadurch erklären, dass der MKU-Generator neben dem Vakuumzustand auch andere Teilchenräume umordnen muss.

Stark auffällig ist, dass die Abschätzung des Trunkierungsfehlers beim MKU-Generator im 8-6-Schema einen höheren Wert liefert als im 6-3-Schema. Eine ähnliche Situation tritt beim 0:n-Generator ab $\lambda \approx 0,5$ auf. Dieses Verhalten ist paradox, da man anschaulich erwartet, dass die Berücksichtigung hoher und langreichweitiger Wechselwirkungen den Informationsverlust verringert; der entsprechende Trunkierungsfehler sollte damit ebenfalls absinken.

Eine mögliche Erklärung für dieses Verhalten ergibt sich aus der Anzahl der Terme im trunkierten Hamiltonian. Bei dem der 8-6-3-Trunkierung enthält $\kappa(\ell)$ 1.318.163 Terme, die abgeschätzt werden müssen⁶; bei 8-6-Trunkierung sind dies nur 31.827, bei 6-3-Trunkierung sind es lediglich 6.150. In der Folge wird beim 8-6-3-Trunkierungsschema wesentlich häufiger von der Dreiecksungleichung Gebrauch gemacht, wodurch $\tilde{\Lambda}$ zusätzlich anwächst. Es ist daher nicht klar, ob dieses Verhalten eine Schwäche des Trunkierungsfehlers Λ oder der Abschätzung durch die Dreiecksungleichung ist.

⁶Alle Angaben beziehen sich auf den 0:n-Generator ohne äußeres Magnetfeld.

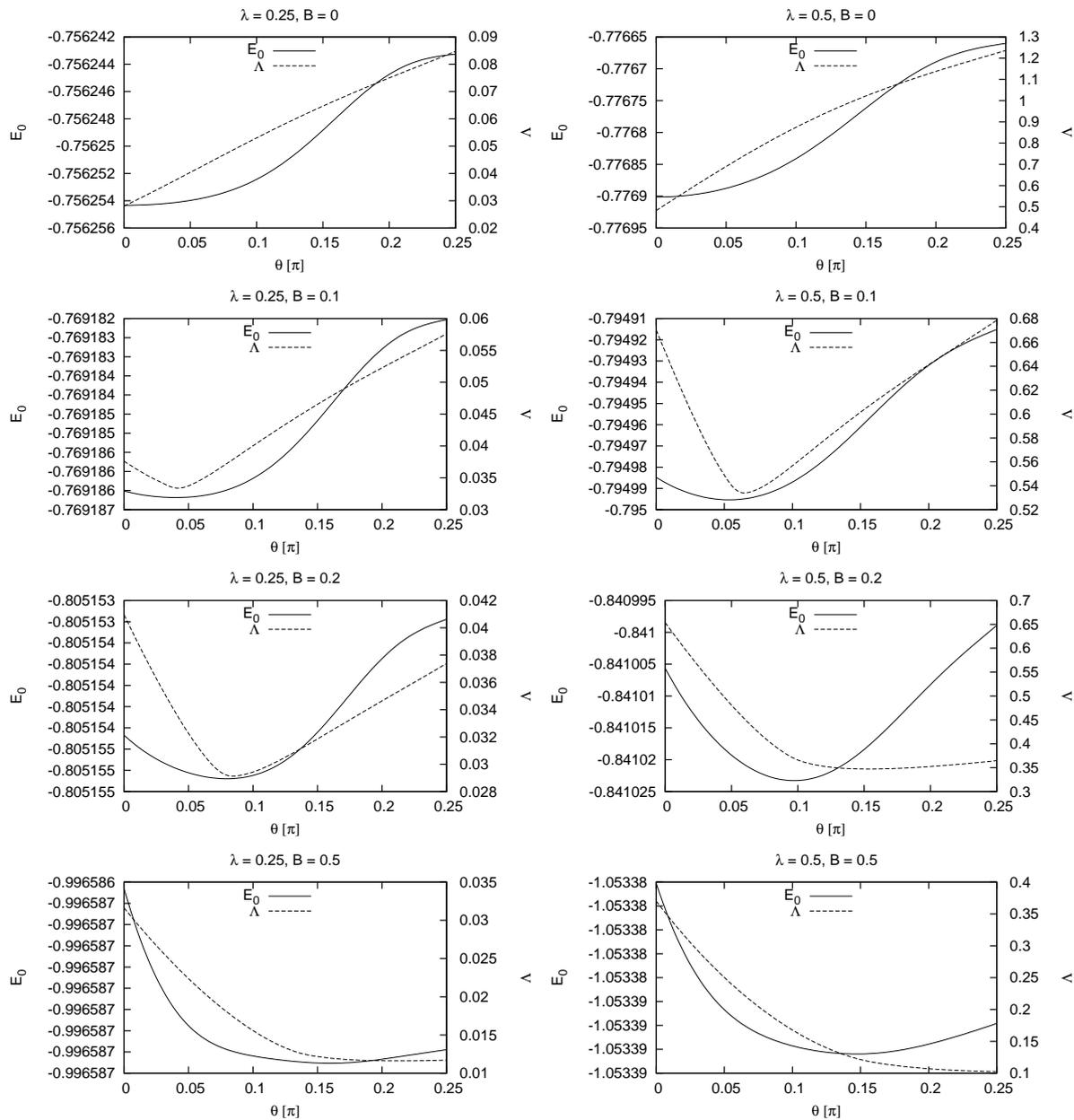


Abbildung 6.4: Abhängigkeit der Grundzustandsenergie E_0 und der oberen Schranke des Trunkierungsfehlers $\bar{\Lambda}$ vom Drehwinkel θ für verschiedene alternierende Magnetfeldstärken B und Interdimerkopplungen $\lambda = 0,25$ (links) und $\lambda = 0,5$ (rechts). Verwendet wurde der 0:n-Generator mit dem 8-6-3-Trunkierungsschema.

6.2.3 Kontinuierliche Variation des Trunkierungsschemas

Die Möglichkeit zur Optimierung des Trunkierungsschemas ist eine der Motivationen für die Untersuchung des Trunkierungsfehlers. Kennzeichnend für ein gutes Trunkierungsschema ist ein gutes Verhältnis aus dem Gewinn an Genauigkeit und dem numerischen Mehraufwand durch die Berücksichtigung zusätzlicher Terme. In diesem Abschnitt soll untersucht werden,

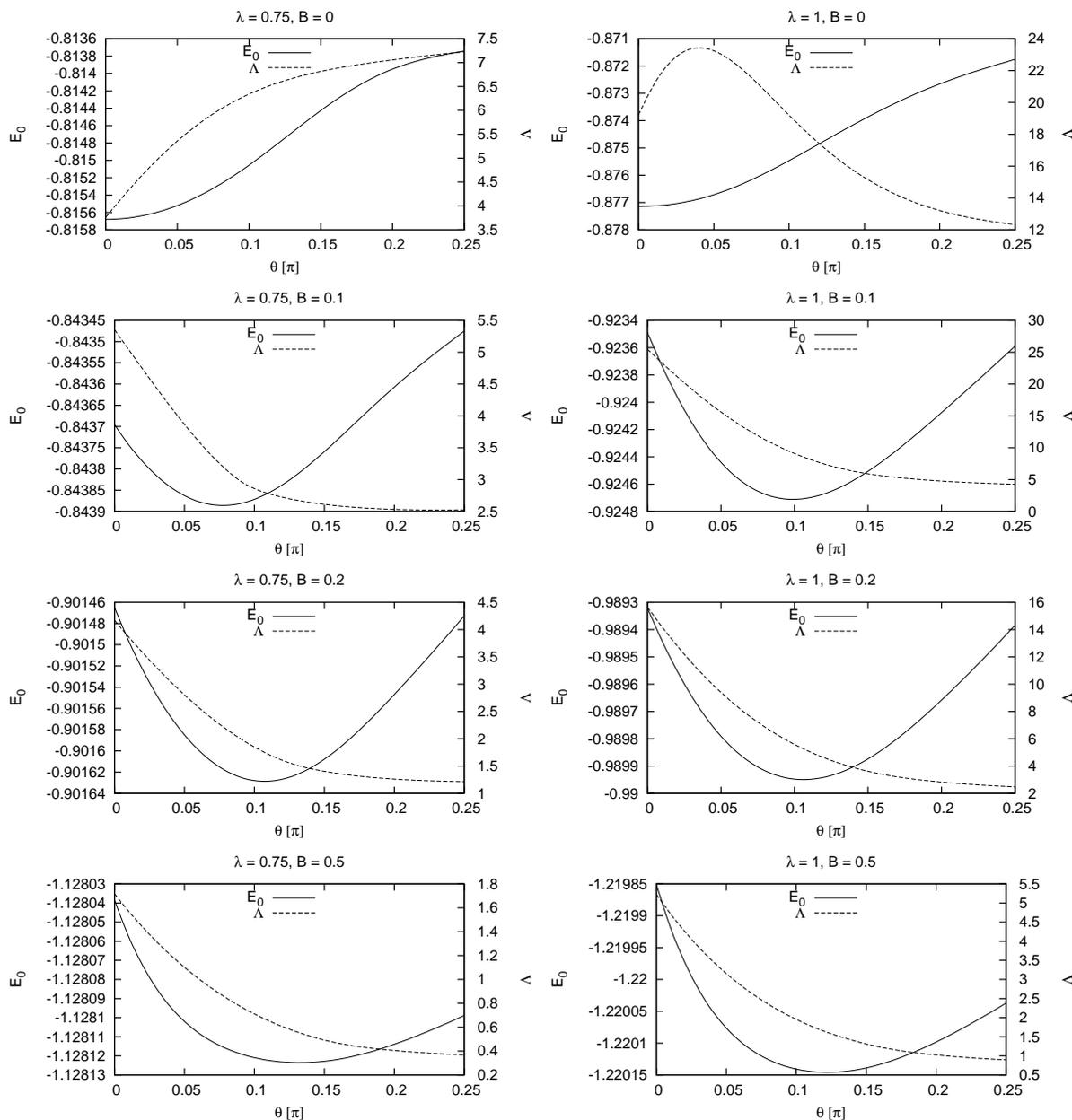


Abbildung 6.5: Abhängigkeit der Grundzustandsenergie E_0 und der oberen Schranke des Trunkierungsfehlers $\bar{\Lambda}$ vom Drehwinkel θ für verschiedene alternierende Magnetfeldstärken B und Interdimensionkopplungen $\lambda = 0,75$ (links) und $\lambda = 1$ (rechts). Verwendet wurde der 0:n-Generator mit dem 8-6-3-Trunkierungsschema.

inwieweit die Minimierung der oberen Schranke des Trunkierungsfehlers zur Bestimmung eines optimalen Trunkierungsschemas führt.

Das Ortsraum-Trunkierungsschema der S-CUT bietet eine Vielzahl stufenweise veränderbarer Parameter, die sowohl Einfluss auf die Qualität der Ergebnisse als auch auf die Anzahl der in die Rechnung eingehenden Terme haben. Das optimale Trunkierungsschema ist hierbei immer die untrunkierte Rechnung. Für ein tatsächliches Optimierungsproblem muss der Ressour-

cenaufwand, also die Anzahl der Terme des selbstähnlichen Hamiltonians konstant gehalten werden.

Hierfür eignet sich hervorragend die in Kapitel 4 ab Seite 32 untersuchte Variation der Basiswahl durch die Einführung eines Mischungswinkels von Singulett- und Triplettzustand für die dimerisierte Heisenbergkette im Magnetfeld. Hierbei wurde festgestellt, dass sich die Genauigkeit von Grundzustandsenergie und Untergittermagnetisierung deutlich verbessern lässt, wenn θ als ein stationärer Punkt der Grundzustandsenergie gewählt wird. Mit der Wahl des Referenzzustands ist eng das Trunkierungsschema verknüpft. Die Optimierung wird über den Winkel als kontinuierlichen, gut quantifizierbaren Parameter vorgenommen. Die Anzahl der Terme in H' und H'' wird durch die Basistransformation nicht beeinflusst.

In den Abbildungen 6.2.3 und 6.2.3 sind die Grundzustandsenergie pro Dimer E_0 und die obere Schranke des Trunkierungsfehlers $\tilde{\Lambda}$ gegen den Drehwinkel θ im physikalisch sinnvollen Bereich $0 \leq \theta \leq \frac{\pi}{4}$ aufgetragen. Hierbei zeigt sich für $\tilde{\Lambda}$ eine klare Abhängigkeit vom Drehwinkel; die Werte schwanken um einen Faktor zwei bis fünf. Bei mäßigen Interdimerkopplungsstärken bis $\lambda \approx 0,5$ und mäßig starken Magnetfeldern wurde in der Nähe des stationären Punktes der Grundzustandsenergie ein Minimum von $\tilde{\Lambda}$ gefunden.

Bei stärkerer Interdimerkopplung und starken Magnetfeldern zeigt $\tilde{\Lambda}$ systematisch ein mit dem Drehwinkel abfallendes Verhalten und nimmt im physikalisch sinnvollen Winkelbereich kein Minimum mehr an. Die Ergebnisse aus Kapitel 4 zeigen dagegen klar genaueste Ergebnisse bei einem optimalen Winkel innerhalb des physikalischen Bereichs. Diese Diskrepanz legt nahe, dass der abgeschätzte Trunkierungsfehler $\tilde{\Lambda}$ in diesen Fällen nicht geeignet ist, eine Aussage über ein optimales Trunkierungsschema zu treffen. Auch hier besteht die Möglichkeit, dass es sich um eine Auswirkung der massiven Nutzung der Dreiecksungleichung handelt. Der Wert der Spektralnorm ist invariant gegen unitäre Transformationen. Die Abschätzung über die Dreiecksungleichung kann diese Isotropie zerstören; bestimmten Richtungen des Raumes können sich ungünstiger abschätzen lassen als andere. Dies liefert eine mögliche Erklärung für die systematische Tendenz des Trunkierungsfehlers, höhere Winkel zu bevorzugen. Besonders deutlich tritt es im Fall $\lambda = 1, B = 0$ in Erscheinung, bei dem hohen Drehwinkeln mit stark magnetisierten Referenzzuständen eine kleinere obere Schranke für den Trunkierungsfehler zugeschrieben wird als bei Drehwinkel 0.

6.3 Trunkierungsfehler der endlichen Kette

Bei der Untersuchung der oberen Schranke des Trunkierungsfehlers $\tilde{\Lambda}$ an der dimerisierten Heisenbergkette wurden verschiedene Schwächen festgestellt.

- Bei starker Interdimerkopplung nimmt $\tilde{\Lambda}$ sehr hohe Werte an, die für eine praktische Abschätzung des Fehlers der Grundzustandsenergie ungeeignet sind.

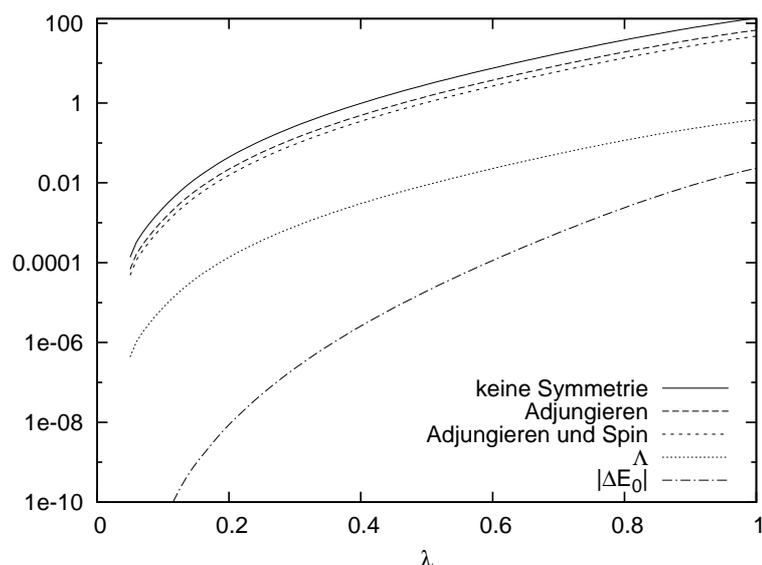


Abbildung 6.6: Obere Schranke $\tilde{\Lambda}$ des Trunkierungsfehler mit und ohne Nutzung von Symmetrien, exakter Trunkierungsfehler Λ sowie der Fehler der Grundzustandsenergie ΔE_0 in Abhängigkeit von der Interdimerkopplung λ . Verwendet wurde der 0:n-Generator bei Trunkierung auf 4-Teilchen-Wechselwirkungen.

- Trunkierungsschemata, die viele Terme berücksichtigen, wurden zum Teil mit deutlich höhere Fehlerschranken bewertet als striktere Schemata.
- Die Untersuchung der Winkelabhängigkeit lieferte eine systematische Bevorzugung von Trunkierungsschemata, die von einem physikalisch weniger sinnvollen Referenzzustand ausgehen.

Die Ursache für diese Auffälligkeiten kommen der Trunkierungsfehler Λ selbst und die Abschätzung durch Verwendung der Dreiecksungleichung in Frage. Für eine Bewertung des definierten Trunkierungsfehlers ist es daher notwendig, eine direkte Untersuchung von Λ vorzunehmen. Hierfür muss der höchste Eigenwert von $\kappa(\ell)$ durch numerische Diagonalisierung bestimmt werden. Da die direkte Berechnung allerdings im unendlichen System nicht möglich ist, muss hierzu auf ein endliches System ausgewichen werden.

Die folgenden Untersuchungen werden daher an einer 5-Dimerkette im alternierenden Magnetfeld bei periodischen Randbedingungen vorgenommen. Da eine Trunkierung nach Reichweite im Ortsraum in einem periodischen System dieser Größe unzweckmäßig ist, wird eine reine Trunkierung nach der Anzahl der beteiligten Wechselwirkungen vorgenommen. Als Standardfall dient hierbei eine Einschränkung auf Prozesse unter Beteiligung von höchstens 4 Quasiteilchen, als stärkste eine Einschränkung auf 2-Quasiteilchen-Prozesse.

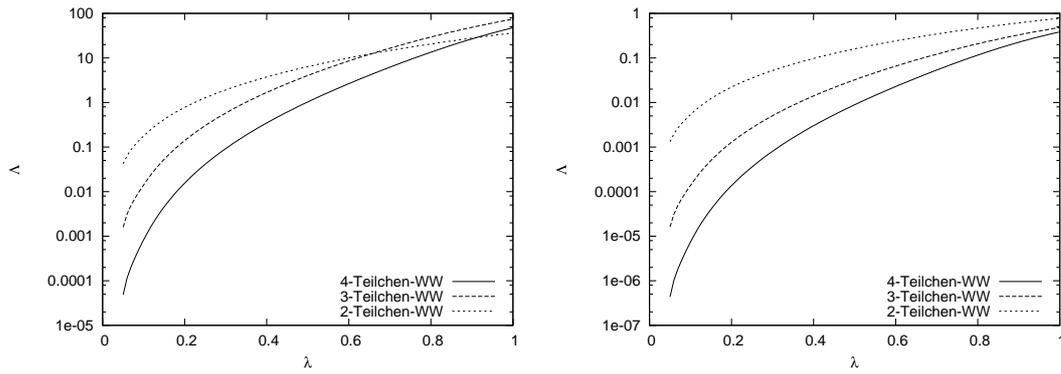


Abbildung 6.7: Links: obere Schranke des Trunkierungsfehlers $\tilde{\Lambda}$ unter Ausnutzung von Adjunktions- und Spinsymmetrie in Abhängigkeit von der Interdimerkopplung für verschiedene Trunkierungen. Rechts: exakter Trunkierungsfehler Λ .

6.3.1 Untersuchung der Dreiecksabschätzung

In Abbildung 6.3.1 werden der Trunkierungsfehler λ , die obere Schranke $\tilde{\Lambda}$ unter Einbeziehung verschiedener Symmetrien sowie die Abweichung der Grundzustandsenergie ΔE_0 untersucht. Zur Berechnung Hierbei zeigt sich, dass die Abschätzung $\tilde{\Lambda}$ durch die Dreiecksungleichung ausgesprochen grob ist; der Trunkierungsfehler Λ wird auch unter Ausnutzung von Symmetrien noch um einen Faktor 100 überschätzt. Positiv anzumerken ist hierbei, dass zumindest der qualitative Verlauf von Λ durch $\tilde{\Lambda}$ gut wiedergegeben wird.

Die Abschätzung des Fehlers der Grundzustandsenergie ΔE_0 gelingt mit dem direkt berechneten Trunkierungsfehler Λ daher deutlich besser, allerdings kommt es auch hier noch zu Abweichungen um Größenordnungen. Im Bereich hoher Interdimerkopplung liefert die Λ a priori eine Fehlerschranke, die beim zehnfachen des realen Fehlerwertes liegt. Im Bereich schwacher Interdimerkopplung schöpft der Grundzustand den möglichen Fehlerbalken allerdings kaum aus; bei $\lambda = 0, 1$ etwa liegt die Abweichung fünf Größenordnungen unter dem Trunkierungsfehler.

Erfreulich ist, dass sich das Trunkierungsparadoxon im endlichen System auflöst. In Abbildung 6.3.1 sind links die die Werte der oberen Schranke $\tilde{\Lambda}$, rechts die Werte des Trunkierungsfehlers Λ für verschiedene Trunkierungen aufgeführt. Man erkennt, dass das im unendlichen System beobachtete Trunkierungsparadoxon für $\tilde{\Lambda}$ erneut auftritt, denn im Bereich hoher Interdimerkopplungen unterschreitet die obere Fehlerschranke der auf Zweiteilchen-Wechselwirkungen beschränkten Rechnung die Werte der auf Drei- und Vierteilchen-Wechselwirkungen. Betrachtet man dagegen den tatsächlichen Trunkierungsfehler Λ zeigt sich kein derartiges Verhalten; die Trunkierungsfehler ordnen streng nach den berücksichtigten Wechselwirkungen.

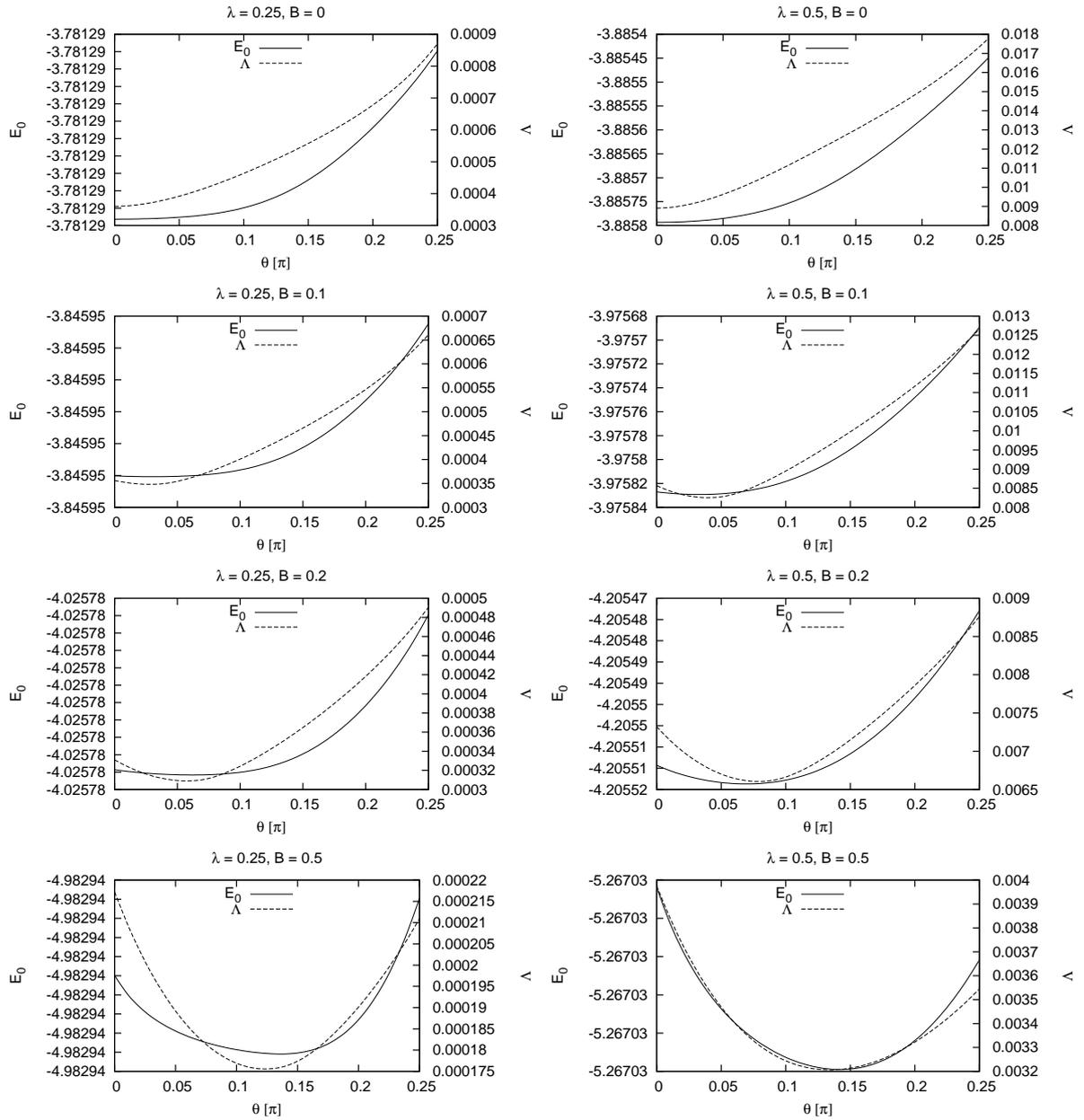


Abbildung 6.8: Abhängigkeit der Grundzustandsenergie E_0 und des Trunkierungsfehlers Λ vom Drehwinkel θ für verschiedene alternierende Magnetfeldstärken B und Interdimerkopplungen $\lambda = 0, 25$ (links) und $\lambda = 0, 5$ (rechts). Verwendet wurde der 0:n-Generator mit dem 8-6-3-Trunkierungsschema.

6.3.2 Kontinuierliche Variation des Trunkierungsschemas

Im unendlichen System zeigt der abgeschätzte Trunkierungsfehler $\tilde{\Lambda}$ ein ungewöhnliches Verhalten im Hinblick auf die kontinuierliche Variation des Trunkierungsschemas durch Verwendung eines gedrehten Referenzzustands. Es wurde eine signifikante Tendenz zur Bevorzugung hoher Drehwinkel festgestellt. Bei starker Interdimerkopplung oder starkem Magnetfeld führte dies dazu, dass $\tilde{\Lambda}$ im physikalisch sinnvollen Bereich kein inneres Minimum mehr annahm. Als

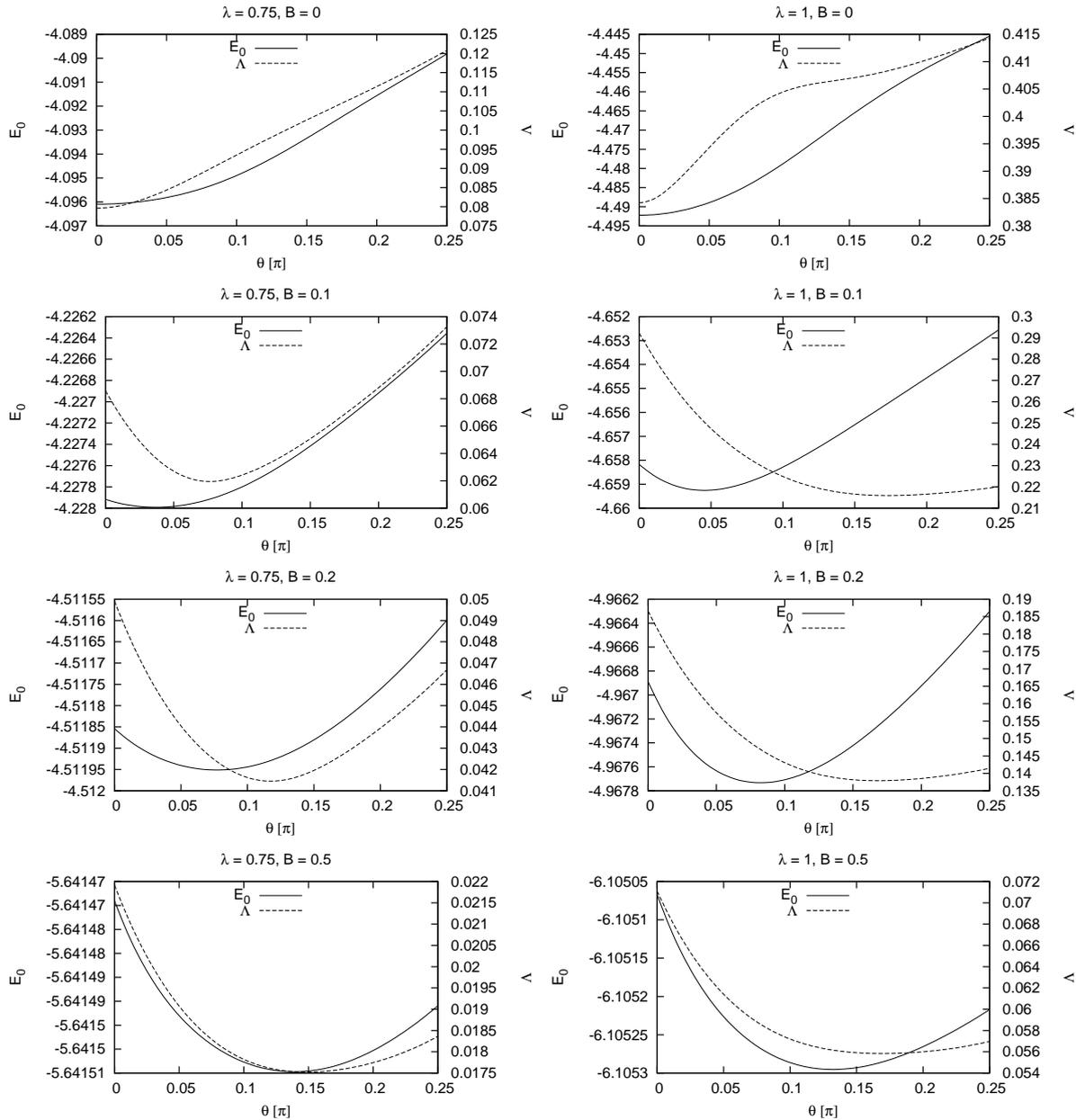


Abbildung 6.9: Abhängigkeit der Grundzustandsenergie E_0 und des Trunkierungsfehlers Λ vom Drehwinkel θ für verschiedene alternierende Magnetfeldstärken B und Interdimerkopplungen $\lambda = 0,75$ (links) und $\lambda = 1$ (rechts). Verwendet wurde der 0:n-Generator mit dem 8-6-3-Trunkierungsschema.

Ursache wurde eine Anisotropie durch die Dreiecksungleichung vermutet. In der Tat zeigt eine Untersuchung im endlichen System, dass der Trunkierungsfehler Λ selbst nicht die Ursache dieses Verhaltens ist.

Die Abbildungen 6.3.2 und 6.3.2 zeigen die Abhängigkeit des Trunkierungsfehlers Λ und der Grundzustandsenergie E_0 vom Drehwinkel der Basis. Im Gegensatz zur Fehlerschranke im unendlichen System nimmt der Trunkierungsfehler immer ein Minimum innerhalb des physikalisch sinnvollen Bereichs an. Bei geringer und mäßiger Interdimerkopplung zeigt der Winkel

des Minimums von Λ eine ausgezeichnete Übereinstimmung mit der Stelle des Minimums der Grundzustandsenergie. Bei stärkerer Interdimerkopplung tendiert das Minimum von Λ zu höheren Winkeln, speziell bei mittlerer Feldstärke. Auffällig ist, dass sich das Minimum bei $\lambda = 1$ mit zunehmendem Feld nicht mehr verschiebt.

6.4 Technische Aspekte

Für die Durchführung der Normberechnung wurden die aus Kapitel 4 bekannten Programme zur Aufstellung und Integration der Flussgleichung erweitert. Zur exakten Diagonalisierung des Hamiltonians im endlichen System wurden Routinen der INTEL MATH KERNEL LIBRARY in der Version 10.1 genutzt.

Der Ressourcenbedarf bei einer Rechnung stieg durch die Bestimmung des Trunkierungsfehlers deutlich an. Zusätzlich zu den 4489 Repräsentanten des gewöhnlichen Flussgleichungssystems mussten bei der Rechnung im 8-6-3-Schema 3.845.014 Repräsentanten im Normgleichungssystem berücksichtigt werden. Für das unendliche System wurde, soweit nicht anders angegeben, der 0:n-Generator mit einer 8-6-3-Trunkierung verwendet. Die obere Integrationsgrenze wurde auf $\ell_{\max} = 20$ gesetzt, die Schrittweite betrug 10^{-3} . Dies entsprach einer Rechenzeit von 28 Stunden pro Datenpunkt. Lediglich für die Untersuchung des Drehwinkels wurde die obere Integrationsgrenze auf $\ell_{\max} = 10$ gesetzt, die Schrittweite betrug 10^{-2} .

Für die Rechnungen im endlichen System wurde eine Schrittweite von 10^{-2} bei einer oberen Integrationsgrenze von $\ell_{\max} = 10$ verwendet. Die Rechenzeit pro Datenpunkt betrug 11 Stunden.

6.5 Zusammenfassung und Ausblick

Wenngleich eine direkte Berechnung des Trunkierungsfehlers Λ in unendlichen Systemen nicht möglich ist, konnte durch Anwendung der Dreiecksungleichung eine obere Schranke $\tilde{\Lambda}$ bestimmt werden. Diese Schranke konnte durch das Zusammenfassen strukturgleicher Terme und die Ausnutzung von Symmetrieeigenschaften des Systems abgesenkt werden.

In der praktischen Anwendung bei der unendlichen dimerisierten Heisenbergkette wies $\tilde{\Lambda}$ erwartungsgemäß eine sehr starke Abhängigkeit von der Interdimerkopplung λ auf. Im Bereich starker Interdimerkopplung stiegen die Werte von $\tilde{\Lambda}$ bis in dieselbe Größenordnung wie die Grundzustandsenergie und darüber hinaus an. Ferner ergaben sich bei starker Interdimerkopplung für stark trunkierte Rechnungen teilweise günstigere Fehlerwerte als bei schwach trunkierten. Als Ursache für dieses ungewöhnliche Verhalten wurde die Kombination aus der Zahl der trunkierten Terme und der häufigen Nutzung der Dreiecksungleichung vermutet.

Bei der kontinuierlichen Variation des Trunkierungsschemas durch die Formulierung in der gedrehten Basis zeigte sich eine starke Winkelabhängigkeit von $\tilde{\Lambda}$. Bei schwacher Interdimerkopplung und nicht zu starken Magnetfeldern konnte in der Nähe des Winkels minimaler Grundzustandsenergie ein Minimum der Schranke des Trunkierungsfehlers festgestellt. Im Bereich hoher Interdimerkopplung konnte im physikalisch relevanten Bereich für $\tilde{\Lambda}$ kein nichttriviales Minimum festgestellt werden. Als Ursache wurden Anisotropien durch die Verwendung der Dreiecksungleichung vermutet.

Da die im unendlichen System nötige Verwendung der Dreiecksungleichung als Ursache für die ungünstigen Eigenschaften vermutet wurde, wurde die Untersuchung des exakt berechneten Trunkierungsfehlers Λ an der endlichen 5-Dimer-Kette fortgesetzt. Hier zeigte sich in der Tat für den Trunkierungsfehler Λ ein wesentlich geringerer Wert als für $\tilde{\Lambda}$. Das Trunkierungsparadoxon wurde für den Trunkierungsfehler selbst nicht beobachtet. Dennoch nahm Λ weiterhin merklich größere Werte an als der durch ihn abgeschätzte Fehler auf die Grundzustandsenergie oder den höchsten angeregten Zustand, speziell bei schwacher Interdimerkopplung.

Die Untersuchung des Trunkierungsfehlers hinsichtlich der gedrehten Basis lieferte für alle untersuchten Parameter ein klares Minimum innerhalb des physikalisch relevanten Bereichs des Drehwinkels. Im Fall mäßiger Interdimerkopplung lag es sehr nahe am stationären Punkt der Grundzustandsenergie; bei stärkerer Interdimerkopplung verschob es sich zu höheren Winkeln hin.

Insgesamt werden die Ergebnisse des praktischen Test des definierten Trunkierungsfehlers gemischt bewertet.

Im endlichen System steht der definierte Trunkierungsfehler Λ in vollem Einklang mit den Erwartungen an ein Qualitätskriterium für die Wahl des Trunkierungsschemas. Die aus Λ abgeleitete Schranke für den Fehler auf die Grundzustandsenergie führt bei mäßiger Interdimerkopplung zu aussagekräftigen Fehlerbalken.

Den Ausgangspunkt für weitere Untersuchungen des Trunkierungsfehlers bildet die Abschätzungskette

$$\boxed{\tilde{\Lambda}(\ell) \geq \Lambda(\ell) \geq ||H''(\ell)|| \geq |\Delta E_0|}. \quad (6.5.28)$$

Die größte Schwierigkeit für den Praxiseinsatz bleibt die effiziente Abschätzung von Λ . Eine exakte Berechnung ist nicht praktikabel. Die verwendete Zerlegung mittels Dreiecksungleichung dagegen führt zu um Größenordnungen höheren Resultaten, wodurch die hieraus abgeleiteten Fehlerabschätzungen für die Grundzustandsenergie und die Energie des höchsten angeregten Zustands ihre Aussagekraft verlieren. Weiterhin verfälscht die Dreiecksungleichung Vergleiche zwischen verschiedenen Trunkierungsschemata. Trotz dieser Einschränkungen stellt bereits diese Abschätzung einen beträchtlichen zusätzlichen Ressourcenaufwand dar, der den der eigentlichen CUT-Rechnung übersteigt. Für den praktischen Einsatz des Trunkierungsfehlers ist

daher eine bessere Abschätzung erforderlich. Eine Möglichkeit hierzu könnte die in Abschnitt 6.1.6 diskutierte Möglichkeit des Zusammenfassens nach Kommutatoren bieten. Insbesondere ließe sich hier die Translationssymmetrie zusätzlich in der Normberechnung nutzen, indem die Norm der Translationsgruppe $\left\| \sum_i A_i \right\| \leq N \|A_i\|$ nicht auf jeden Gitterplatz einzeln aufgespalten wird, sondern in größere Einheiten aus mehreren Gitterplätzen. Die einmalige Bestimmung des Gewichtes muss in diesem Fall numerisch mit exakter Diagonalisierung erfolgen. Da sich hierbei mehr Terme zusammenfassen ließen als bei der Zusammenfassung nach erzeugten Termen, könnten hier größere Einsparungen realisiert werden.

Bei den Untersuchungen im endlichen System wurde deutlich, dass zwischen dem abgeleiteten Trunkierungsfehler Λ und dem Fehler der Grundzustandsenergie $|\Delta E_0|$ ein deutlicher Unterschied besteht. Es ist hierbei unklar, ob die Ursache für diese Diskrepanz in der Abschätzung der Spektraldistanz $\|H''(\ell)\|$ durch den Trunkierungsfehler oder in der Abschätzung des Fehlers der Grundzustandsenergie durch die Spektraldistanz begründet liegt. Aufklärung hierüber kann eine direkte Untersuchung der Spektraldistanz durch die Berechnung des mit dem Fluss als Observable mittransformierten untrunkierten Hamiltonians $H(\ell) = H'(\ell) + H''(\ell)$ im endlichen System liefern, aus dem zusammen mit $H'(\ell)$ die Spektraldistanz exakt berechenbar ist.

Teil III

Anhang

Abbildungsverzeichnis

2.1	Darstellung der dimerisierten Heisenbergkette mit alternierendem Magnetfeld.	9
2.2	Darstellung der Energieniveaus des Doppel-Hardcore-Boson-Modells. Einzelne Symbole stehen für Differenzen zwischen benachbarten Energieniveaus, Pfeile markieren Übergänge durch Nichtdiagonalitäten und den Hopping-Term.	14
3.1	Matrizelemente des Hamiltonian während (grau) und nach (schwarz) der Integration der Flussgleichung beim Wegner-Generator. Entartete Unterräume werden nicht diagonalisiert.	17
3.2	Links: Darstellung des MKU-Generators (schraffiert) in Besetzungszahldarstellung. Der grau markierte Starthamiltonian $H(0)$ weist keine Prozesse auf, die mehr als 2 Quasiteilchen erzeugen oder vernichten. Rechts: Der banddiagonale Hamiltonian während (grau) und nach (schwarz) der Integration der Flussgleichung.	18
3.3	Links: Darstellung des 0:n-Generators in Besetzungszahldarstellung. Rechts: Der Hamiltonian während (grau) und nach (schwarz) der Integration der Flussgleichung.	19
3.4	Darstellung des 10-8-6-3-Trunkierungsschemas.	22
4.1	Berechnete Grundzustandsenergie pro Dimer E_0 in Abhängigkeit von der Interdimerkopplung λ für den MKU- und den 0:n-Generator mit verschiedenen Trunkierungsschemata.	27
4.2	Verlauf der verbleibenden Nichtdiagonalität (ROD) während des Flusses in Abhängigkeit des Flussparameters ℓ für den MKU- und den 0:n-Generator. Verglichen werden ein gut konvergierender ($\lambda = 0,25$) und ein schlecht konvergierender Fall ($\lambda = 1$) ohne Magnetfeld.	28
4.3	Berechnete Grundzustandsenergie pro Dimer E_0 in Abhängigkeit von der Stärke des alternierenden Feldes B bei verschiedenen Interdimerkopplungsstärken für den 0:n-Generator nach dem 8-6-3-Trunkierungsschema.	30
4.4	Berechnete Untergittermagnetisierung pro Dimer M in Abhängigkeit von der Stärke des alternierenden Feldes B bei verschiedenen Interdimerkopplungsstärken für den 0:n-Generator nach dem 8-6-3-Trunkierungsschema.	31

4.5	Abhängigkeit der Grundzustandsenergie pro Dimer E , der verbleibenden Nichtdiagonalität (ROD) bei $\ell = 20$ und Untergittermagnetisierung pro Dimer M für verschiedene alternierende Feldstärken B und Interdimerkopplungen λ vom Drehwinkel θ der Basistransformation. Verwendet wurde der 0:n-Generator in einer 8-6-3-Trunkierung.	37
4.6	Abhängigkeit der Grundzustandsenergie pro Dimer E , der verbleibenden Nichtdiagonalität (ROD) $\ell = 20$ und Untergittermagnetisierung pro Dimer M für verschiedene alternierende Feldstärken B und Interdimerkopplungen λ vom Drehwinkel θ der Basistransformation. Verwendet wurde der 0:n-Generator in einer 8-6-3-Trunkierung.	38
4.7	Vergleich der verbleibenden Nichtdiagonalität während des Flusses für $\lambda = 1$ und $B = 0, 1$. Aufgeführt sind die Standardbasis mit $\theta = 0$, der Winkel minimaler Grundzustandsenergie θ_{opt} sowie der demgegenüber um $\frac{\pi}{2}$ verschobene Winkel θ_{pess}	39
4.8	Verschiebung des Winkels niedrigster Vakuumenergie $\theta_{\text{min}}(\ell)$ während des Flusses für die Parameter $\lambda = 1$ und $B = 0, 1$ (0:n-Generator, Trunkierungsschema 8-6-3).	41
4.9	Abhängigkeit des optimierten Drehwinkels θ_{opt} von der Stärke des alternierenden Magnetfelds B für verschiedene Werte der Interdimerkopplung λ (0:n-Generator, 8-6-3-Trunkierung).	43
4.10	Grundzustandsenergie E_0 pro Dimer mit und ohne Optimierung im Vergleich zu DMRG-Referenzdaten für eine Interdimerkopplung λ von 0,75 und 1 in Abhängigkeit von der Stärke des alternierenden Magnetfelds B (0:n-Generator, Trunkierung 8-6-3). Im Fall $\lambda = 0,75$ sind die Grundzustandsenergien für $\theta = 0$ und θ_{opt} kaum zu trennen.	43
4.11	Untergittermagnetisierung M pro Dimer mit und ohne Optimierung im Vergleich zu DMRG-Referenzdaten für eine Interdimerkopplung λ von 0,75 in Abhängigkeit von der Stärke des alternierenden Magnetfelds B (0:n-Generator, Trunkierung 8-6-3).	44
4.12	Untergittermagnetisierung M pro Dimer mit und ohne Optimierung im Vergleich zu DMRG-Referenzdaten für eine Interdimerkopplung λ von 1 in Abhängigkeit von der Stärke des alternierenden Magnetfelds B (0:n-Generator, Trunkierung 8-6-3).	45
5.1	Der Informationsfluss innerhalb des Hamiltonians; Koeffizienten innerhalb des Trunkierungsschemas H_T werden auch von den unbekanntenen Koeffizienten H_R außerhalb beeinflusst. T bezeichnet die Trunkierung aller Terme, die das Trunkierungsschema nicht erfüllen (vergleiche Abschnitt 5.3).	49
5.2	Abhängigkeit der Vakuumenergie $\langle 0 H' 0 \rangle$ und Grundzustandsenergie E'_0 des trunkierten Hamiltonians in Abhängigkeit des Flussparameters ℓ ; zum Vergleich ist auch die exakte Grundzustandsenergie E_0 aufgetragen ($\mu = 2, t = 1, \Gamma^{10} = 1$).	51

5.3	Links: aus dem Kommutator eines Generator- und Hamiltonianterms mit Längen l_i und l_j können im unendlichen System Terme mit einer Länge bis zu $l_1 + l_2 - 1$ entstehen. Rechts: je nach Wahl des vordersten und hintersten lokalen Operators lassen sich dem abgebildeten Term im periodischen System verschiedene Längen zuordnen.	52
5.4	Durch die Aufspaltung der Flussgleichung enthält H' ausschließlich wohldefinierte Koeffizienten innerhalb des Trunkierungsschemas ohne äußere Abhängigkeiten. Alle Unsicherheiten, insbesondere auch Koeffizienten innerhalb des Trunkierungsschemas betreffend, akkumulieren sich in H''	55
5.5	Entwicklung des Trunkierungsfehlers $\Lambda(\ell)$ und des Abstandes in der Spektralnorm $\ H''(\ell)\ $ während des Flusses für $t = 1$ und $\mu = 2$ für verschiedene Werte von der Nichtdiagonalität Γ^{10}	59
5.6	Abhängigkeit des Trunkierungsfehlers $\Lambda(\ell)$ und des Abstandes in der Spektralnorm $\ H''(\ell)\ $ von der Nichtdiagonalität Γ^{10} für $t = 1$ und $\mu = 2$	60
5.7	Trunkierungsfehler Λ , Spektraldistanz $\ H''\ $ sowie die Abweichung der Grundzustandsenergie ΔE_0 und der Energie des höchsten angeregten Zustands ΔE_{\max} in Abhängigkeit von der Nichtdiagonalität Γ^{10} . Für die Abweichung der Grundzustandsenergie ΔE_0 wurde eine gesonderte Skala verwendet.	62
6.1	Darstellung des möglichen Einsparungspotentials für die Normberechnung durch die gemeinsame Abschätzung von Termgruppen. Links: Häufigkeitsverteilung für die Mächtigkeit der Gruppen von Termen, die bei der Bildung desselben Kommutators entstehen. Rechts: Häufigkeitsverteilung für die Mächtigkeit der Gruppen von Termen, die denselben Operator h_i bei der Kommutatorbildung ergeben. Verwendet wurde der 0:n-Generator mit 8-6-3-Trunkierung.	70
6.2	Abhängigkeit der oberen Trunkierungsfehlerschranke $\tilde{\Lambda}$ von der Stärke der Interdimerkopplung λ für den 0:n-Generator in einer 8-6-3-Trunkierung ohne Magnetfeld. Aufgetragen sind die Werte ohne Berücksichtigung der Symmetrien, unter Ausnutzung der reinen Adjunktionssymmetrie sowie unter Berücksichtigung von Adjunktions- und Spinsymmetrie (links: lineare Skala, rechts: logarithmische Skala).	74
6.3	Abhängigkeit der Trunkierungsfehlerschranke $\tilde{\Lambda}$ von der Stärke der Interdimerkopplung λ für verschiedene Generator- und Trunkierungsschemata. Die Werte der 8-6-Rechnung mit dem 0:n-Generator liegen äußerst knapp unter denen der 6-3-Rechnung; die Graphen überdecken sich. Die Rechnung des MKU-Generators in der 8-6-Trunkierung divergierte bei $\lambda = 1$	75
6.4	Abhängigkeit der Grundzustandsenergie E_0 und der oberen Schranke des Trunkierungsfehlers $\tilde{\Lambda}$ vom Drehwinkel θ für verschiedene alternierende Magnetfeldstärken B und Interdimerkopplungen $\lambda = 0, 25$ (links) und $\lambda = 0, 5$ (rechts). Verwendet wurde der 0:n-Generator mit dem 8-6-3-Trunkierungsschema.	76

- 6.5 Abhängigkeit der Grundzustandsenergie E_0 und der oberen Schranke des Trunkierungsfehlers $\tilde{\Lambda}$ vom Drehwinkel θ für verschiedene alternierende Magnetfeldstärken B und Interdimerkopplungen $\lambda = 0,75$ (links) und $\lambda = 1$ (rechts). Verwendet wurde der 0:n-Generator mit dem 8-6-3-Trunkierungsschema. 77
- 6.6 Obere Schranke $\tilde{\Lambda}$ des Trunkierungsfehler mit und ohne Nutzung von Symmetrien, exakter Trunkierungsfehler Λ sowie der Fehler der Grundzustandsenergie ΔE_0 in Abhängigkeit von der Interdimerkopplung λ . Verwendet wurde der 0:n-Generator bei Trunkierung auf 4-Teilchen-Wechselwirkungen. 79
- 6.7 Links: obere Schranke des Trunkierungsfehlers $\tilde{\Lambda}$ unter Ausnutzung von Adjunktions- und Spinsymmetrie in Abhängigkeit von der Interdimerkopplung für verschiedene Trunkierungen. Rechts: exakter Trunkierungsfehler Λ 80
- 6.8 Abhängigkeit der Grundzustandsenergie E_0 und des Trunkierungsfehlers Λ vom Drehwinkel θ für verschiedene alternierende Magnetfeldstärken B und Interdimerkopplungen $\lambda = 0,25$ (links) und $\lambda = 0,5$ (rechts). Verwendet wurde der 0:n-Generator mit dem 8-6-3-Trunkierungsschema. 81
- 6.9 Abhängigkeit der Grundzustandsenergie E_0 und des Trunkierungsfehlers Λ vom Drehwinkel θ für verschiedene alternierende Magnetfeldstärken B und Interdimerkopplungen $\lambda = 0,75$ (links) und $\lambda = 1$ (rechts). Verwendet wurde der 0:n-Generator mit dem 8-6-3-Trunkierungsschema. 82

Tabellenverzeichnis

4.1	Anzahl der Repräsentanten im Hamiltonian nach dem Fluss, die Größe des Differentialgleichungssystems in Einträgen sowie die Abweichung vom analytischen Referenzwert bei $\lambda = 1$ für den 0:n- und den MKU-Generator bei verschiedenen Trunkierungen. In allen Fällen wurden Adjungieren, spiegeln und $U(1)$ -Spinsymmetrie benutzt, um die Anzahl von Repräsentanten und Einträgen im DGL-System zu reduzieren. Im Fall des MKU-Generators mit 10-8-6-Trunkierung divergierte die Rechnung bei $\lambda = 1$	27
5.1	Abhängigkeit der Grundzustandsenergie pro Dimer E_0 der dimerisierten Heisenbergkette mit periodischen Randbedingungen von der Systemgröße. Die Trunkierungslänge n liegt bei 3; dies entspricht einer effektiven Systemgröße $\tilde{L} = 7$	53
6.1	Übersicht der Gewichte für Repräsentanten geordnet nach ihrer Symmetrie. A entspricht der Adjunktion, S gegenüber der xy -Spinsymmetrie. Das Gewicht ohne Nutzung von Symmetrien ist w_0 ; w_A ist das Gewicht bei Nutzung der Adjunktionssymmetrie, $w_{A,S}$ dasjenige bei Nutzung von Adjunktions- und Spinsymmetrie.	72

Literaturverzeichnis

- [Ac07] ALBUQUERQUE, F. und ALPS COLLABORATION: *The ALPS project release 1.3: open source software for strongly correlated systems*. Journal of Magnetism and Magnetic Materials 310, 1187, 2007.
- [Bet31] BETHE, H.: *Zur Theorie der Metalle. I. Eigenwerte und Eigenfunktionen der linearen Atomkette*. Zeitschrift für Physik A Hadrons and Nuclei, 71:205–226, 1931.
- [Czy00] CZYCHOLL, GERD: *Theoretische Festkörperphysik*. Vieweg, 2000.
- [DF07] DUFFE, S. und T. FISCHER. persönliche Mitteilung, June 2007.
- [DU04] DUSUEL, S. und G.S. UHRIG: *The quartic oscillator: a non-perturbative study by continuous unitary transformations*. Journal of Physics A Mathematical and General, 37(39):9275–9294, 2004.
- [FDU] FISCHER, TIM, SEBASTIAN DUFFE und GÖTZ S. UHRIG: *Novel continuous unitary transformations to treat system with quasiparticles of finite lifetime*.
- [Fis07] FISCHER, TIM: *Beschreibung von Quantendimermodellen mittels kontinuierlicher unitärer Transformationen*. Diplomarbeit, Technische Universität Dortmund, Dec. 2007.
- [Fis08] FISCHER, TIM: *Persönliche Mitteilung*, 10 2008.
- [GW93] GLAZEK, STANISLAW D. und KENNETH G. WILSON: *Renormalization of Hamiltonians*. Phys. Rev. D, 48(12):5863–5872, Dec 1993.
- [GW94] GLAZEK, STANISLAW D. und KENNETH G. WILSON: *Perturbative renormalization group for Hamiltonians*. Phys. Rev. D, 49(8):4214–4218, Apr 1994.
- [Hul38] HULTHEN, E. *Arkiv Math. Astron. Fysik A*, 26A(11), 1938.
- [Keh06] KEHREIN, STEFAN: *The Flow Equation Approach to Many-Particle Systems*. Springer Tracts in Modern Physics, 217, 2006.
- [KM94] KEHREIN, STEFAN K und ANDREAS MIELKE: *Flow equations for the Anderson Hamiltonian*. Journal of physics A - Mathematical and general, 27(12):4259–4279, JUN 21 1994.
- [Koe02] KOETHE, THOMAS: *Bondbosonen-Molekularfeld-Behandlung von niedrigdimensionalen Quantenspinsystemen*. Universität zu Köln, Dec. 2002.
- [KU00] KNETTER, C. und G.S. UHRIG: *Perturbation theory by flow equations: dimerized and frustrated $S = 1/2$ chain*. The European Physical Journal B - Condensed Matter and Complex Systems, 2000.
- [Mie98] MIELKE, A.: *Flow equations for band-matrices*. The European Physical Journal B-Condensed Matter and Complex Systems, 5(3):605–611, 1998.
- [MTBB81] MÜLLER, G., H. THOMAS, H. BECK und J. C. BONNER: *Quantum Spin Dynamics of the Antiferromagnetic Linear Chain in Zero and Nonzero Magnetic Field*. 24:1429, 1981.
- [PTVF07] PRESS, WILLIAM H., SAUL A. TEUKOLSKY, WILLIAM T. VETTERLING und BRIAN P. FLANNERY: *Numerical Recipes*. Cambridge University Press, 2007.

- [PWKH99] PESCHEL, I., X. WANG, M. KAULKE und K HALLBERG: *Density-Matrix Renormalization - A New Numerical Method in Physics*, Vol 528 , *Lecture Notes in Physics*. Springer, 1999.
- [Rei06] REISCHL, ALEXANDER ANTONIUS: *Derivation of Effective Models using Self-Similar Continuous Unitary Transformations in Real Space*. Dissertation, Universität zu Köln, 2006.
- [RNM⁺08] RUEEGG, CH., B. NORMAND, M. MATSUMOTO, A. FURRER, D. F. MCMORROW, K. W. KRAEMER, H. U. GUEDEL, S. N. GVASALIYA, H. MUTKA und M. BOEHM: *Quantum magnets under pressure: Controlling elementary excitations in TlCuCl₃*. Phys. Rev. Lett., 100, May 2008.
- [Sac99] SACHDEV, S.: *Quantum phase transitions*. Physics World, 12(4):33–38, 1999.
- [SB90] SACHDEV, SUBIR und R. N. BHATT: *Bond-operator representation of quantum spins: Mean-field theory of frustrated quantum Heisenberg antiferromagnets*. Phys. Rev. B, 41(13):9323–9329, May 1990.
- [Sch05] SCHOLLWÖCK, U.: *The density-matrix renormalization group*. Reviews of modern physics, 77, Jan. 2005.
- [UG03] UHRIG, GÖTZ S. und MARKUS GRÜNINGER: *Das Wechselspiel magnetischer Anregungen in Spinflüssigkeiten*. Physik Journal, 2003.
- [Uhr08] UHRIG, GÖTZ S.: *Persönliche Mitteilung*, Nov. 2008.
- [Weg94] WEGNER, F.: *Flow equations for Hamiltonians*. Annalen der Physik, 1994.
- [Whi92] WHITE, STEPHEN R.: *Density Matrix Formulation for Quantum Renormalization Groups*. Physical Review Letters, 69(19):2863–2866, 1992.
- [Whi93] WHITE, STEPHEN R.: *Density-matrix algorithms for quantum renormalization groups*. Physical Review B, 48(14):10345–10356, Jan. 1993.

Erklärung

Ich versichere, diese Arbeit eigenständig verfasst zu haben. Es wurden ausschließlich die angegebenen Quellen genutzt und Zitate kenntlich gemacht.

Nils Alexander Drescher