
**Berechnung von
Korrelationseffekten
mit Hilfe
der DMRG**

Kay Hamacher

Universität Dortmund

31.01.2001

Inhalt

1. Vorwort / Technik der DMRG
2. Realisierung in C++
3. NaV_2O_5 und ein Spincluster-Modell
4. Spinketten in 1D
5. Spinsysteme in 2D
6. Hubbard-Ketten in 1D
7. Quantenchemie und DMRG
8. Ausblick

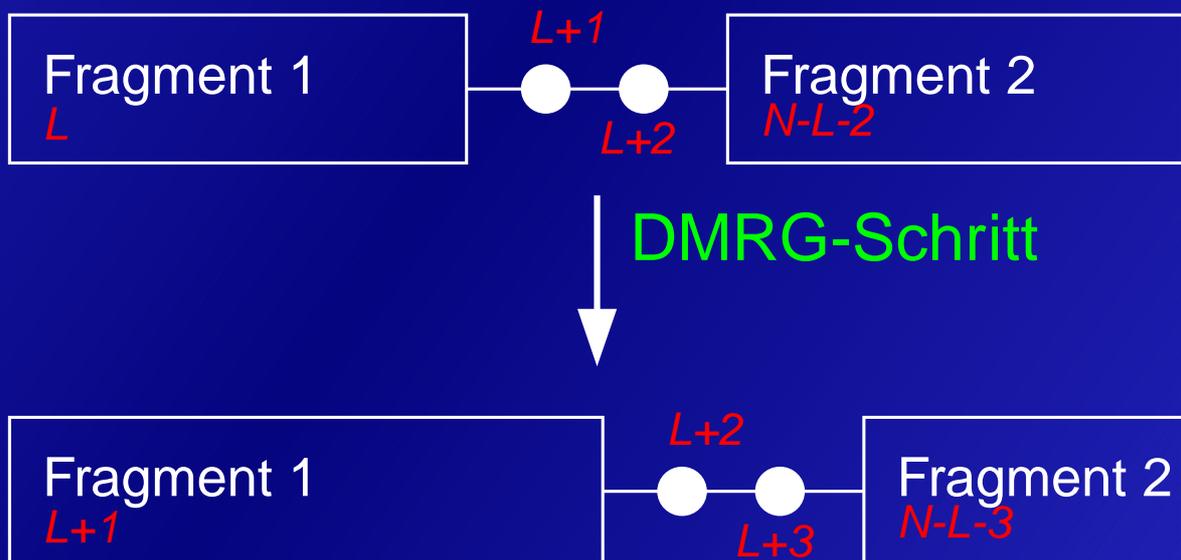
DMRG-Technik

Iteratives Verfahren

1. Diagonalisieren von $H_{\text{Fragment 1}} + H_{\text{Site 1}}$
 $+ H_{\text{Site 2}} + H_{\text{Fragment 2}} + H_{\text{Bindungen}}$

2. Diagonalisierung der reduzierten Dichtematrix

3. Anfügen einer Site / Operator-Transformation



Implementierung in C++



Jeder hat sein Päckchen zu tragen. . .

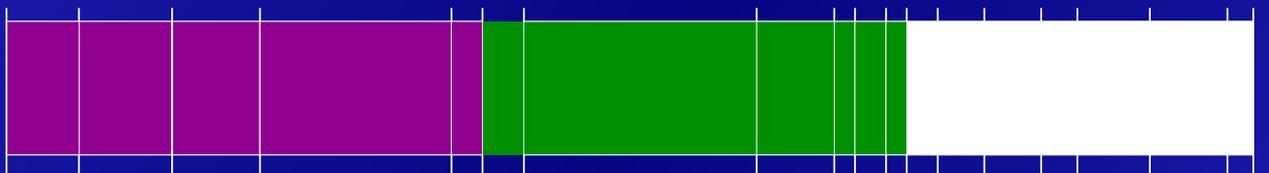
Annahme:

Homogener Parallelrechner : $\text{Load}_{\text{opt}} = \frac{\sum_{i=1}^M L_i}{N_{\text{CPU}}}$

“Mod”-Strategie



“C”-Strategie



Strategie	$\frac{\max(\text{Load}_i)}{\text{Load}_{\text{opt}}}$
“Mod”	1.2424 ± 0.0027
C1	1.1543 ± 0.0018
C2	1.1556 ± 0.0018
C3	1.1110 ± 0.0012
C4	1.1662 ± 0.0019

hier für $M = 100$, $N_{\text{CPU}} = 8$, gemittelt über 1000 Zufallsverteilungen

NaV₂O₅ und ein Modell

- mag. Suszeptibilität 1D-Heisenberg-Modell $\rightarrow V^{4,5+}$
- $T_c = 34\text{K}$
Verdopplung der Einheitszelle
Spin-Gap von 10meV
 $2 \cdot V^{4,5+} \rightarrow V^{4+} + V^{5+}$? (Probleme mit Spin-Peierls-Szenario)
- e^- -Spins über die V-O-V-Bindung verteilt^g
- Spin-Cluster-Theorie kein Szenario^{a b}
- Zig-Zag-Ladungsordnung ($T < T_c$)^{c d e f} und Dimer-Phase ($T > T_c$)^{g e}

^aGros, Valenti, Hamacher et al. **Phys.Rev.B(Rapid Comm.)** 62 (2000) R14617

^bBoer, Meetsma, Baas, Palstra **Phys.Rev.Lett.** 84 (2000) 3962

^cGros and Valenti **Phys.Rev.Lett.** 82(1999)976

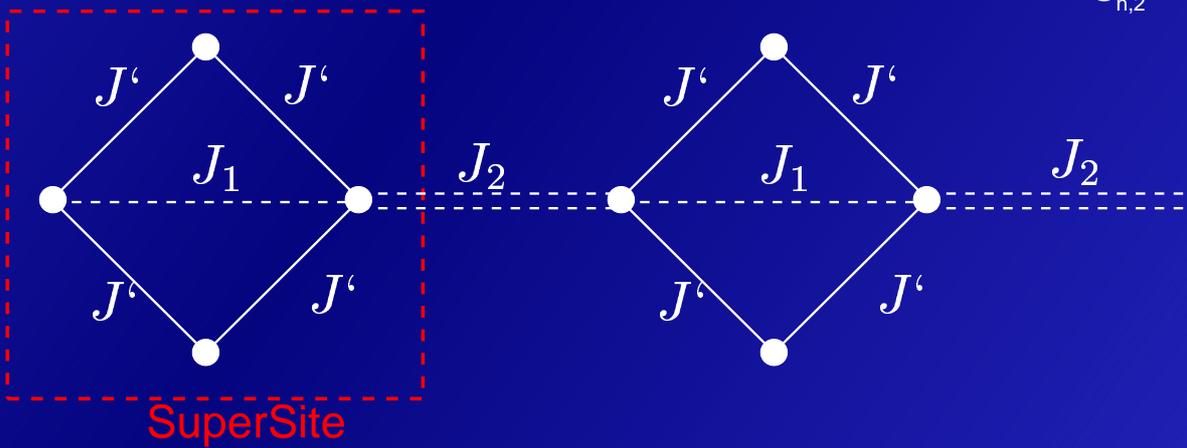
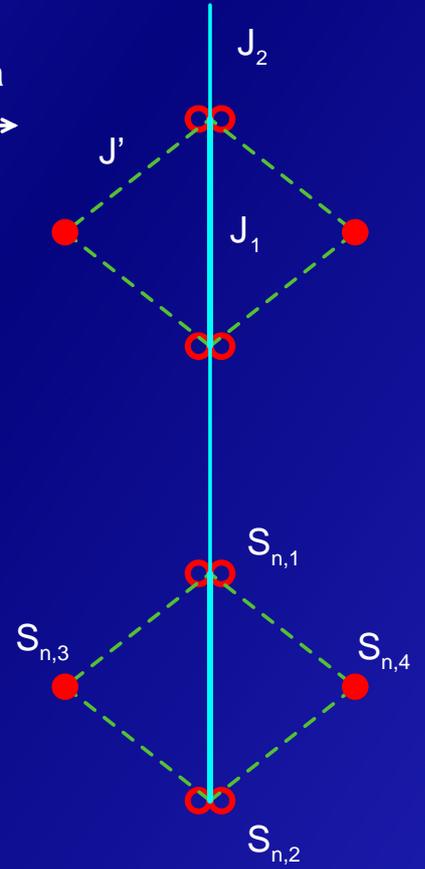
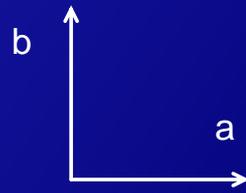
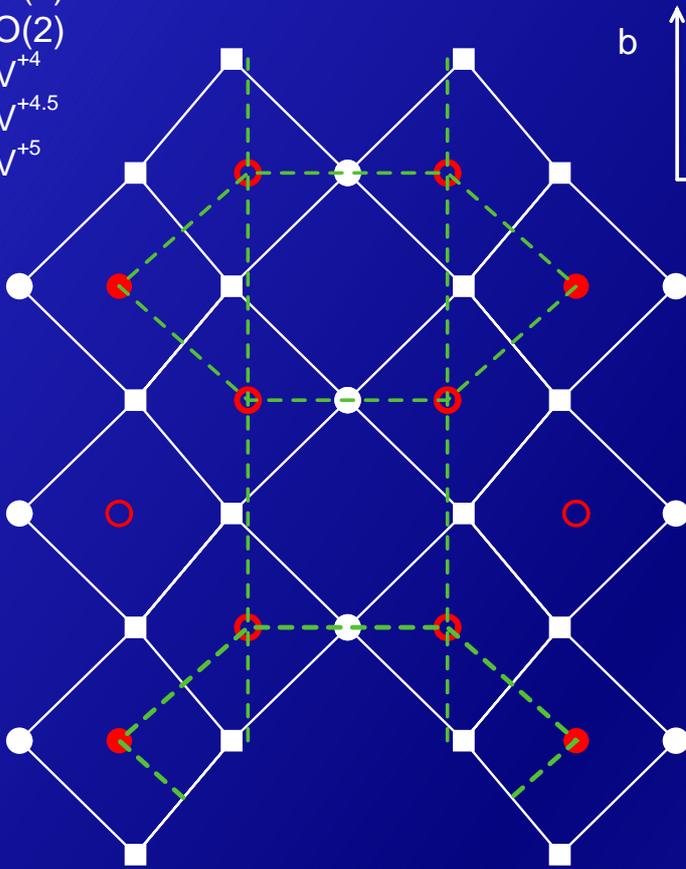
^dYosihama, Nakajima, Kakurai et al. **J.Phys.Chem.Sol.** 60(1999)1099

^eSeo and Fukuyama **J.Phys.Soc.Jp.** 67(1998)2602

^fOhama, Goto, Shimizu et al. **J.Phys.Soc.Jp.** 69(2000)2751

^gSmolinski, Weber, Gros et al. **Phys.Rev.Lett.** 80(1998)5164

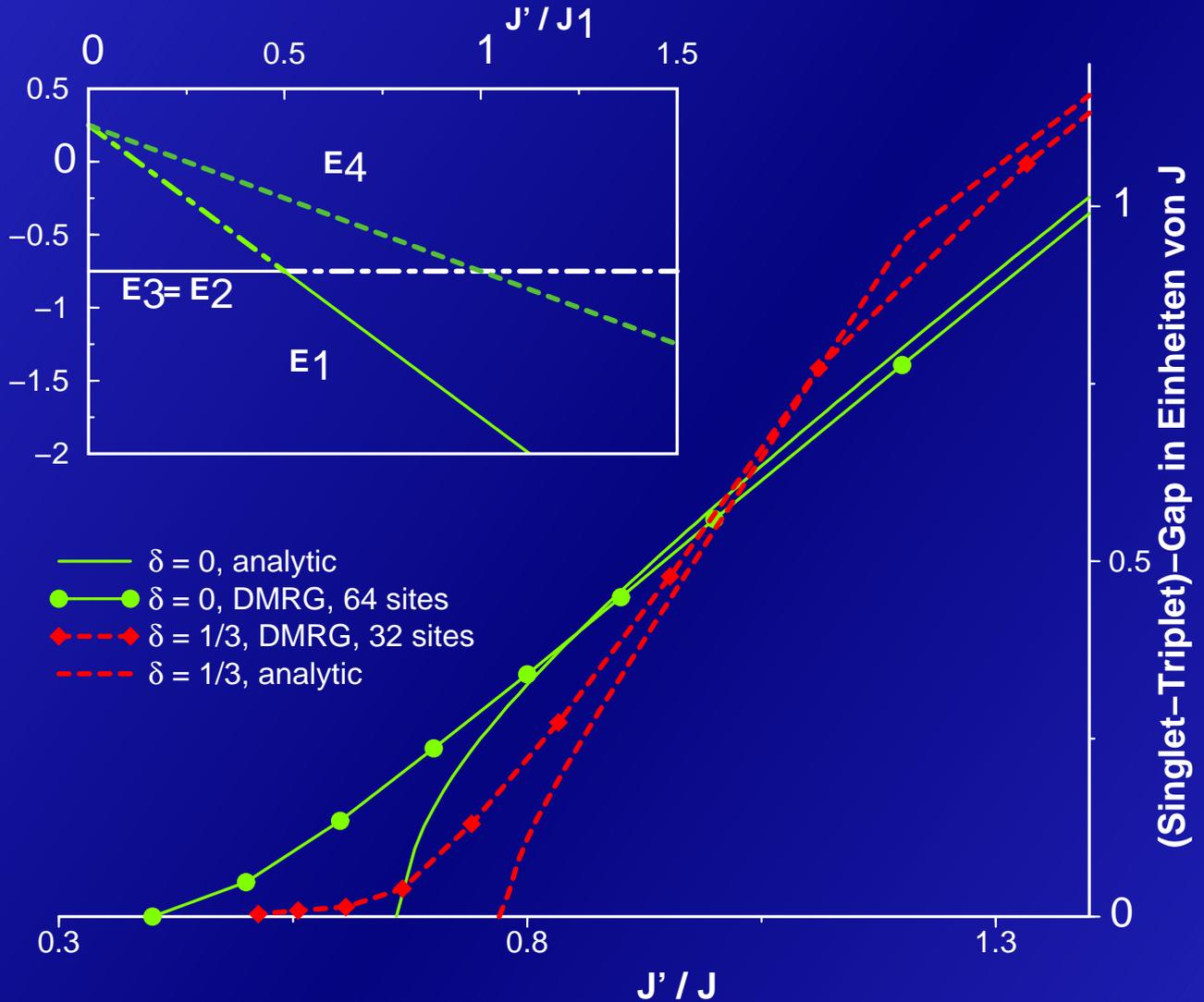
- O(1)
- O(2)
- V^{+4}
- $V^{+4.5}$
- V^{+5}



Dimerisierung: $J_1 = J (1 + \delta)$

$J_2 = J (1 - \delta)$

Ergebnisse NaV₂O₅ I

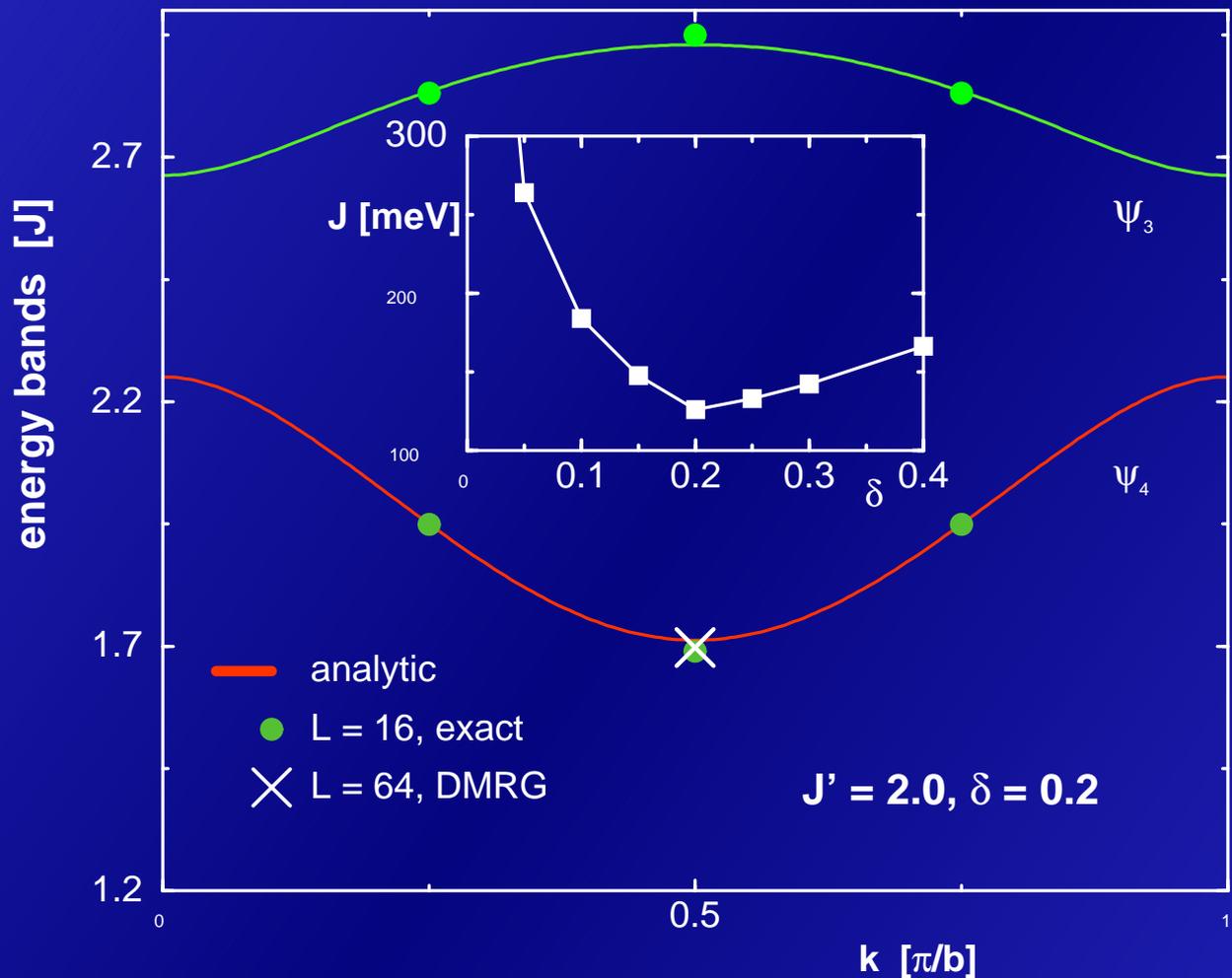


Isoliertes Cluster:

$$\Psi_1 = \frac{1}{\sqrt{3}} [t_{12}^0 t_{34}^0 - t_{12}^+ t_{34}^- - t_{12}^- t_{34}^+] \quad \Psi_2 = s_{12} s_{34}$$

$$\Psi_3^\alpha = s_{12} t_{34}^\alpha \quad \Psi_4 = \frac{1}{\sqrt{2}} [t_{12}^+ t_{34}^- - t_{12}^- t_{34}^+]$$

Ergebnisse NaV₂O₅ II

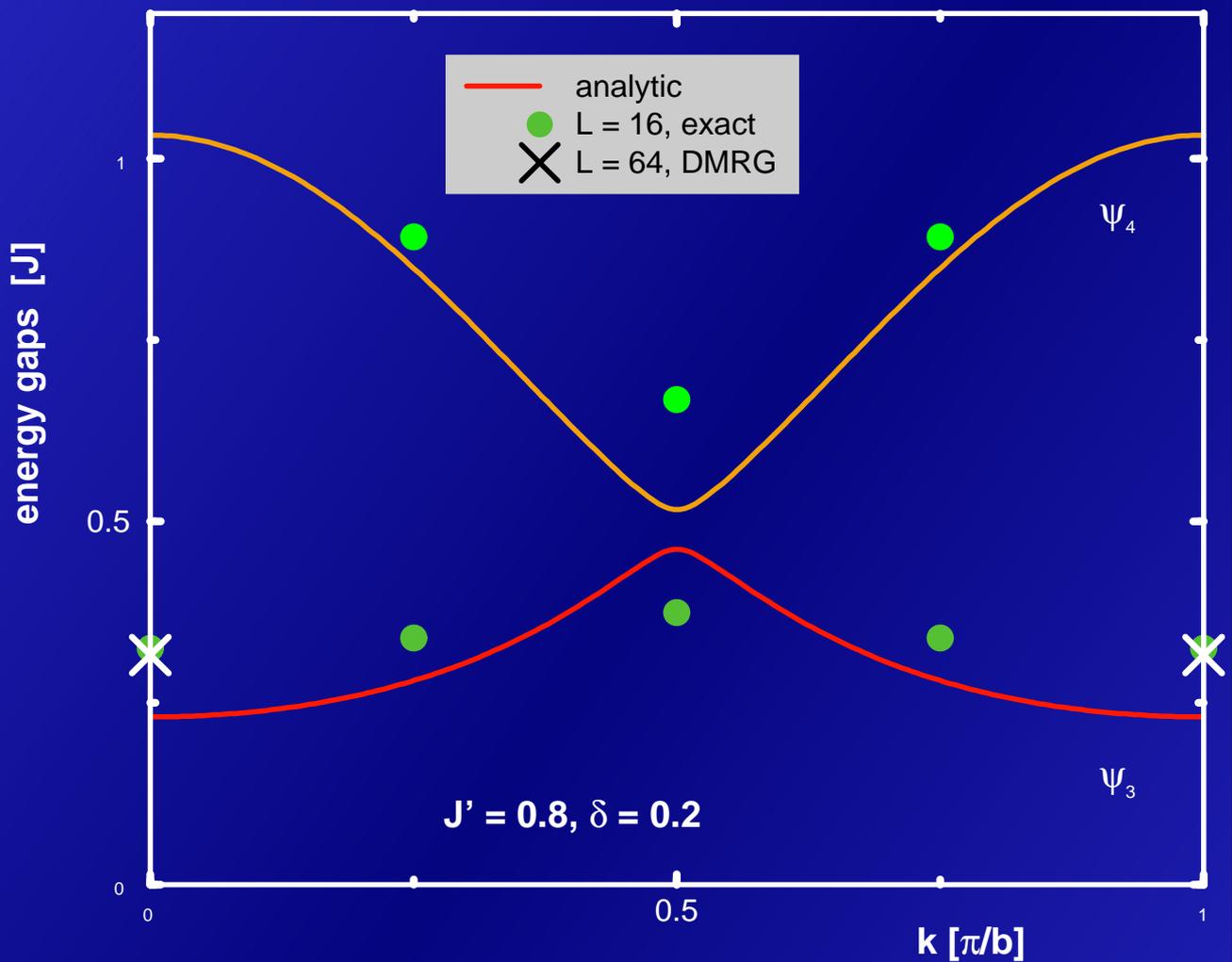


Experimentelle Magnonen-Dispersion:

Maximum bei $k = \frac{\pi}{2b}$ und

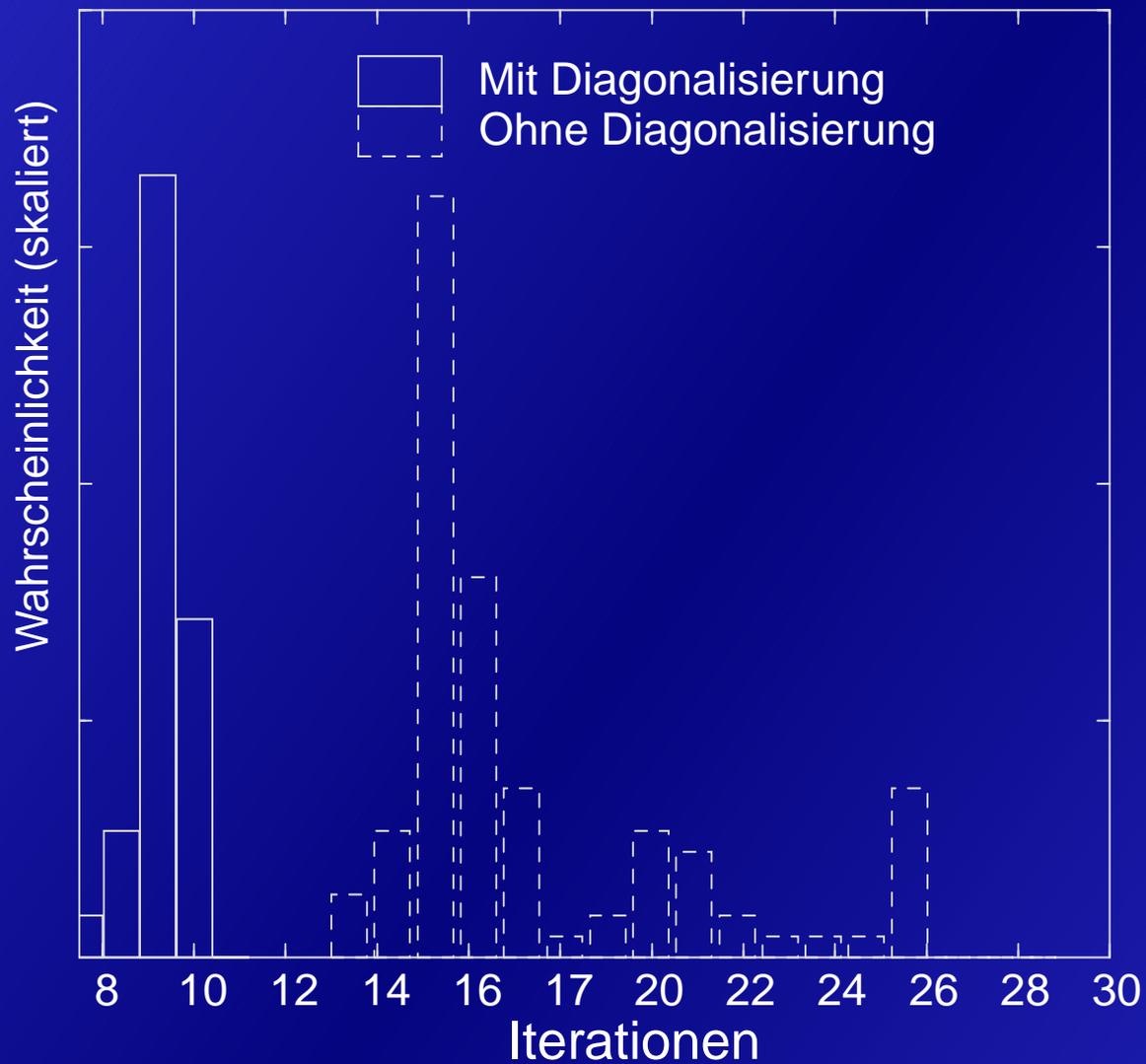
Minimum bei $k = 0, \frac{\pi}{b}$

Ergebnisse NaV_2O_5 III



Cluster-Operator-Theorie überschätzt die
Magnonen-Dispersion!

Lokale Diagonalisierung I

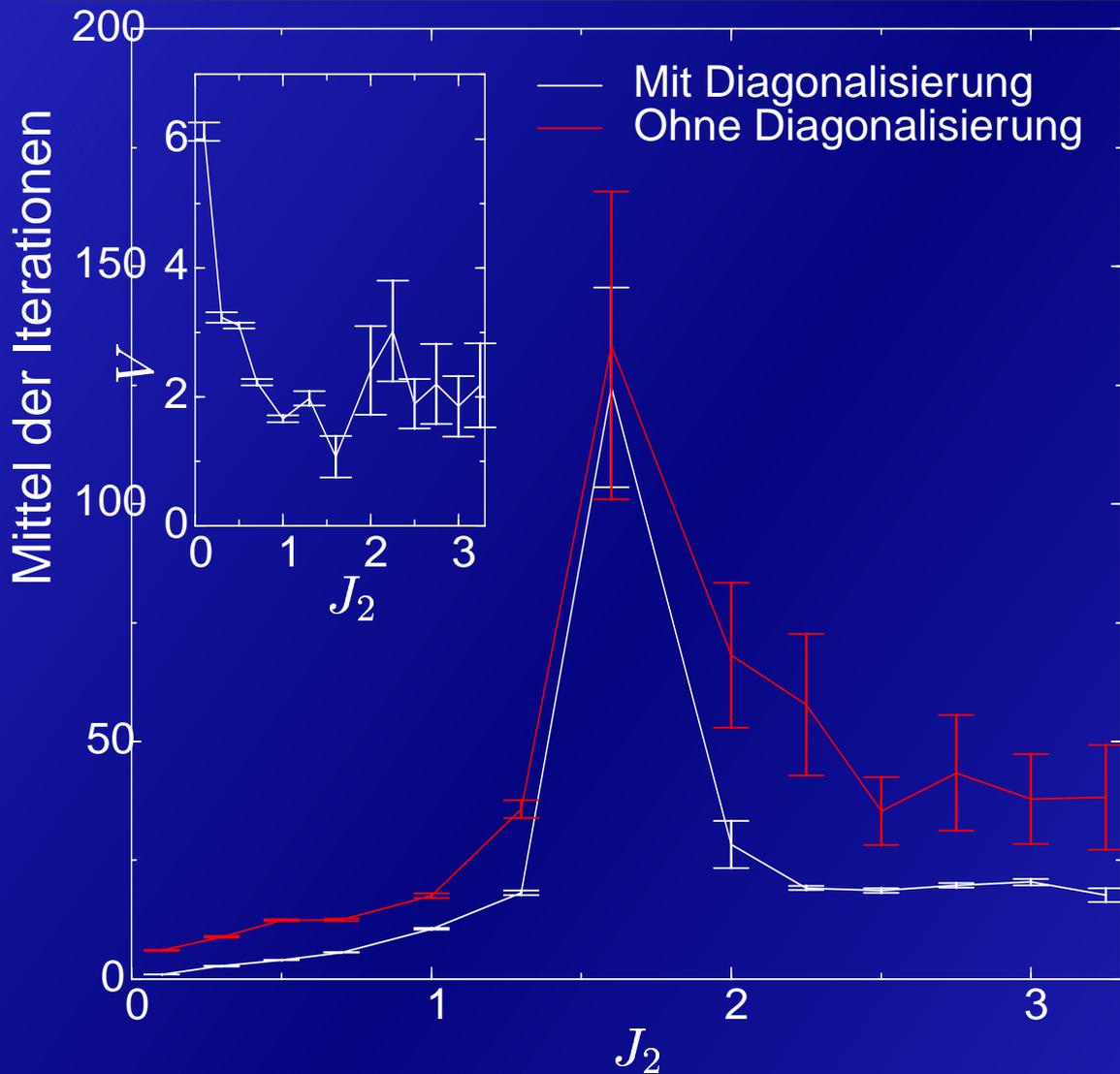


$$\bar{n}_{\text{mit}} = 10,973 \pm 0,103$$

$$\bar{n}_{\text{ohne}} = 18,748 \pm 0,500$$

für $L = 40, m = 60, J_z = J_{\pm} = 1, N_{\uparrow} = N_{\downarrow} = 80$

Lokale Diagonalisierung II



mit

$$V := \frac{\text{Iterationen}_{\text{Ohne}}}{\text{Iterationen}_{\text{Mit}}}$$

für $L = 30, m = 50, J_z = J_{\pm} = 1, N_1 = N_{\downarrow} = 60$

Ungeordnete Spinketten in 1D

Hamiltonian mit Unordnung

$$H = \sum_i [J_i (S_i^x S_{i+1}^x + S_i^y S_{i+1}^y) + \Delta S_i^z S_{i+1}^z]$$

mit gleichverteilten XY -Kopplungen J_i , für die $\overline{J_i} = 1$ ist

Spezialfälle:

$\Delta = 0$, Streuung der J_i Null $\implies XX$ -Modell

$\Delta = 1$, Streuung der J_i Null \implies Heisenberg-Modell

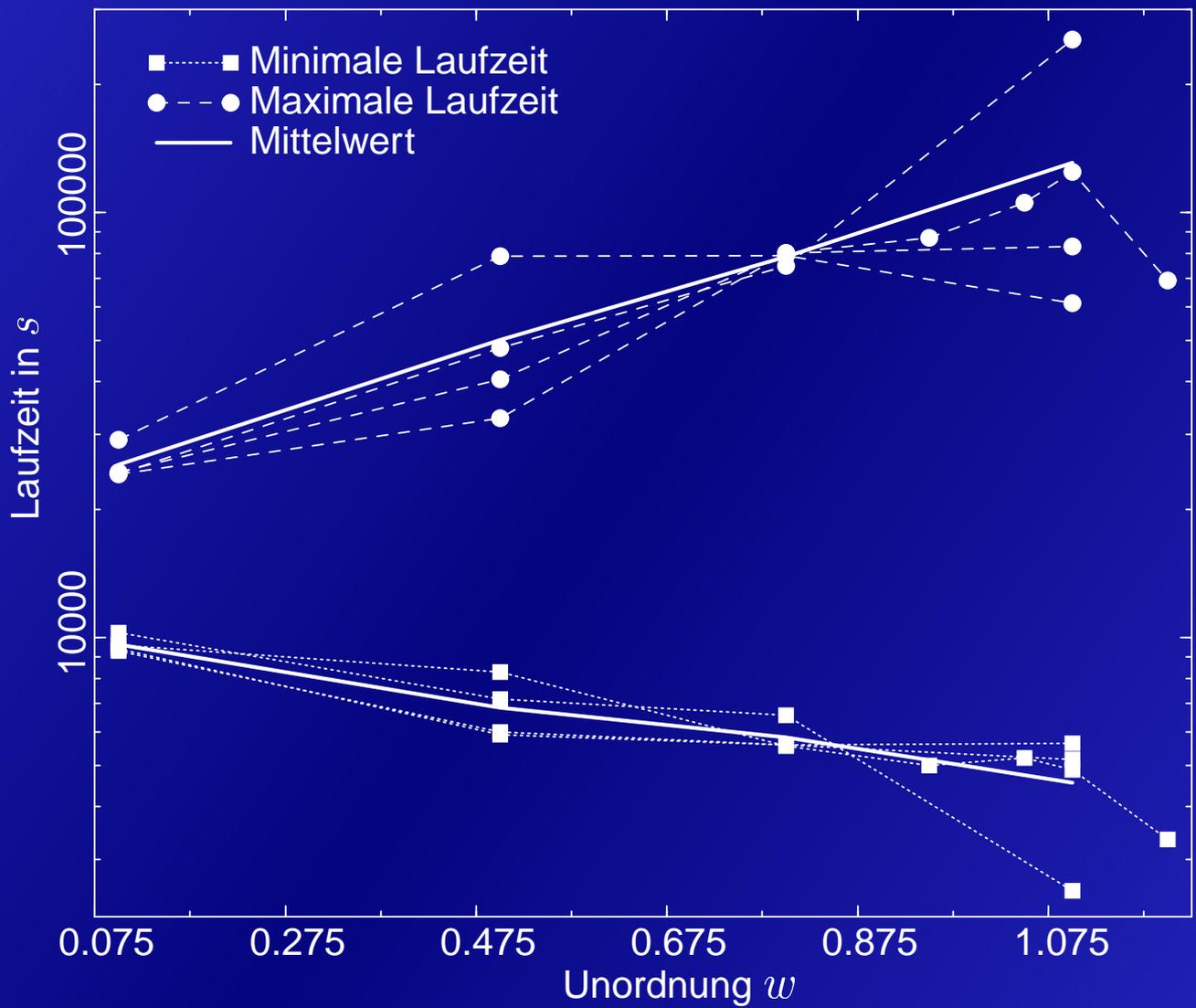
$$\text{RSRG}^a : \quad \left| \overline{\langle S_i^\alpha S_j^\alpha \rangle} \right| \sim |i - j|^{-2} \quad \alpha = x, y, z$$

Aber: Numerische Untersuchung zeigte Abweichungen ^b

^aFisher **Phys.Rev.B** 50 (1994) 3799

^bRöder, Stolze, Silver, Müller **J.Appl.Phys.** 79 (1996) 4632

Laufzeiten der Spinketten

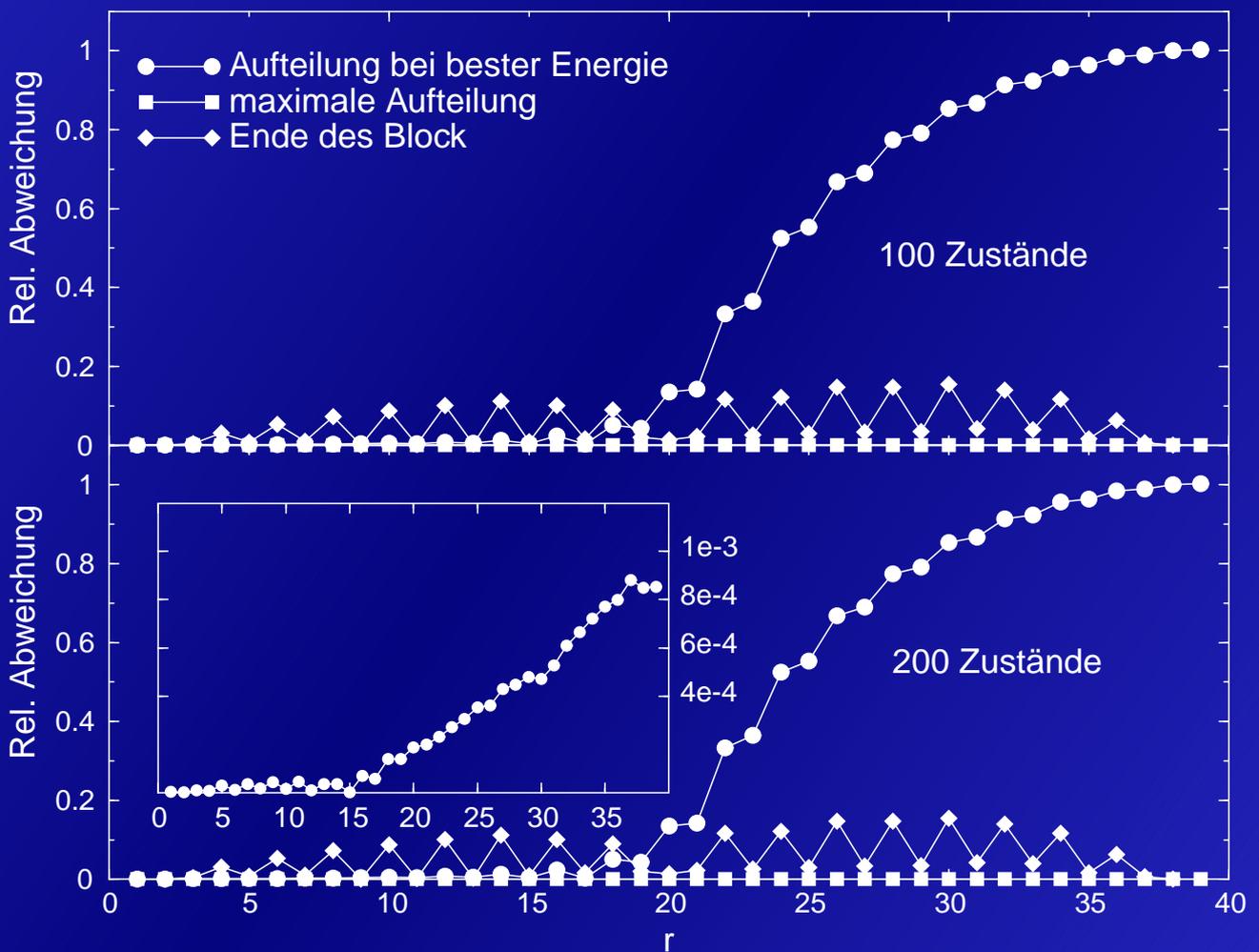


Insgesamt 13764 Replika gerechnet,
2593 CPU-Tage \sim 7 CPU-Jahre,
 $4\frac{1}{2}$ Stunden pro Replika

Berechnungsstrategien

Abweichung^a der Erwartungswerte

$$\langle S_o^+ S_r^- \rangle$$

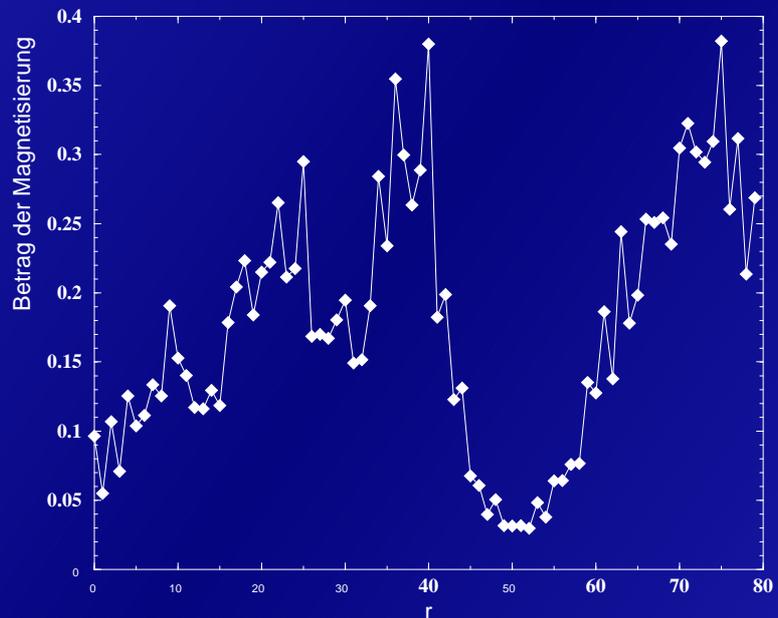


$L = 40, \quad \Delta = 0 \quad w = 0$ offene Randbedingungen

^aVergleichswerte von J. Stolze

Symmetrie der Spinwellenfunktion

Es wurde $\langle S_r^z \rangle \neq 0$ beobachtet. Der Grundzustand hat aber Spin-Up/Down-Symmetrie!



Eigenes Programm mit symmetrisiertem Ansatz:

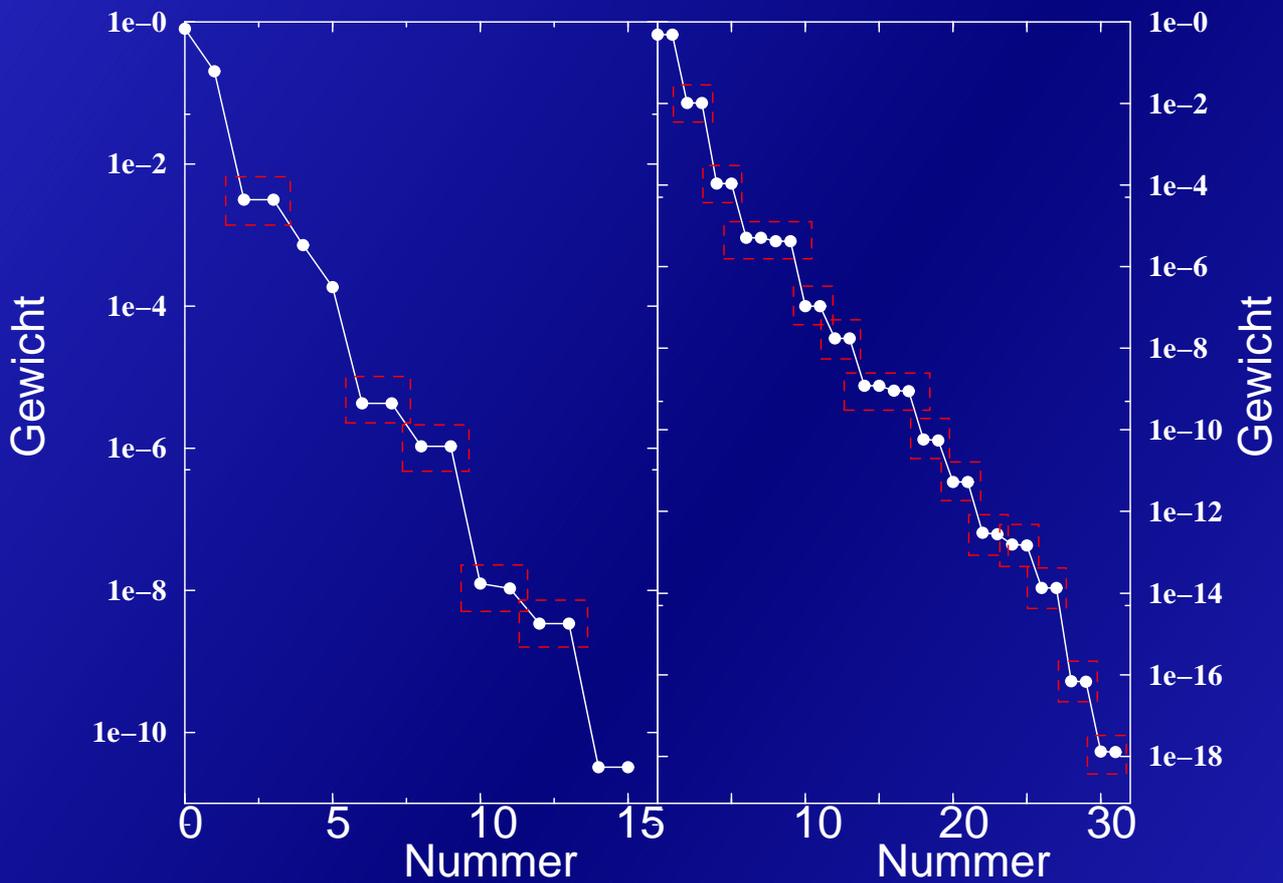
$U = \otimes S_i^x$ als $(1 \rightleftharpoons \downarrow)$ Operator.

$$\langle \Psi | H | \Psi \rangle \quad \mapsto \quad \frac{1}{N} \langle \Psi | (1 \pm U)^\dagger H (1 \pm U) | \Psi \rangle$$

Nun keine Rechnung mehr in Spinsegmenten möglich!

Programm benötigt statt $4\frac{1}{2}$ Stunden nun mehr als 1 Woche.

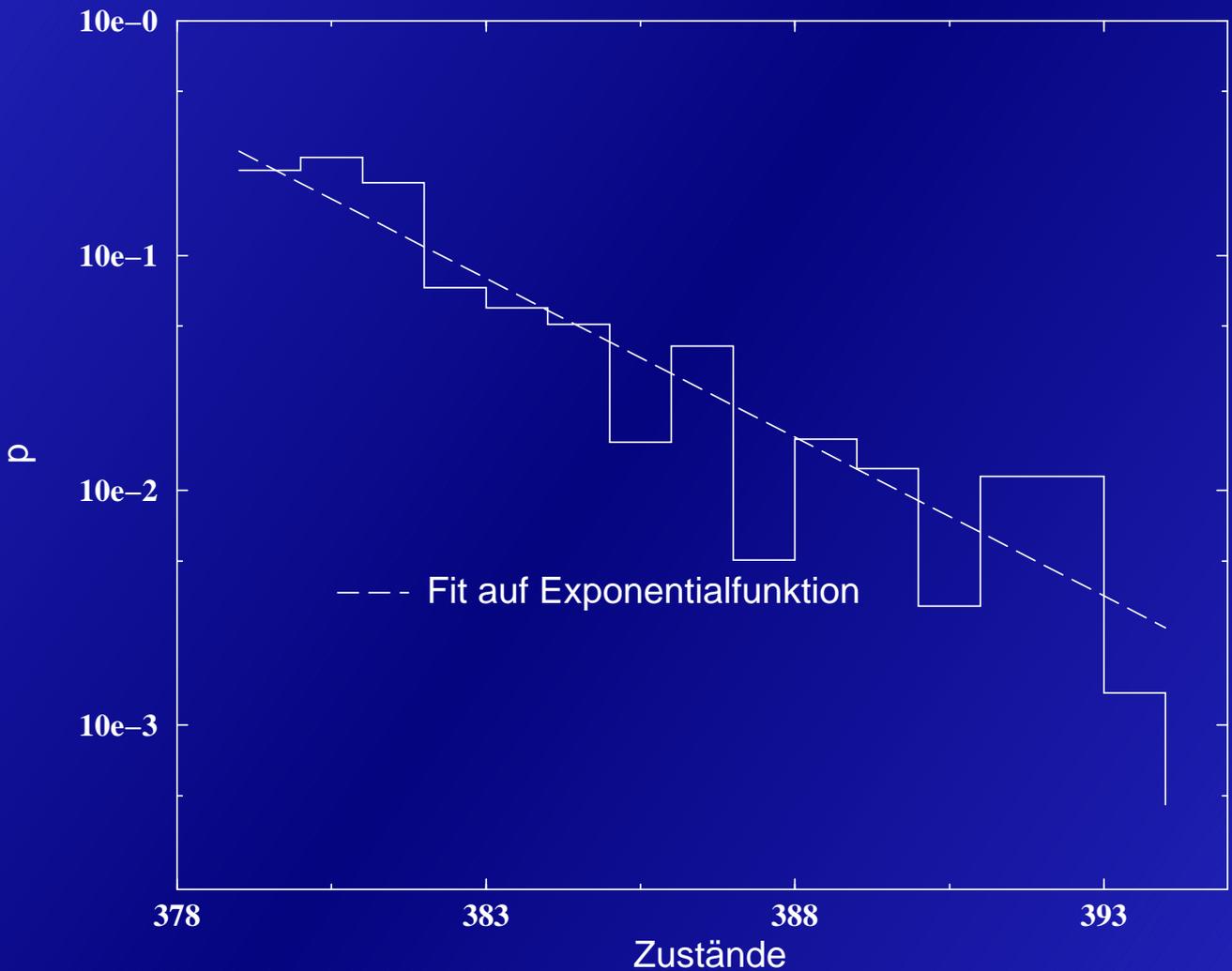
Entartungen der Dichtematrix



Ungeordnete Spinkette, $L = 10$, $\Delta = 3$, $w = 1$
und 40 Zustände, bei $N = 30$, $N = 31$

“Kampf” den Entartungen

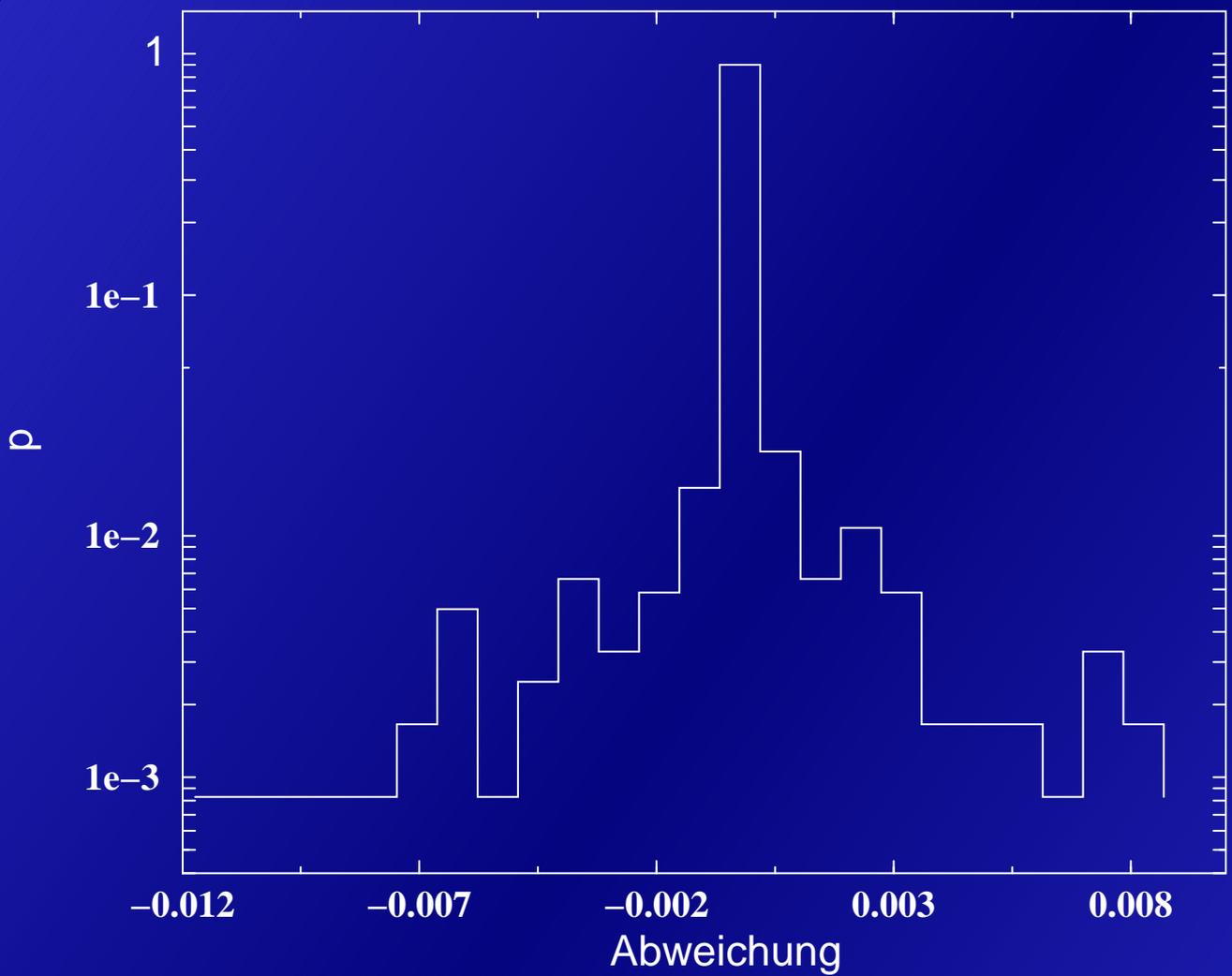
Automatisches Zufügen von Zuständen:



Hubbard-Kette, $L = 64$, 380 Zustände, $U = 3$,

$t_2 = -0.8$, $N_{\uparrow} = 33$, $N_{\downarrow} = 31$

(Rechenzeit 107 Stunden)



Vergleich: 11 Replika mit unterschiedlichsten Parametern,
d.h. 1200 Erwartungswerte zeigen nur geringste
Abweichungen.



Vergleich mit exakten Resultaten I

In **homogenen XXZ -Ketten** mit periodischen Randbedingungen kennt man exakte Resultate^a für $\Delta > 1$:

$$\lim_{r \rightarrow \infty} \langle S_i^z S_r^z \rangle = \left\{ \frac{\pi}{q} \left[\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\frac{\pi^2 (n - \frac{1}{2})^2}{2\lambda}} \right]^2 \right\}^2$$

mit

$$\lambda = -\frac{\log q}{2}$$

$$q = \frac{1}{(\Delta + \sqrt{\Delta^2 - 1})^2}$$

$\langle S_{20}^z S_{20+r}^z \rangle$ für $L = 80$ und $m = 160$

Δ	Exakt	Korrelationslänge	DMRG
1,2	0,0092	347,13	$0,0127 \pm 0,11$
1,5	0,0632	21,07	$0,0573 \pm 0,03$
5,0	0,2307	1,057	$0,2307 \pm 10^{-5}$

^aR.J. Baxter **J.Stat.Phys.** 9 (1973) 145

Vergleich mit exakten Resultaten II

Weiterhin gilt in **homogenen XXZ -Ketten** mit periodischen Randbedingungen ^a für $\Delta < 1$

$$|\langle S_i^x S_j^x \rangle| \sim |i - j|^{-\eta_x}$$

$$|\langle S_i^z S_j^z \rangle| \sim |i - j|^{-\eta_z}$$

$$\eta_x = \eta_z^{-1}$$

$$\eta_x = 1 - \frac{1}{\pi} \arccos(\Delta)$$

Δ	$\nu_{x,20}$	$\nu_{x,40}$	$\nu_{x,60}$	$\nu_{x,80}$	$\nu_{x,100}$	ν_{exakt}
0,5	0,678	0,684	0,685	0,684	0,682	0,666
0,0	0,474	0,483	0,486	0,487	0,486	0,5

^aLuther and Peschel **Phys.Rev.B** 12 (1975) 3908

Spinsysteme in 2D

Aus Betrachtungen von Spins in 2D ergibt sich für eine bestimmte Dimerisierung ein Mäandermodell als eine topologische Realisation^a.

Es wurden mit der DMRG Ketten der Längen 10, 14, 18, 22, 26, 30, 34, 38, 42, 46, 50, 58, 66, 74, 90, 98 (102, 106, 110, 114, 118, 122[*OBC*]) für $J_1 = 1, J_2 = 0, 25$ mit 80 Zuständen für offene und 120 Zuständen für periodische Randbedingungen gerechnet. Aus einem Fit von

$$\Delta := E_{1. \text{ ang.}} - E_{\text{GZ}}$$

ergab sich der asymptotische Wert

$$\Delta_{\text{PBC}} = 0,236522 \pm 0,00064$$

$$\Delta_{\text{OBC}} = 0,238342 \pm 0,00027 \quad (0,2141 \pm 0,0013)$$

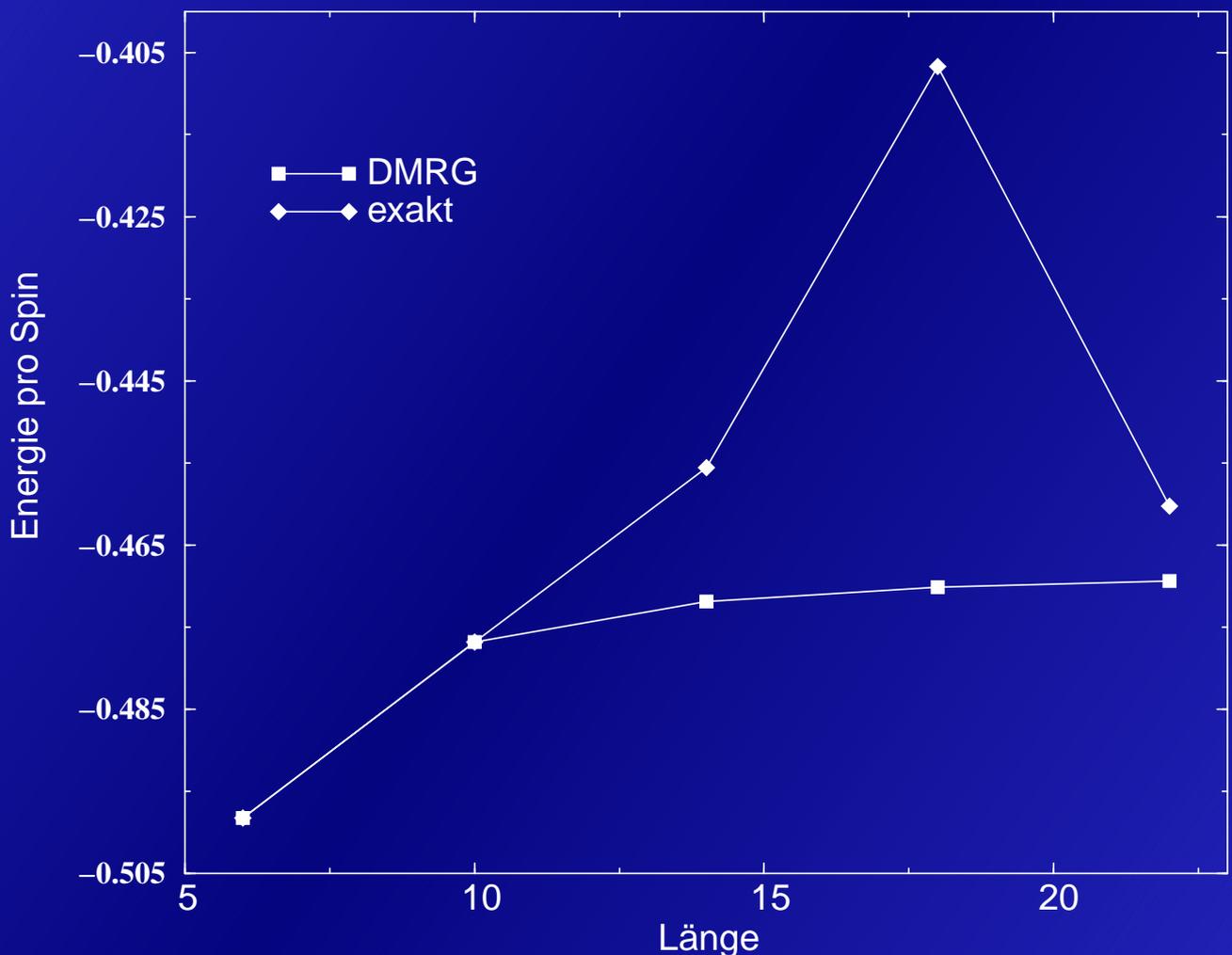
Ein Fit von TMRG-Resultaten für $T \rightarrow 0$ ergab^a

$$\Delta_{\text{TMRG}} = 0,212 \pm 0,002$$

^aJesko Sirker, Diplomarbeit, Universität zu Köln, 2000

Spinsysteme in 2D II

Vergleich der Konvergenz für $J_1 = 1$, $J_2 = 0.25$ mit 20, 40, 60, 80, 100, 120 Zuständen für periodische Randbedingungen durch Betrachtung der Energie pro Spin:



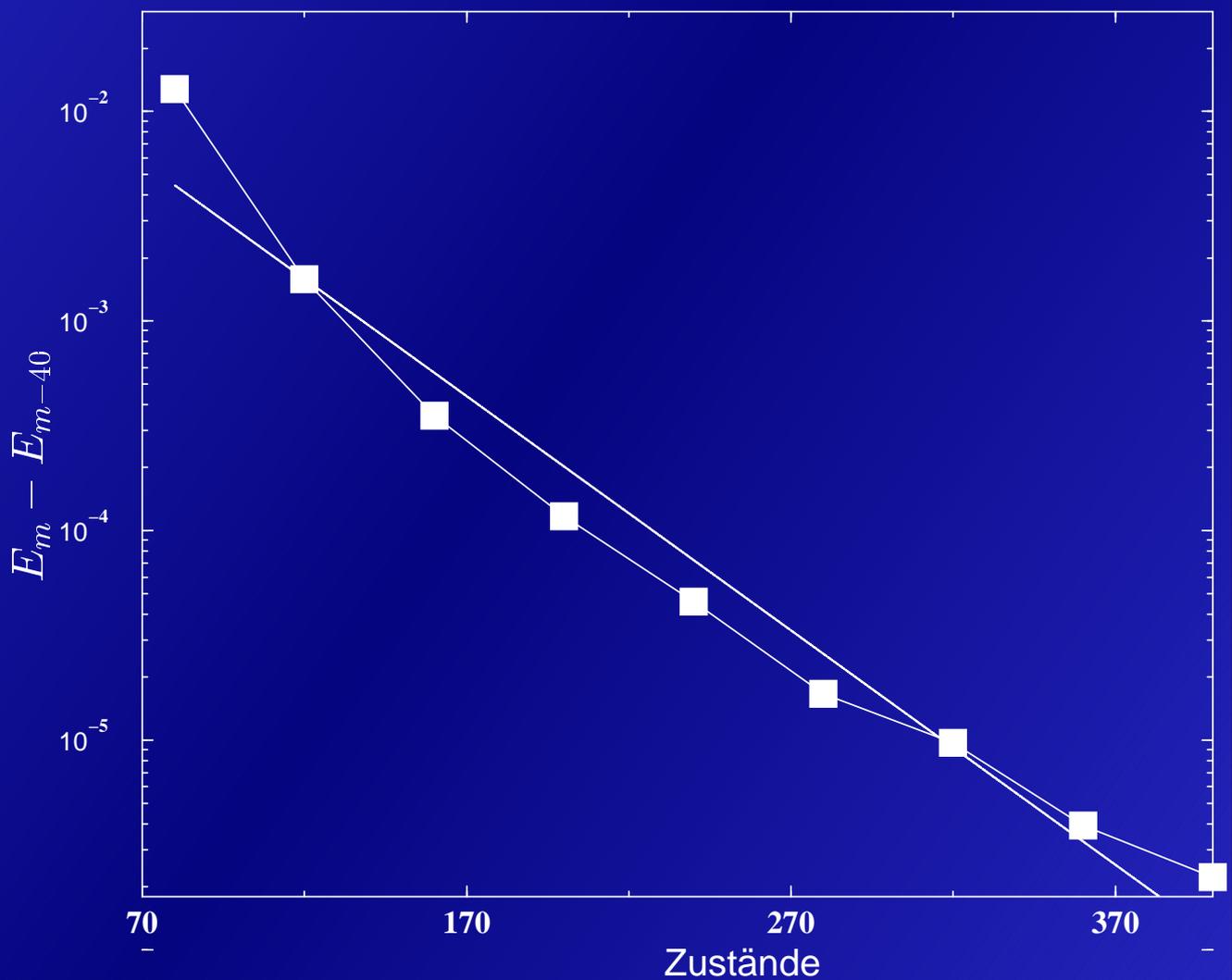
Keine merkliche Abhängigkeit von der Zustandszahl!

DMRG ist ein variationelles Verfahren!

Konvergenz bei Hubbard-Ketten

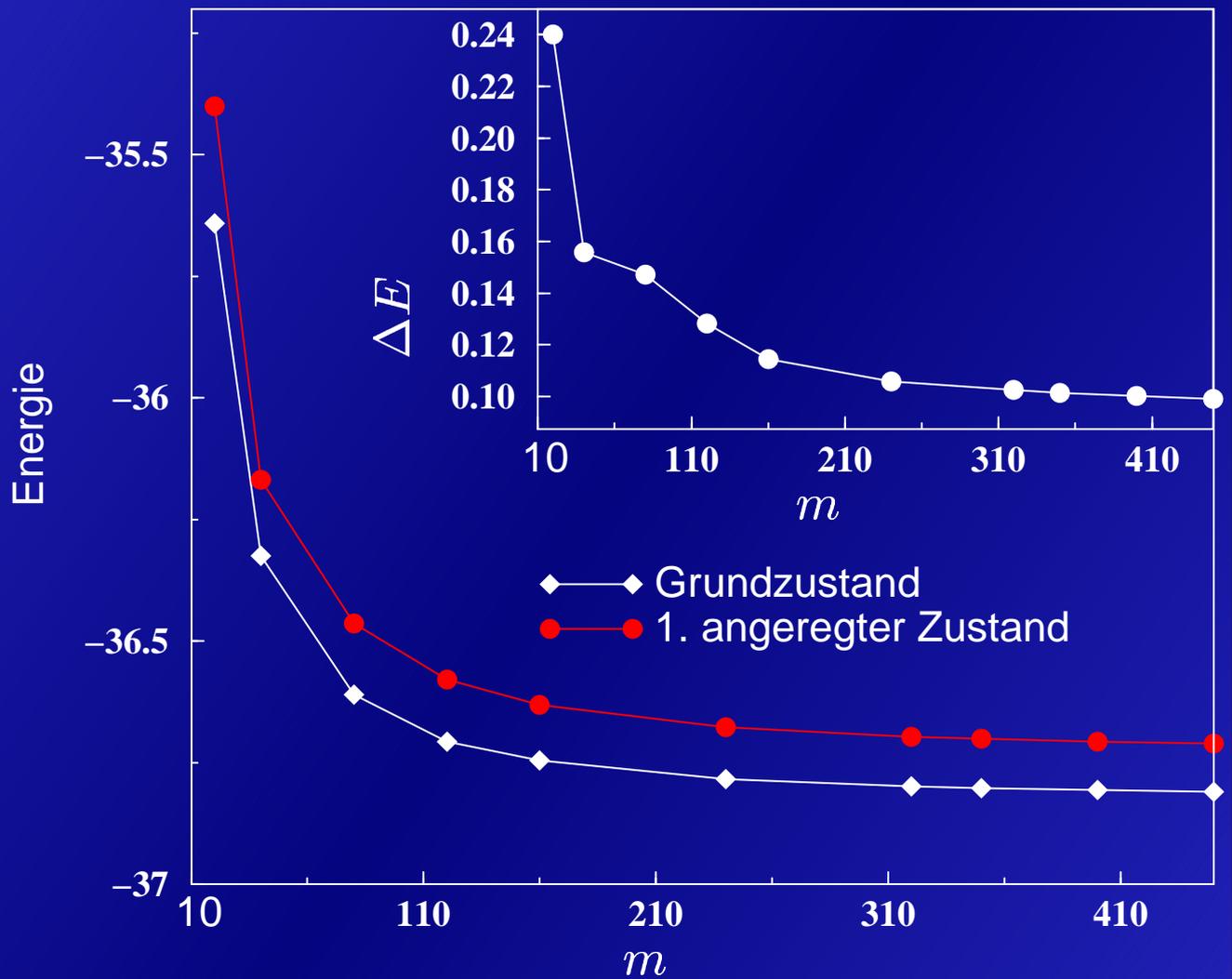
$$L = 64, U = 8, t_2 = 0, N_1 = 16, N_2 = 16$$

Verglichen mit Daten aus Diagonalisierung des
Ein-Teilchen-Hamiltonians:



Angeregte Zustände

Die Berechnung von angeregten Zuständen:



$$L = 32, N_1 = N_2 = 16, U = 1, t_2 = -0,8$$

Quantenchemie und DMRG

Hamiltonian in Raum-Orbitalen

$$H = \sum_{ij\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{ijkl\sigma\sigma'} V_{ijkl} c_{i\sigma}^{\dagger} c_{k\sigma'}^{\dagger} c_{l\sigma'} c_{j\sigma}$$

$$t_{ij} = \int d^3r f_i^*(r) \left(-\frac{1}{2m} \nabla^2 + V(r) \right) f_j(r)$$

$$V_{ijkl} = e^2 \int d^3r d^3r' f_i^*(r) f_j(r) \frac{1}{|r-r'|} f_k^*(r') f_l(r')$$

Verallgemeinerte Dichteterme



Mehrere (> 2) Fragmente/Sites
involviert

Langreichweitige Ww!

Orbitale in der QC

Welche Orbitale?

1. Molekulare Orbitale aus
SCF-Rechnung

2. Atomare Orbitale

Atomare Orbitale nicht orthonormiert

$\implies S_{ij} = \langle \phi_i | \phi_j \rangle \neq \delta_{ij}$ sondern

$$\{c_i, c_j^+\} = S_{ij}$$

$$\{c_i, c_j\} = \{c_i^+, c_j^+\} = 0$$

atomare Orbitale sind aber lokalisiert \implies

einige Matrixelemente sehr klein \implies

weniger langreichweitige Ww

Ausblick

- weitere Berechnungen zu Hubbard-Ketten und -Leitern
- Modell (Kopplungen aus SCF) für CuGeO_3
- Quantenchemie mit DMRG in SCF-Orbitalen
- Quantenchemie mit DMRG in atomaren Orbitalen

Danksagung

- Priv.Doz. Dr. Wenzel
- Prof.Dr. Keiter
- Prof.Dr. Weber
- Prof.Dr. Stolze
- Prof.Dr. Gros
- Prof.Dr. Klümper
- Dipl.Phys. Sirker
- Verband der chemischen Industrie
- Studienstiftung des dt. Volkes