

DMRG: von Spins bis zur ab-initio-Rechnung

Johann Wolfgang Goethe-Universität Frankfurt a.M.

Dr. Kay Hamacher

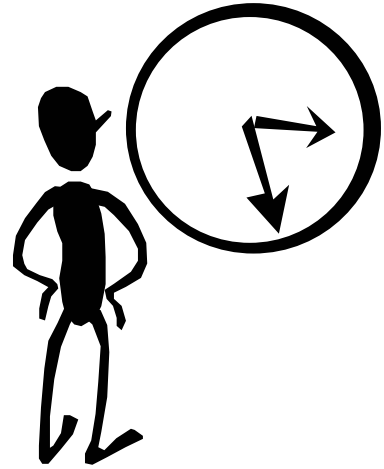
20. April 2004



Übersicht

- **Einführung**

- **Dichtematrix-Renormierungsgruppe**



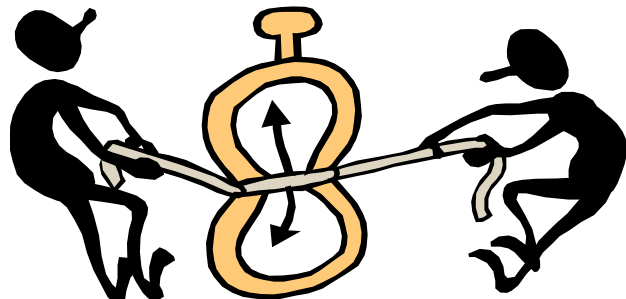
- **Magnetismus**

- Unordnung in Spinsystemen & Quantenphasenübergang

- **Stark korrelierte Elektronen**

- Fermiflächen im Hubbardmodell & Quantenphasenübergang

- **Quantenchemie & molekulare Elektronik**



Einführung

Analytische Methoden

Ising(Onsager),
1D Hubbard(Lieb,Wu)

Jahn-Teller-
Effekt

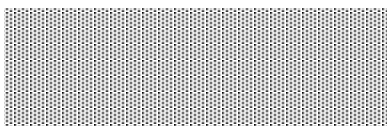
Modelle

Konkrete Systeme

Spins & Unordnung

ab-initio

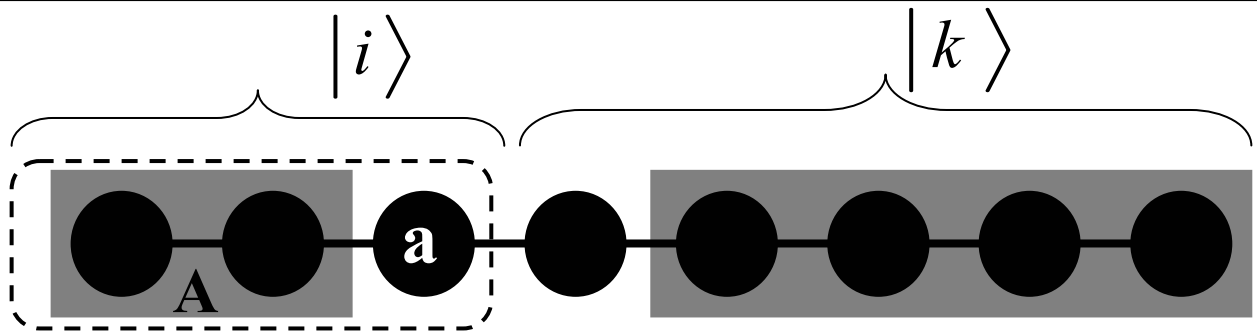
Numerische Methoden



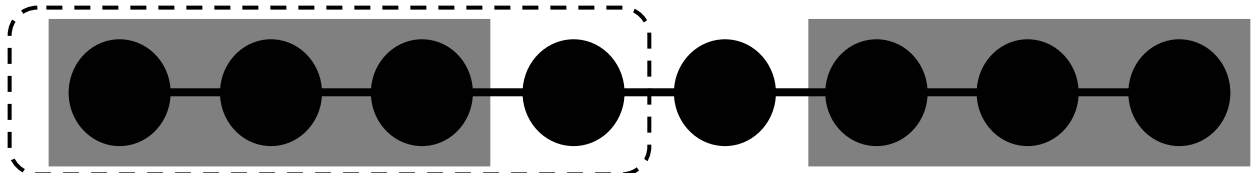
= heute

DMRG

Idee Auswahl über Dichtematrix-“Gewicht“, in 1D exp. Abfall, beste Approx. in red. Basis



1. Diagonalisiere H_{gesamt}
2. Erzeuge $\rho_{ij} = \sum_k |i, k\rangle\langle k, j|$
3. Diagonalisiere ρ_{ij} und selektiere m Zustände
4. Baue größeres System:
 - Operatortransformation
 - $H_{neu} = H_A + H_a + H_{Aa}$



Quantenphasenübergang in Spinketten auf Grund von Unordnung

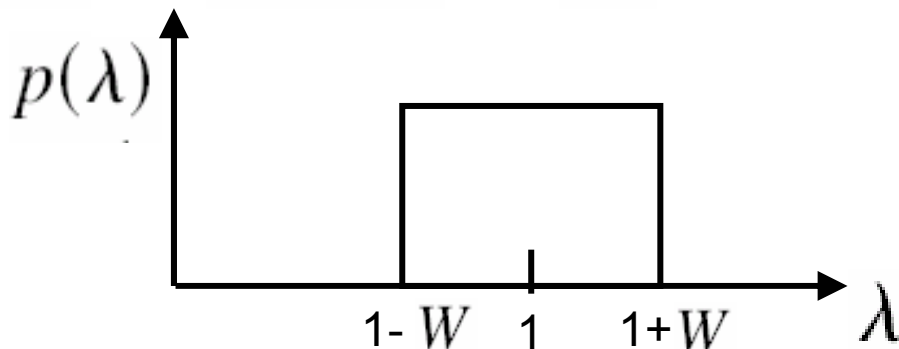
Hamacher et al. *Phys.Rev.Lett.* 89(2002)127202

Antiferromagnetische XXZ-Kette mit Unordnung

$$H = J \sum_{i=1}^{N-1} [\lambda_i (S_i^x S_{i+1}^x + S_i^y S_{i+1}^y) + \Delta S_i^z S_{i+1}^z]$$

mit

$$p(\lambda) = \frac{1}{2W} \Theta(W - |\lambda - 1|)$$



Zerfall der Korrelationen als Indikator für QPT

$$\Delta \leq 1 \quad |\langle S_i^\alpha S_j^\alpha \rangle| \sim |i - j|^{-\eta_\alpha}$$

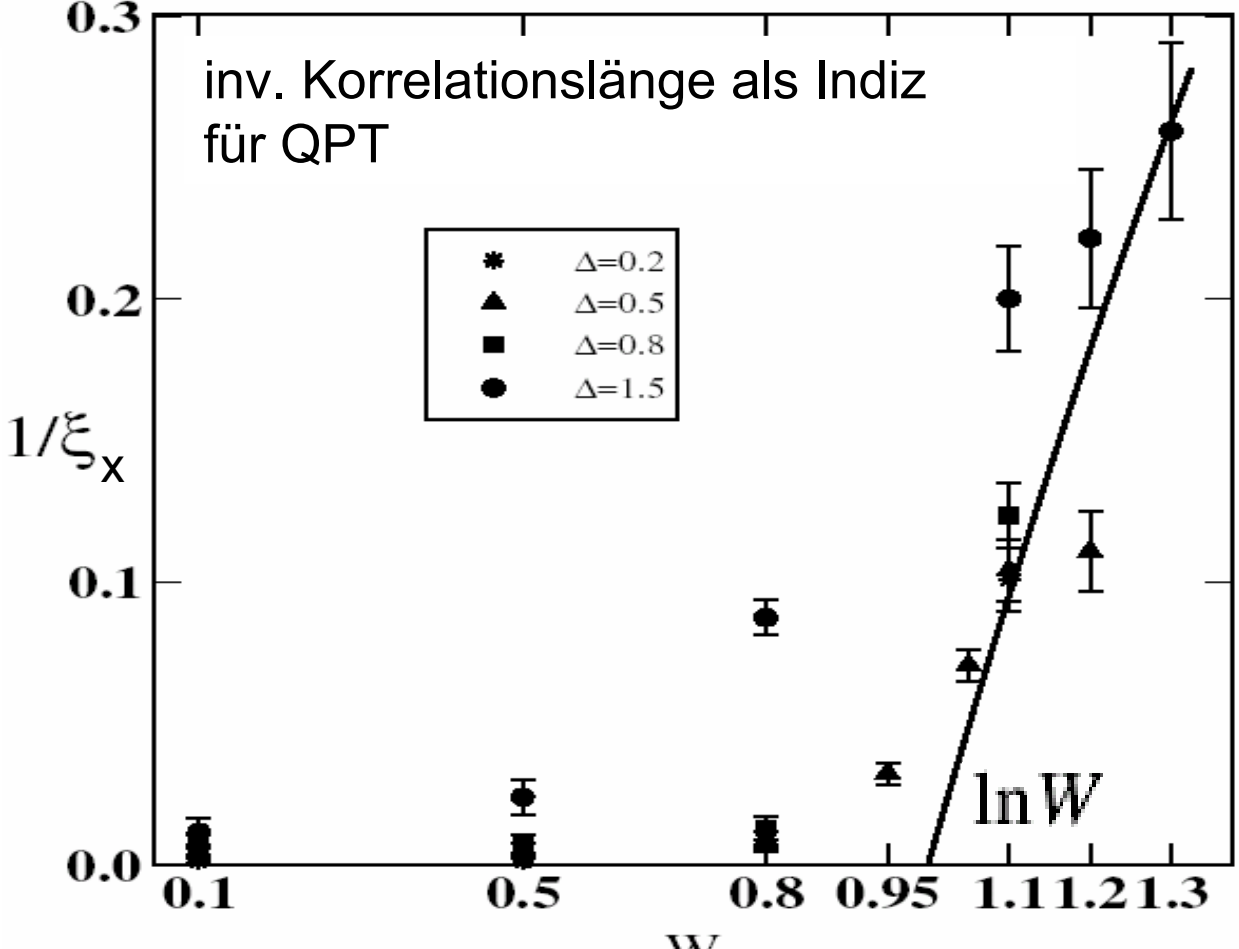
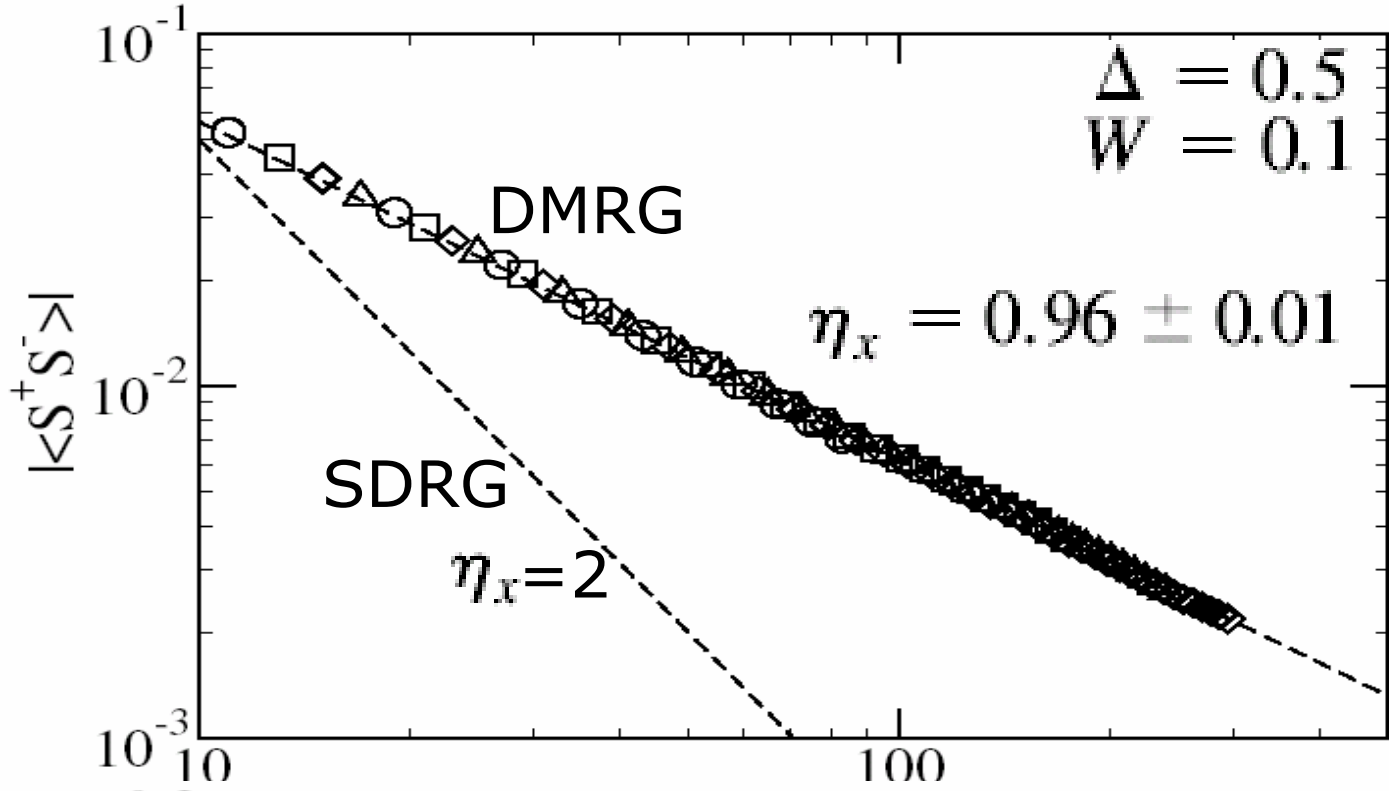
SDRG sagt $\eta_x = \eta_z = 2$ voraus (universell)

Homogenes System ($\lambda=1$)

$$\eta_x = \eta_z^{-1} = 1 - \pi^{-1} \arccos \Delta$$

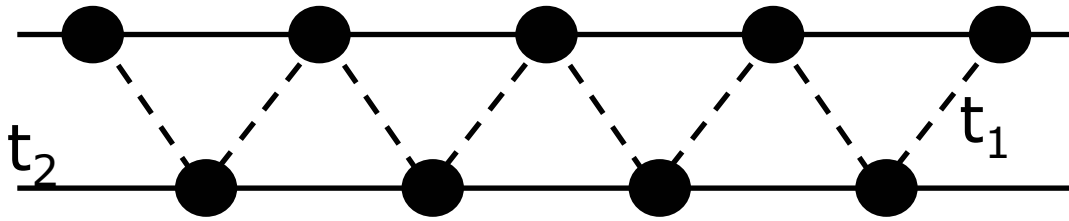
[A. Luther and I. Peschel, *Phys. Rev. B* **12**, 3908 (1975)]

Quantenphasenübergang und Abweichen von der RSRG



Hubbard Leitern

Hamacher et al. *Phys.Rev.Lett.* 88(2002)217203



(z.B. SrCuO₂ oder LiV₂O₅, Halbfüllung)

$$H = - t_1 \sum_{i=1, \sigma}^L \{ c_{i\sigma}^+ c_{i+1\sigma} + h.c. \} \\ - t_2 \sum_{i=1, \sigma}^L \{ c_{i\sigma}^+ c_{i+2\sigma} + h.c. \} \\ + U \sum_{i=1}^L n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}$$

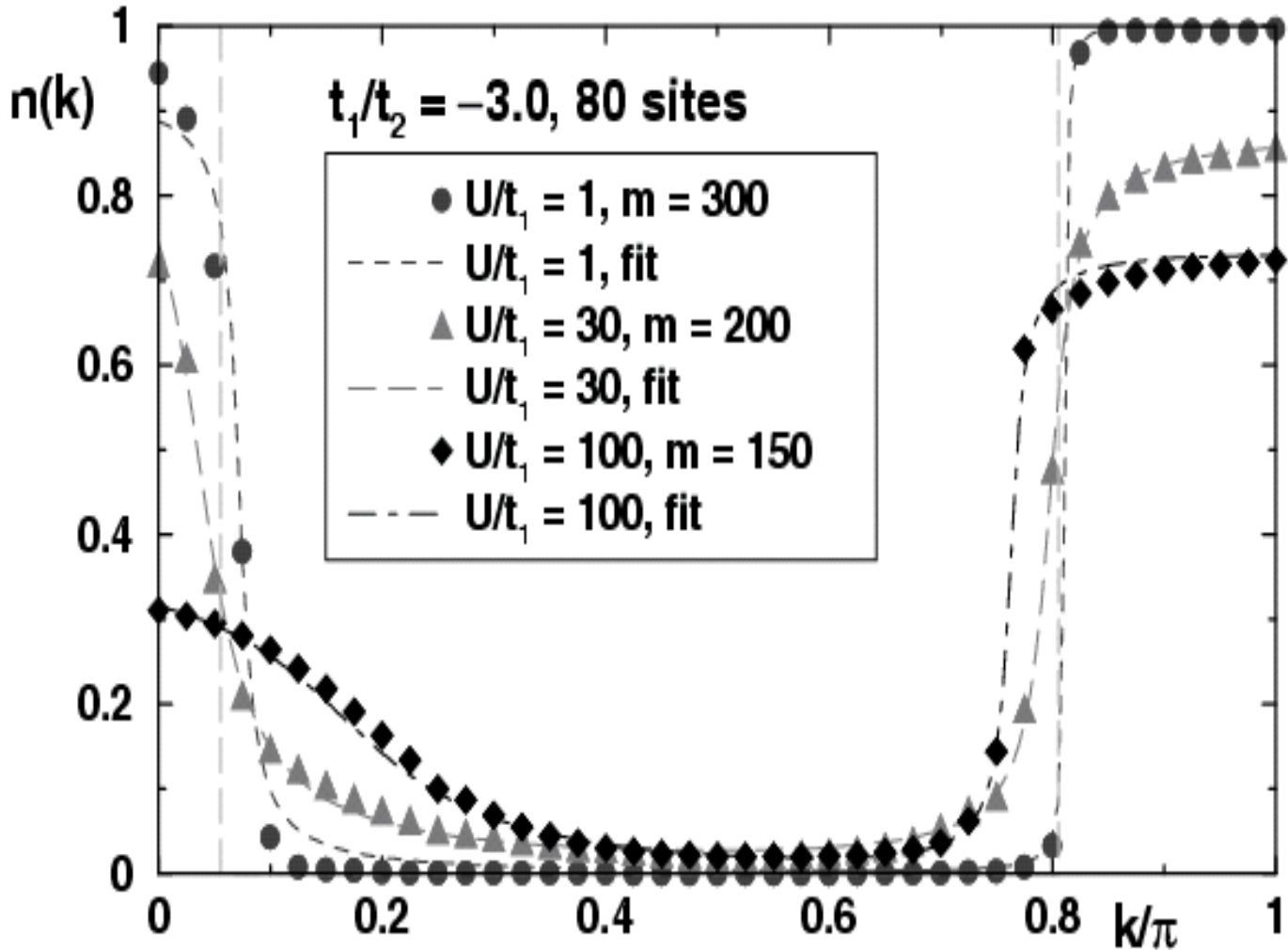
RG sagt $\Delta k_{F1/2} \sim U^2$ voraus

**Korrelationsfunktionsberechnung
aufwendiger als reine Energieberechnung**

$$n_{\sigma}(k) = \frac{2}{L} \sum_{n, n'=1}^L \cos[k(n - n')] \langle c_{n, \sigma}^+ c_{n', \sigma} \rangle$$

2L² Operatoren zu speichern!

Wechselwirkungsinduzierte Änderung des Fermisees (1/2)



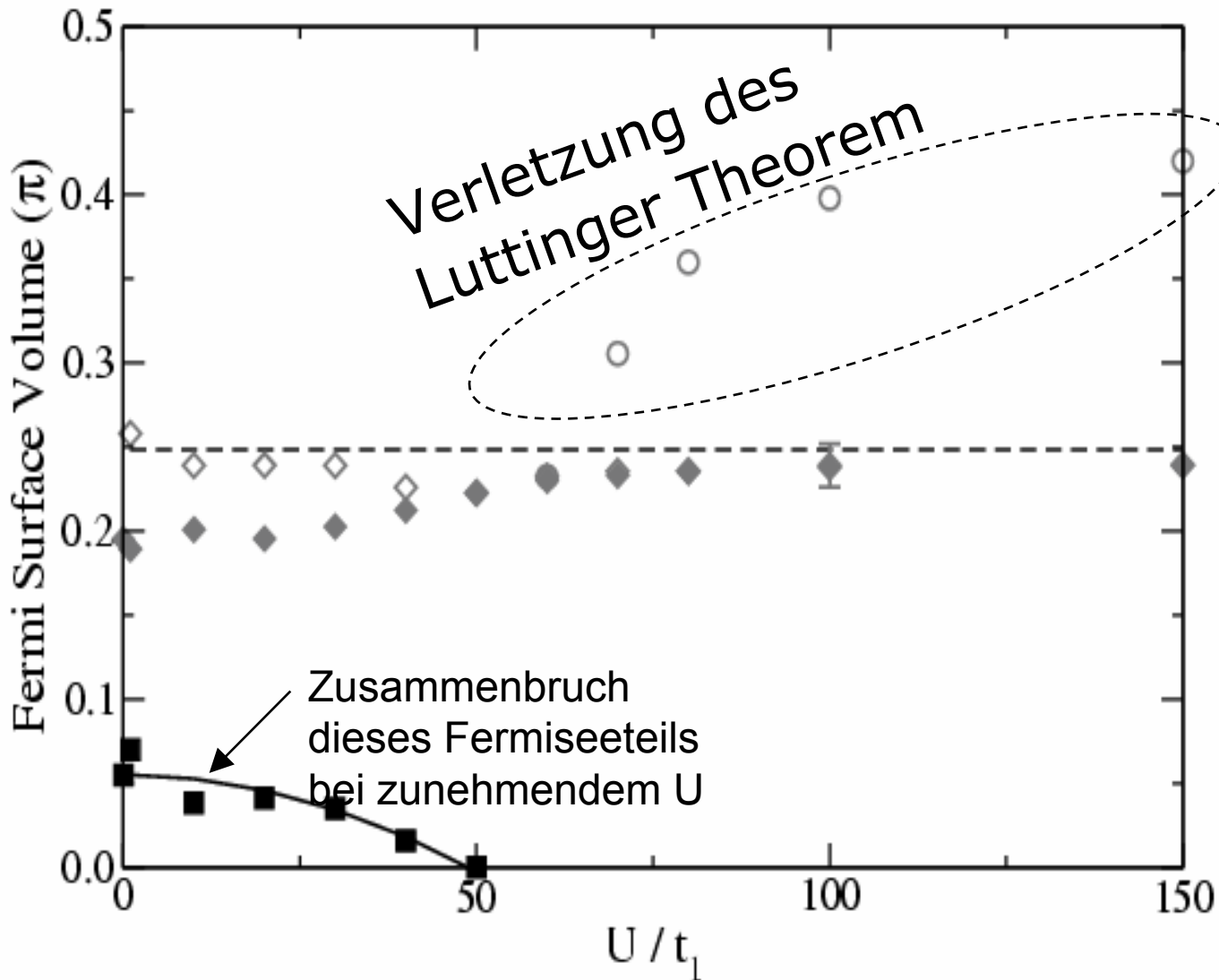
Linearisierung um den Fermi-Punkt

$$E_{1/2} \sim v_{F,1/2} k$$

aber $v_1 = 0.658 t_1$ und $v_2 = 6.620 t_1$

führt zu mehr/weniger Erzeugung von
Teilchen-Loch-Anregungen und dadurch
zu verschiedenem Ausmaß der Leerung

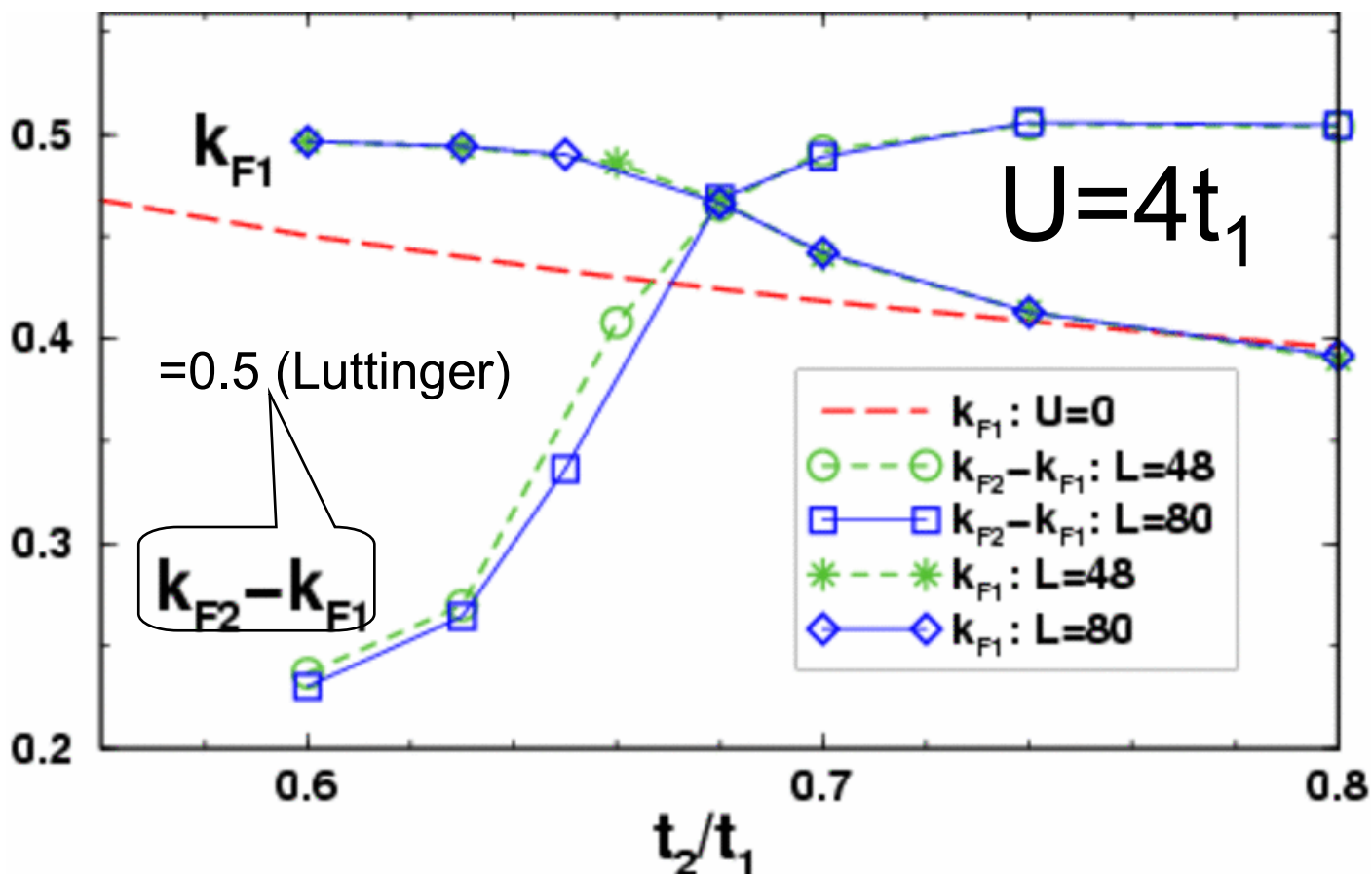
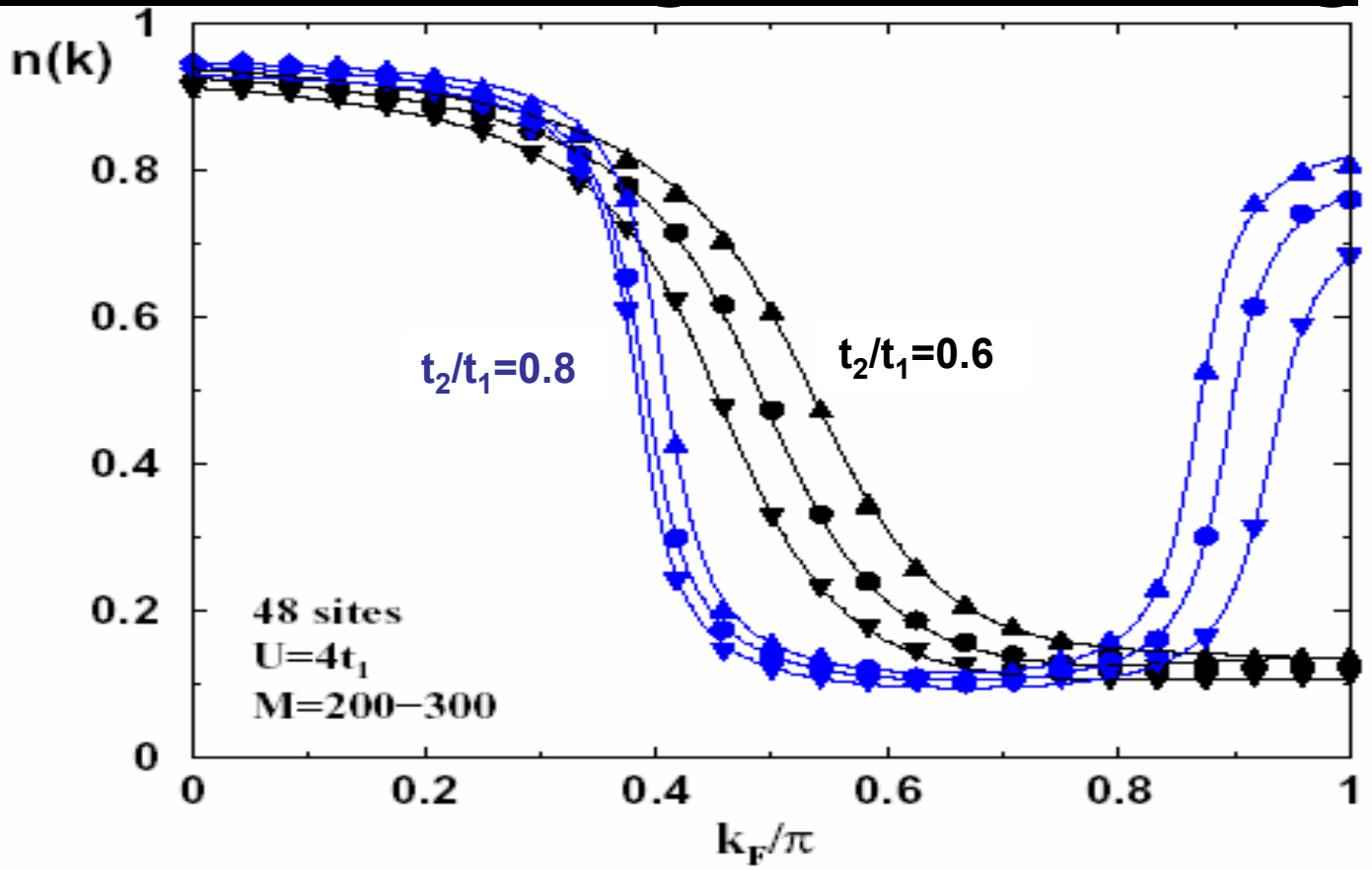
Wechselwirkungsinduzierte Änderung des Fermisees (2/2)



Bemerkungen

- U_c bei halber Füllung reduziert (*Louis et al.*) – hier wurde Viertelfüllung betrachtet
- Coulomb ist langreichweitig und leistet weitere Beiträge über U hinaus

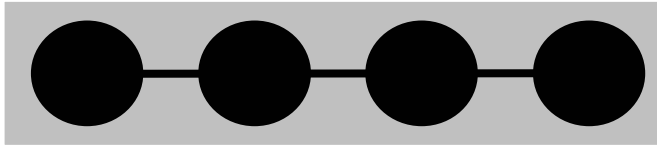
Fermisee-Änderung bei halber Füllung



Quantenchemie

$$H = - \sum_{ij\sigma} \langle i|h|j \rangle c_{i\sigma}^+ c_{j\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{ijkl\sigma\sigma'} \langle ij|V|kl \rangle c_{i\sigma}^+ c_{j\sigma'}^+ c_{l\sigma'} c_{k\sigma}$$

i, j, k, l : Molekülorbitale aus Hartree-Fock-Rechnung
 langreichweitige Wechselwirkung, daher muss jeder Operator in jedem Schritt gespeichert werden:

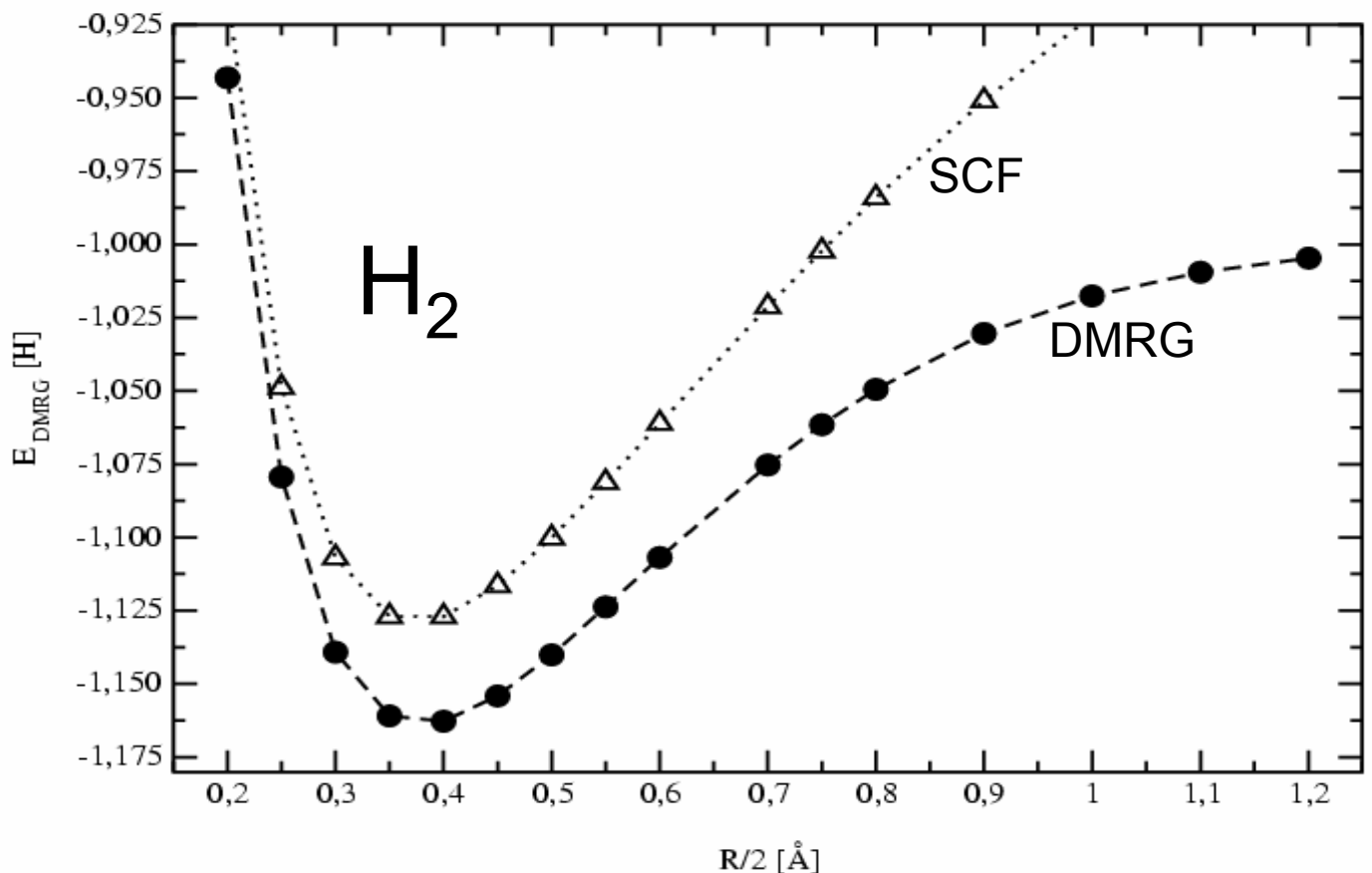


#Ops $\sim N^2$

schematisch: $c_{i\sigma}^+ c_{j\sigma'}^+ c_{l\sigma'}$ $c_{i\sigma}^+ c_{j\sigma'}^+ c_{l\sigma'}$

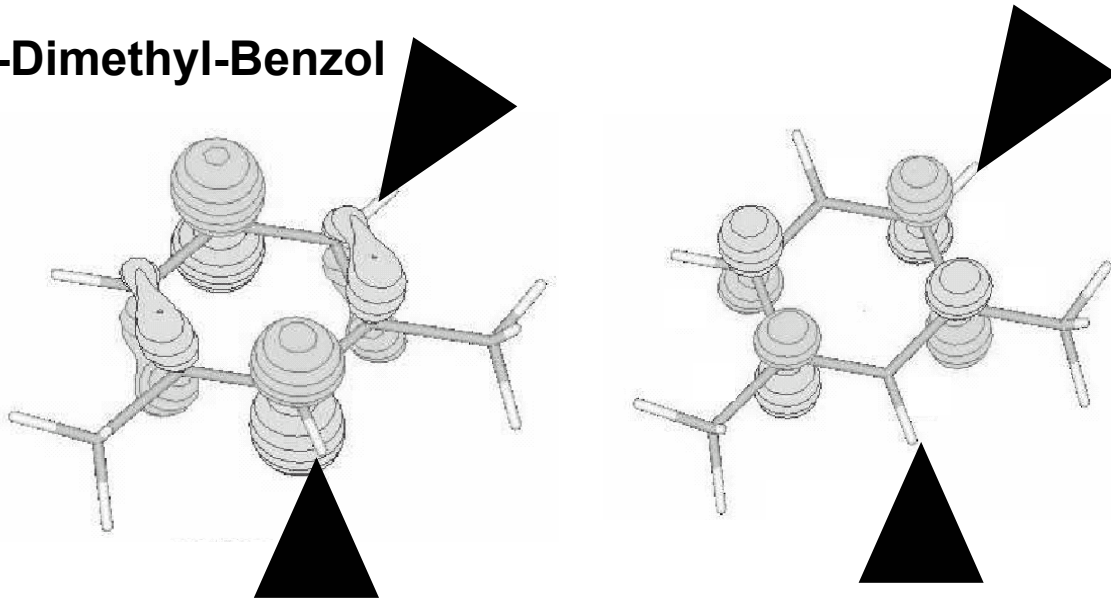
$c_{i\sigma}^+ c_{j\sigma}$ $c_{i\sigma}^+ c_{j\sigma}$ $c_{i\sigma} c_{j\sigma}$ $c_{i\sigma}^+$ $c_{i\sigma}$

$\Delta_{FCI/DMRG} \approx 10^{-7} \text{ H}$ $m=30$, cc-pVDZ \Rightarrow 10 „sites“
 \Rightarrow avg. 1560 operators



Quantenchemie & Molekulare Elektronik

2,4-Dimethyl-Benzol



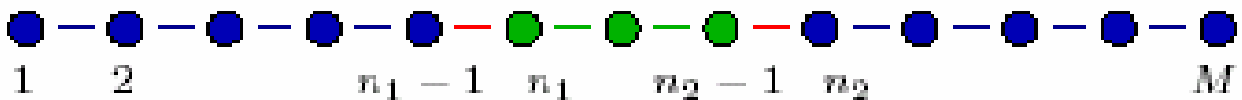
[M.Hettler et al., Europhys.Lett. **57**, 571 (2002)]

Transport mit der DMRG

Left Lead
 $M_L/2$ sites

Nano System
 M_S sites

Right Lead
 $M_L/2$ sites



$$\mathcal{H} = -t \sum_{x=1}^M \left(c_x^\dagger c_{x-1} + c_{x-1}^\dagger c_x \right) + U \sum_{x=n_1+1}^{n_2-1} n_x n_{x-1} \\ + \gamma U \sum_{x=n_1, n_2} n_x n_{x-1},$$

[P.Schmitteckert, cond-mat/0403759]



... und nun zu Ihren Fragen ...

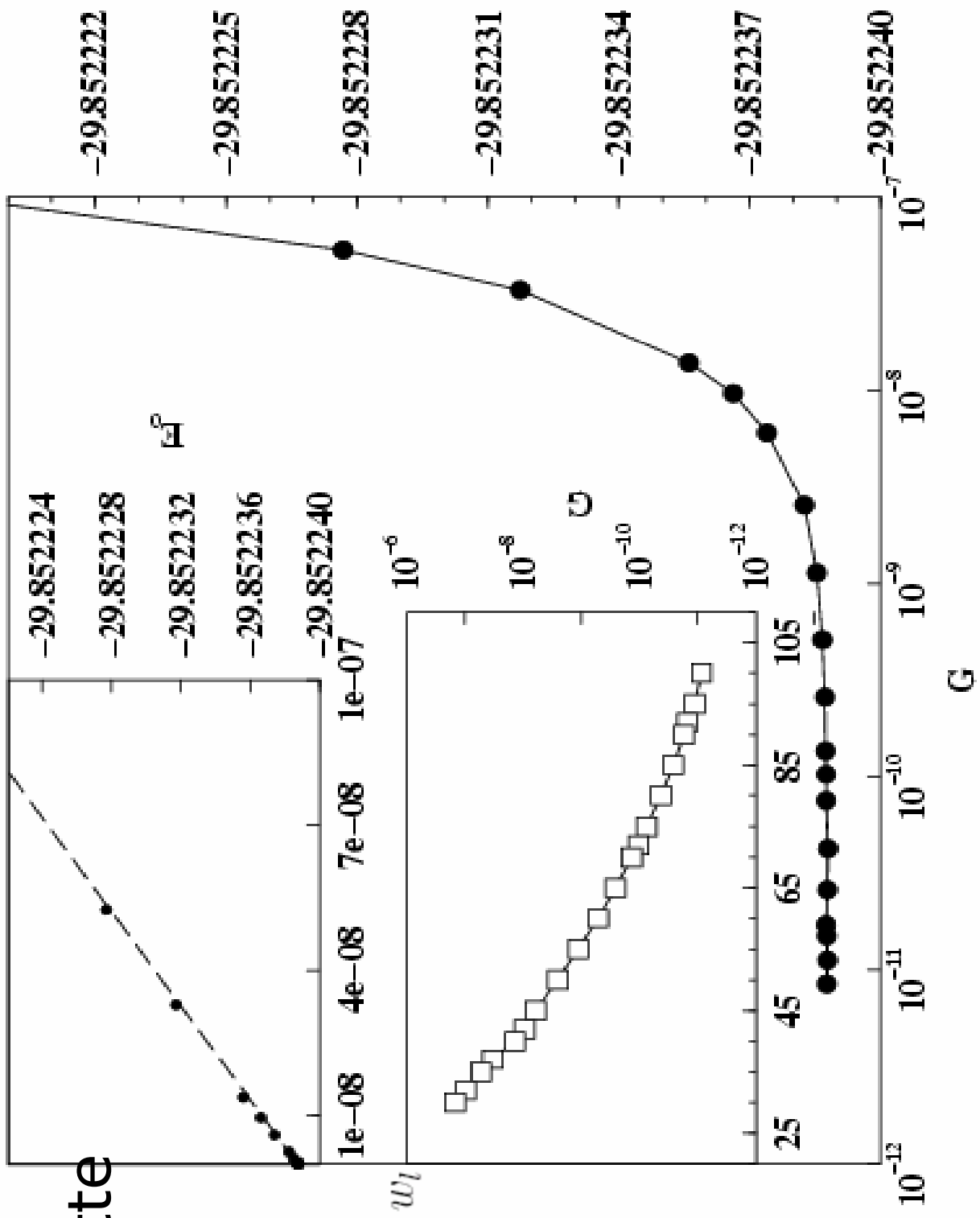


Anhang

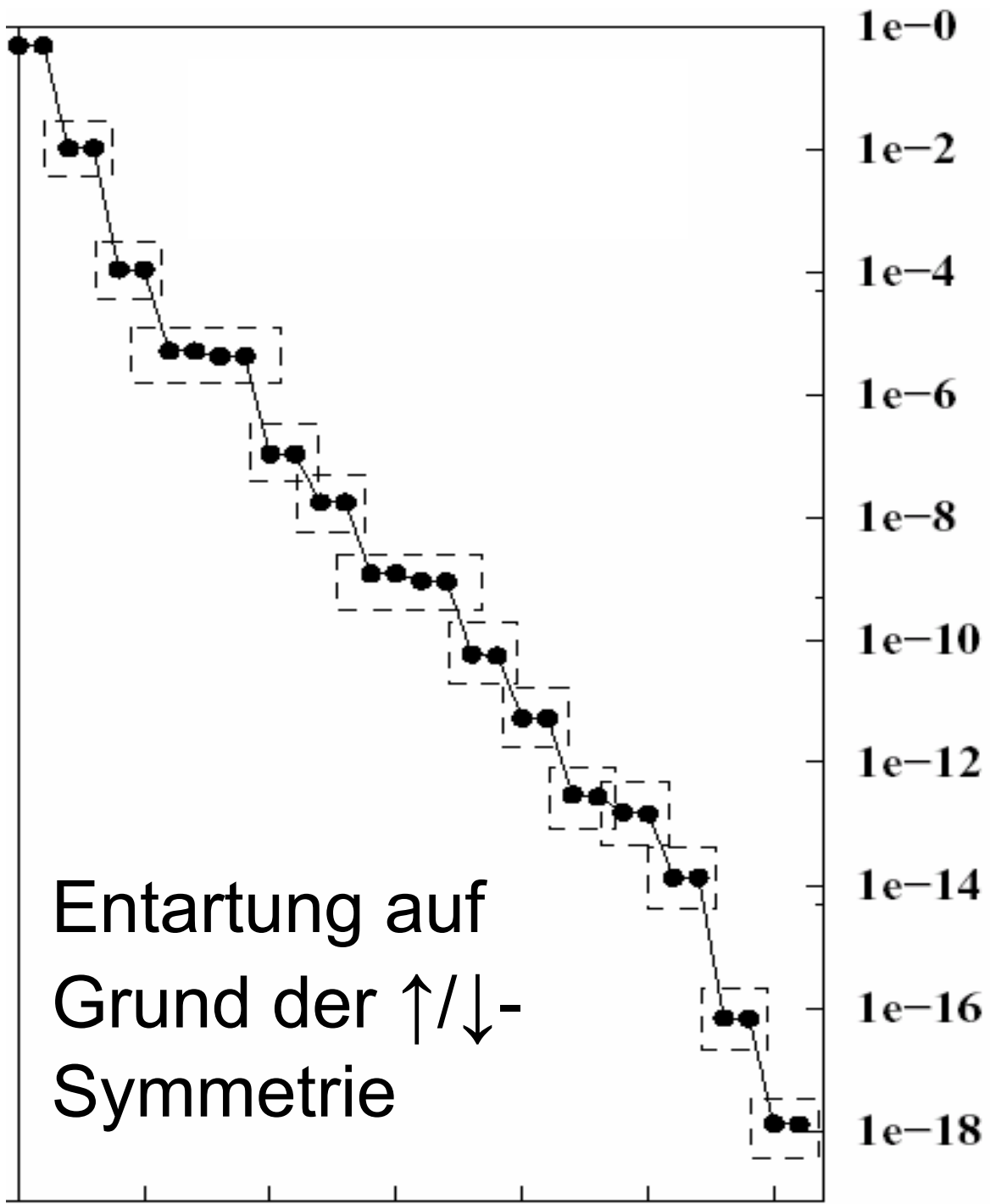
Discarded Weight G ist ein gutes Genauigkeitsmaß

Spinkette
L=80

$$G := \sum_{l=m+1}^M w_l$$



Sortierte Einträge der Dichtematrix einer Spinkette

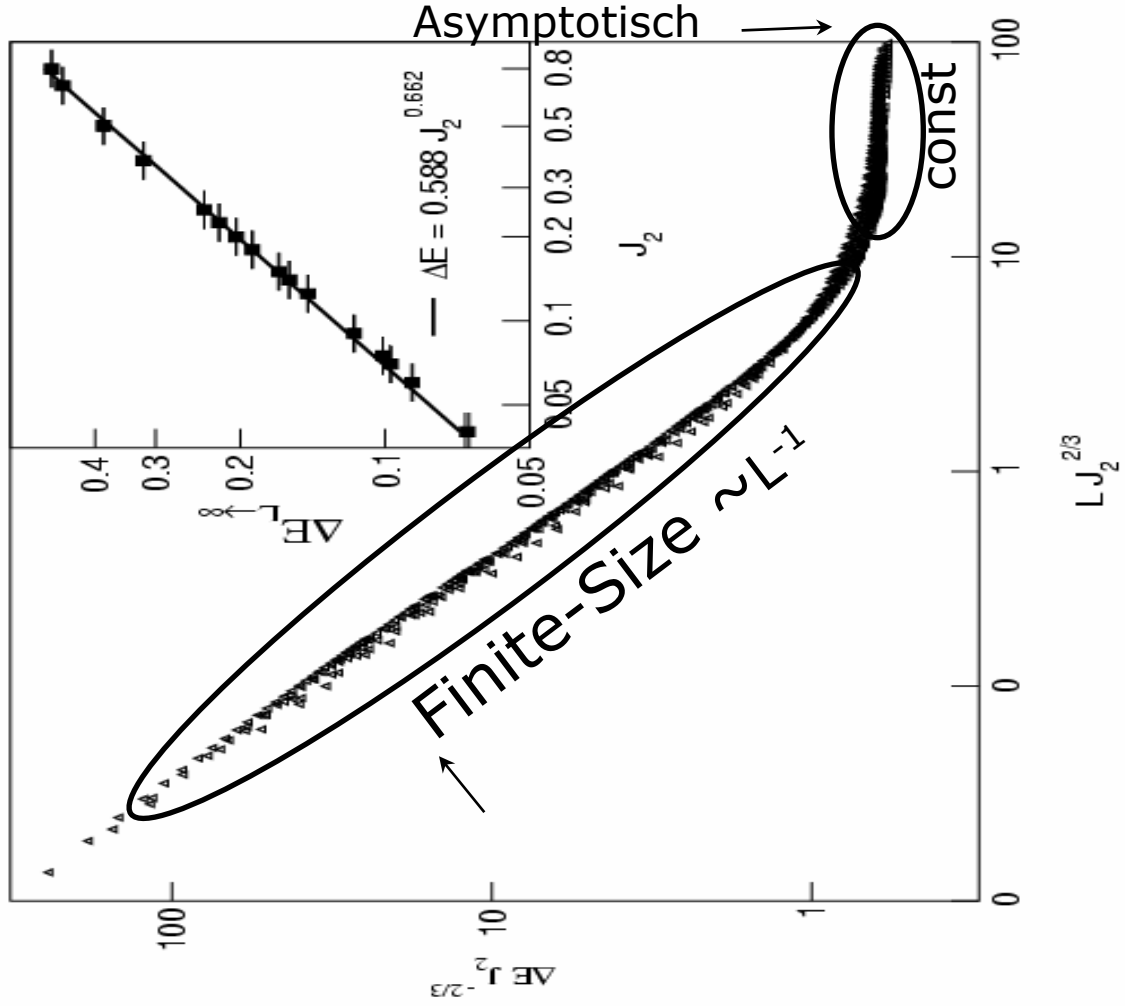
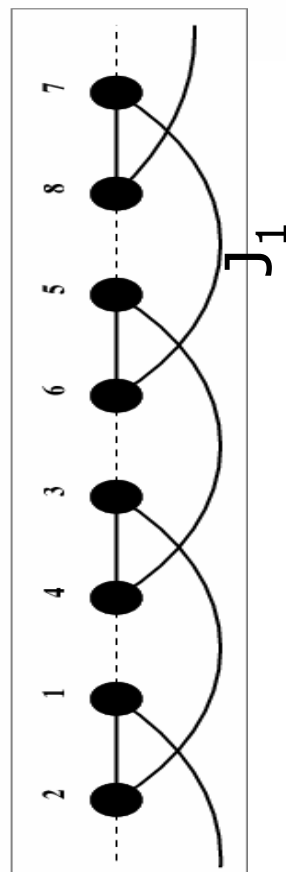
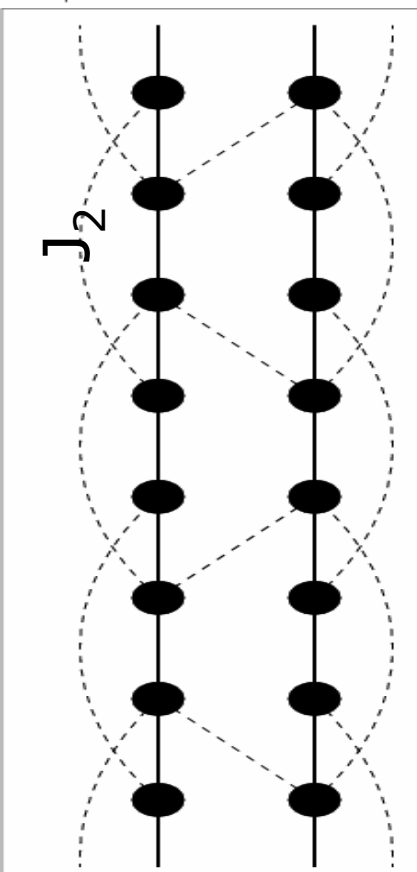
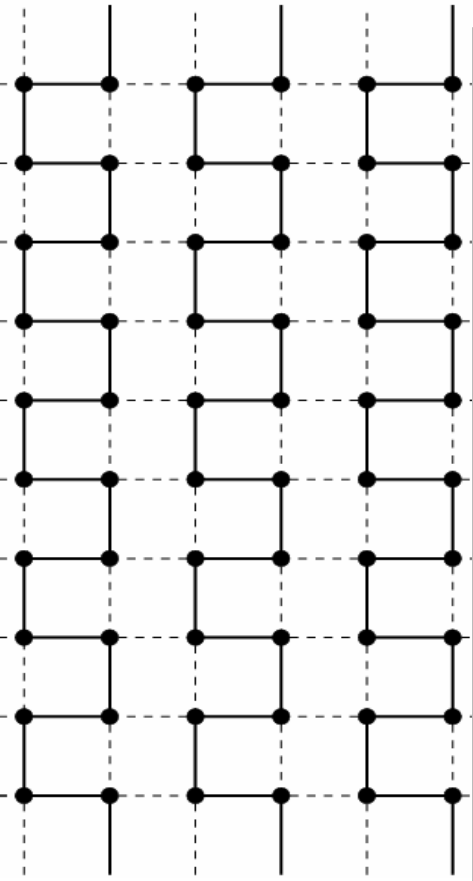


2D dimerisierte Spinsysteme (z.B. CaV_4O_9)

Sirker, Klümper,
Hamacher,
PRB 65(2002)134409

Phononen $2 \times (\pi, \pi) + 1 \times (0, \delta)$

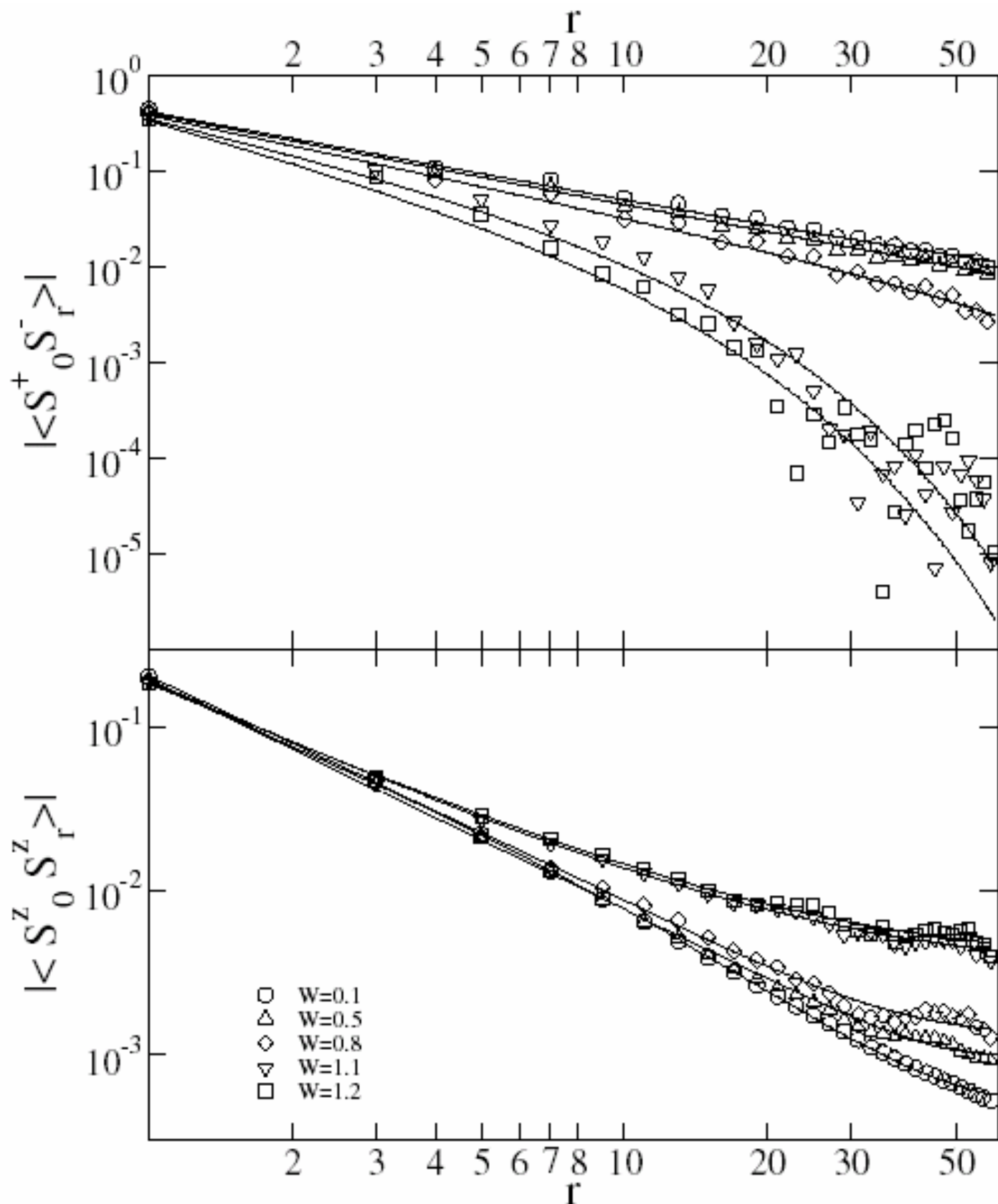
RG: $\Delta E \sim J_2^{2/3}$



$\Delta=0.5$ und verschiedene Unordnung W

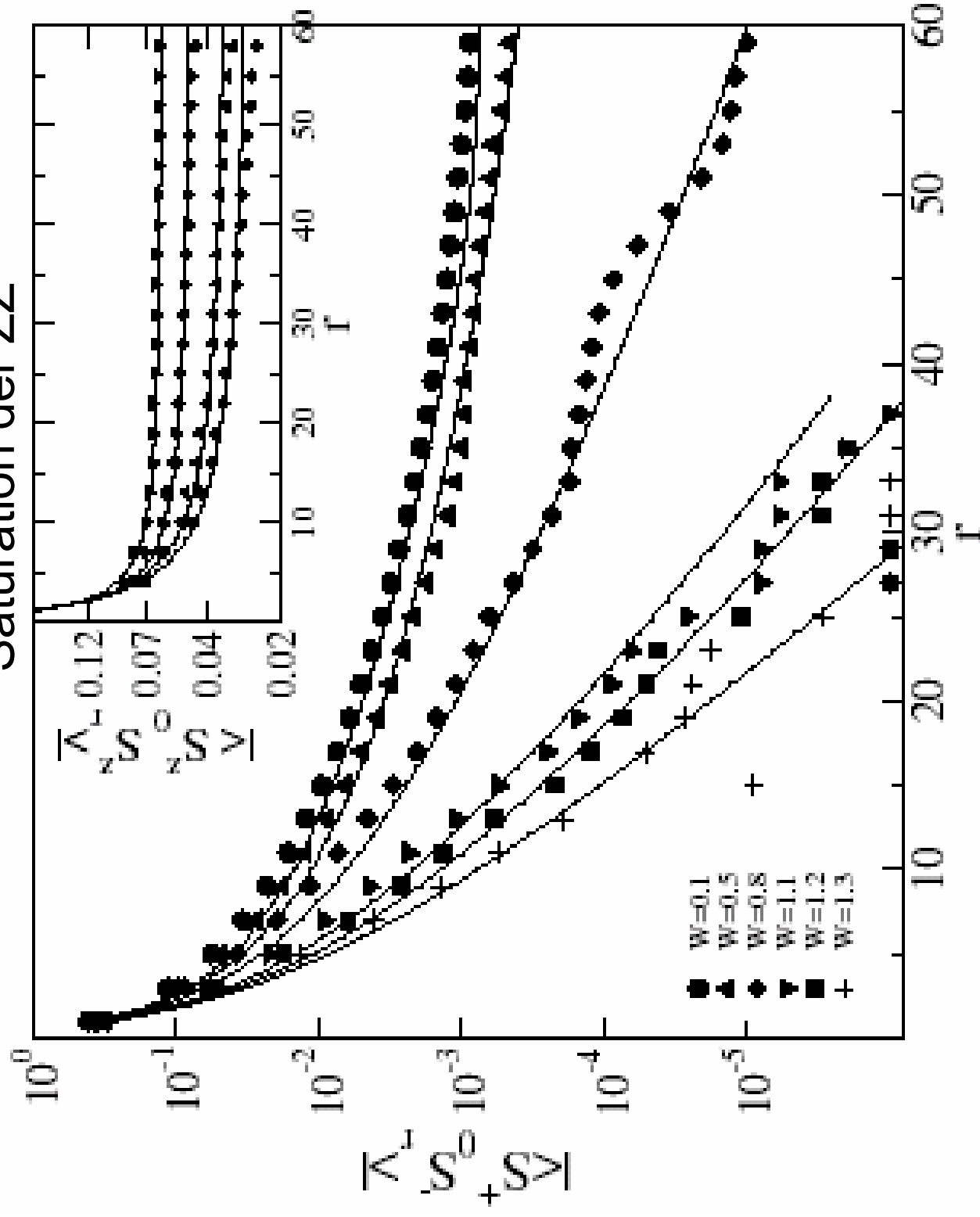
ZZ: algebraischer Zerfall, Korrelation steigt mit größerem W

XX: algebr. Zerfall für $W<1$, exp. für $W>1$

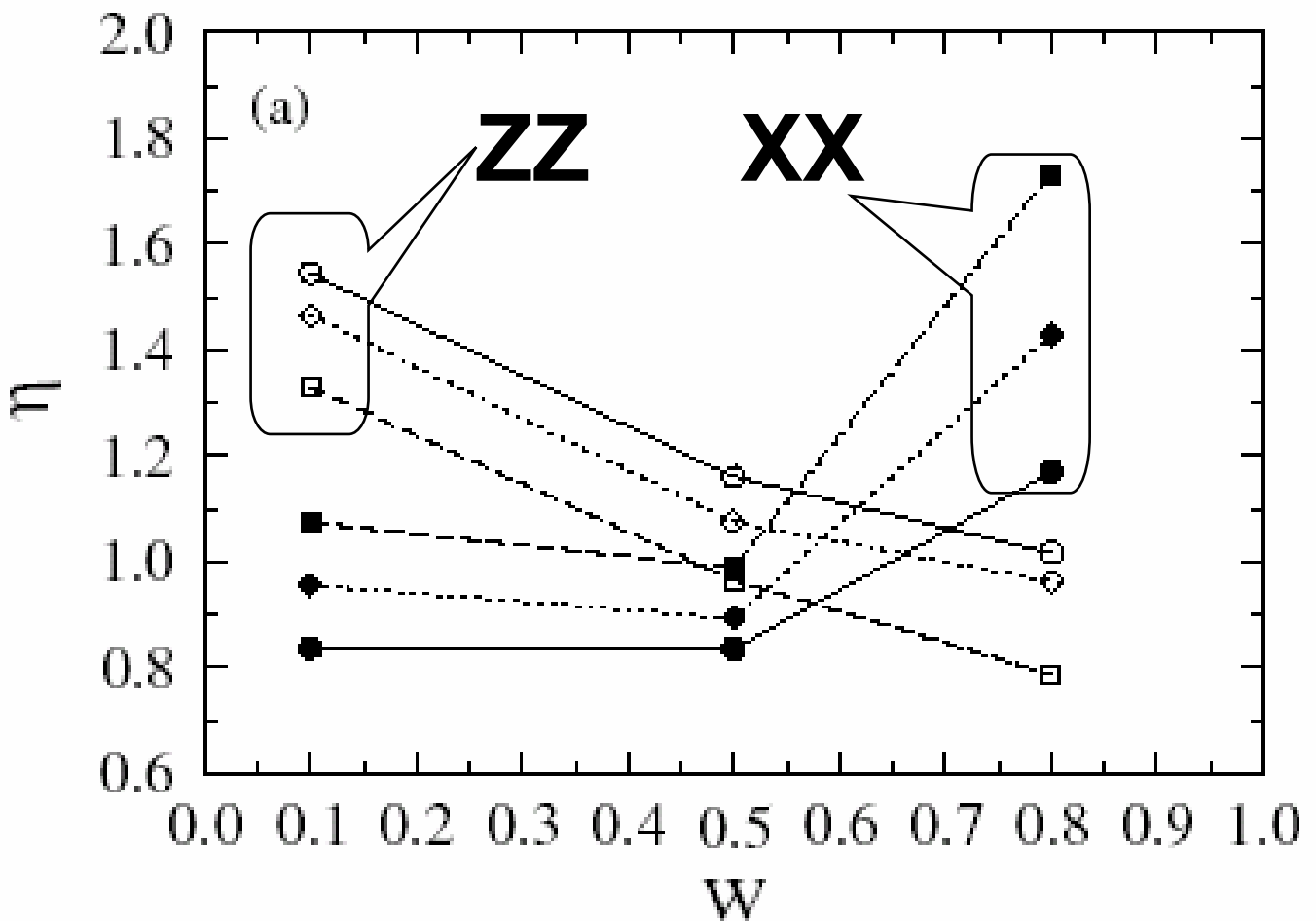


$\Delta=1.5$, algebr. Zerfall für $W<1$, exp. für $W>1$,

Saturation der ZZ



Zerfallsexponenten für den algebraischen Zerfall der XX- und ZZ-Korrelationen $\Delta < 1$

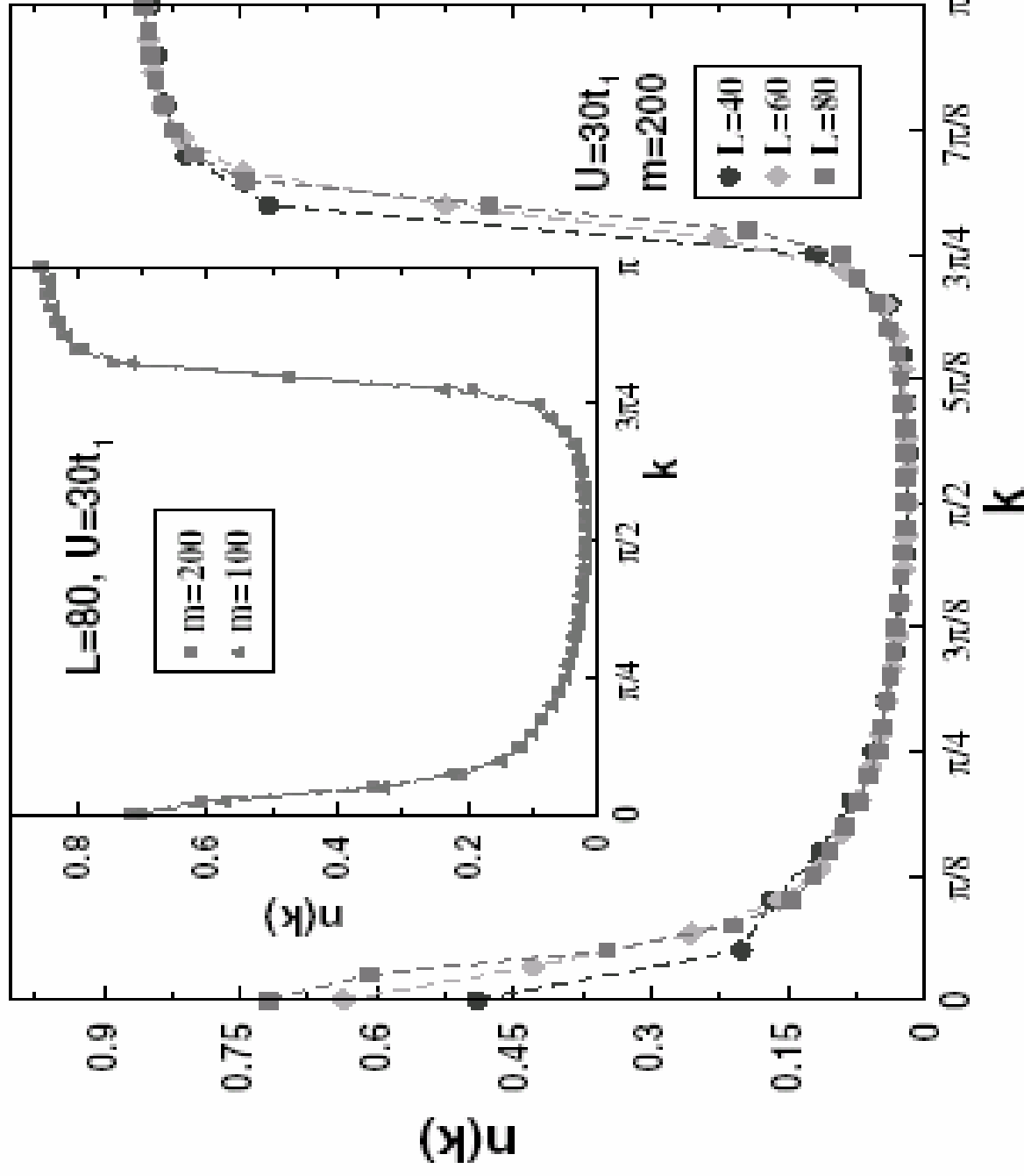


■ $\Delta=0.2$

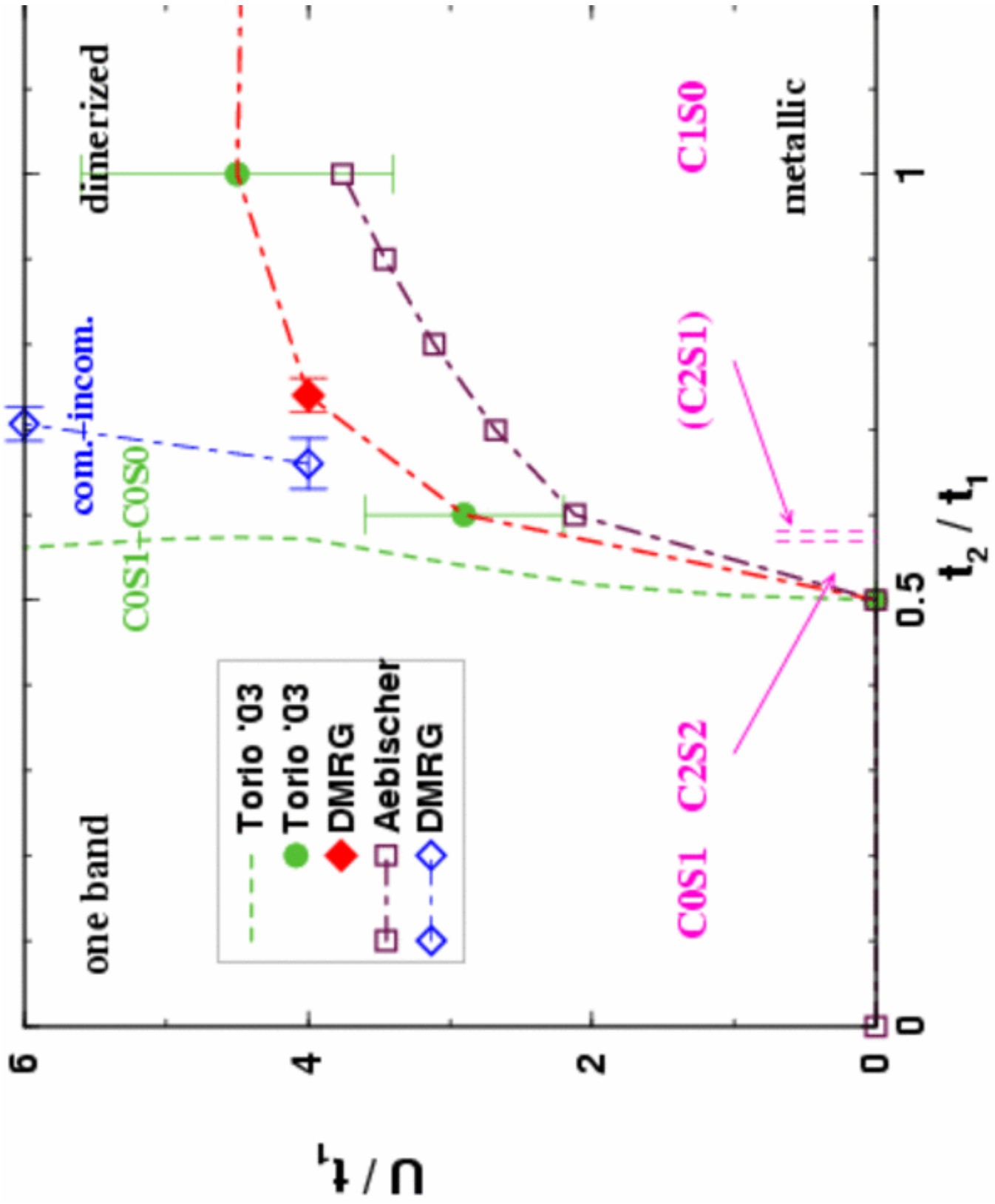
● $\Delta=0.5$

◇ $\Delta=0.8$

Konvergenz der Korrelationsfunktionen für verschiedene L und m mit Viertelfüllung und $t_1 = 1$, $t_2 = -3$



Phasendiagramm der Hubbard-zig-zag-Leiter



Die Verschiebung k_{F1} für $L=48, 80$ und $U=4t_1$

