

Untersuchung
Quantenmechanischer Korrelationen
mit der
Dichtematrix-Renormierungsgruppe

Disputation von Kay Hamacher

Universität Dortmund

20. Dezember 2001

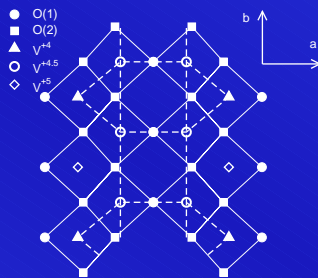
Inhalt



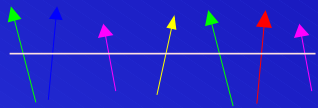
Einführung (Korrelationen)



Der DMRG-Algorithmus



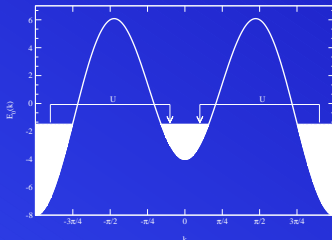
NaV_2O_5



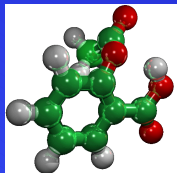
Ungeordnete Spinketten



Dimerisierte Spinketten



Hubbardketten & Fermiflächen

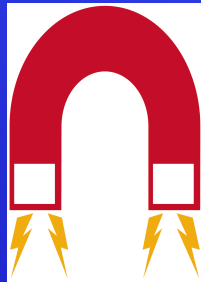


Quantenchemie



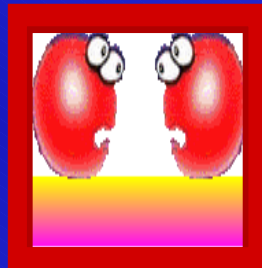
Ausblick

Korrelationen

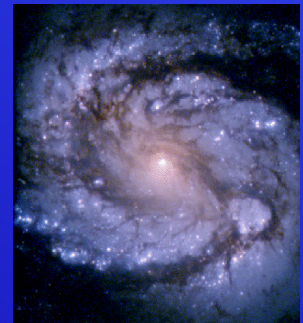


Magnetismus

elektronische



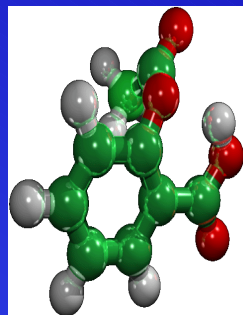
Korrelationen



opt. Spektren



Supraleiter



chem. Bindung

Vielteilchenproblematik

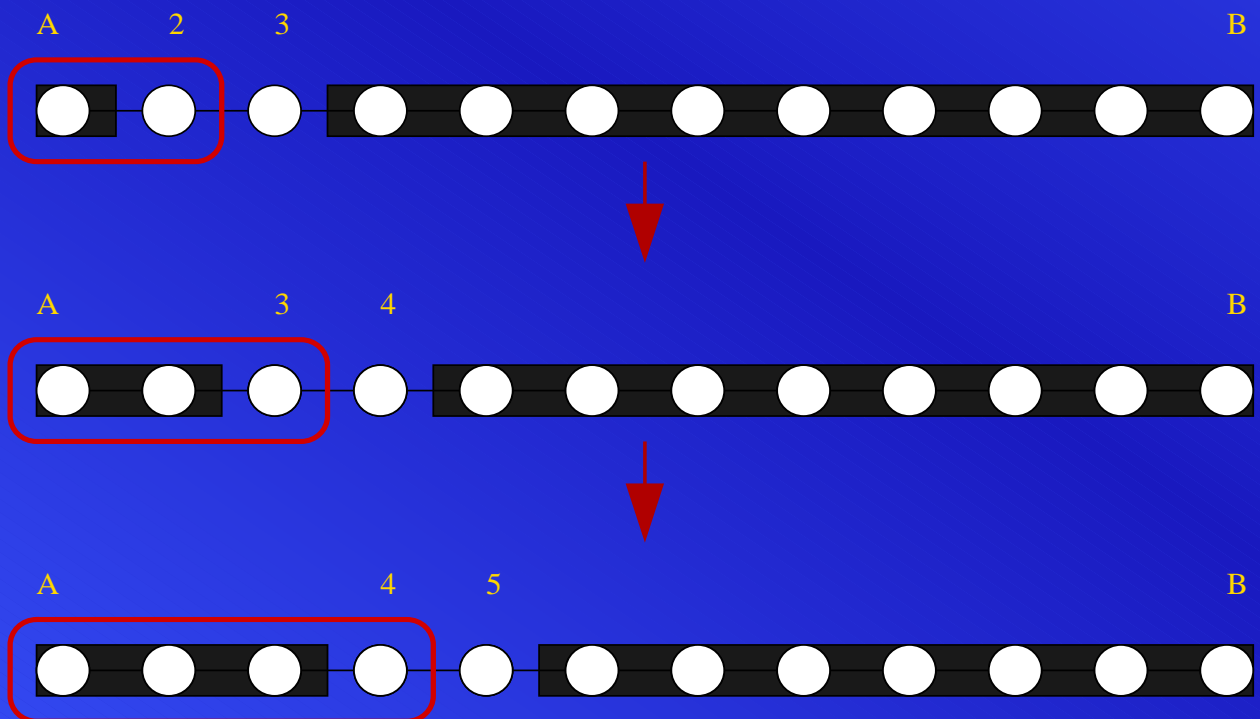
DMRG

DMRG-Schritt

1. Diagonalisiere \hat{H}_{gesamt}
2. Bilde reduzierte Dichtematrix

$$\rho_{ij} := \sum_k |i, k\rangle \langle k, j|$$

3. Diagonalisiere Dichtematrix
4. Baue größeres System in neuer Basis



NaV₂O₅ und ein Modell

- $T_c = 34\text{K}$

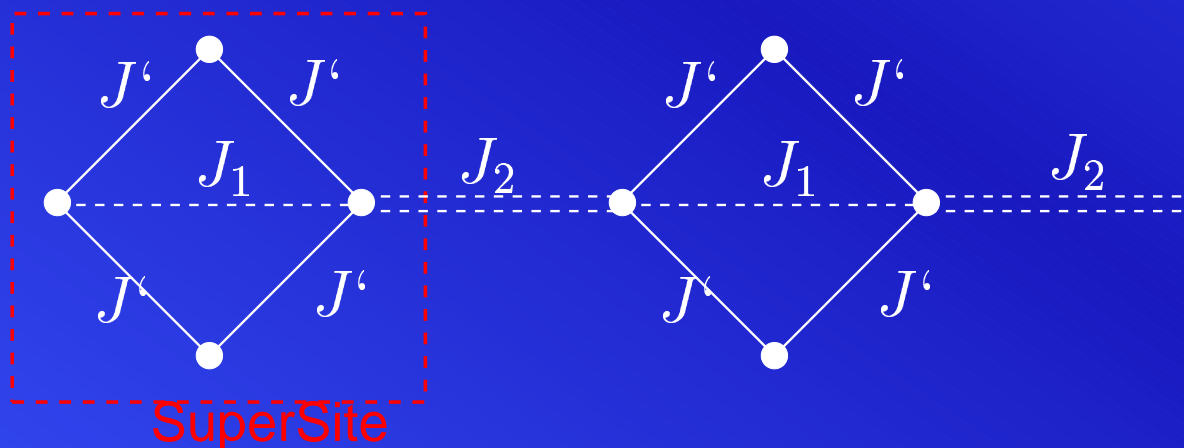
Verdopplung der Einheitszelle

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

placements • Spin-Cluster-Theorie vorgeschlagen ^a

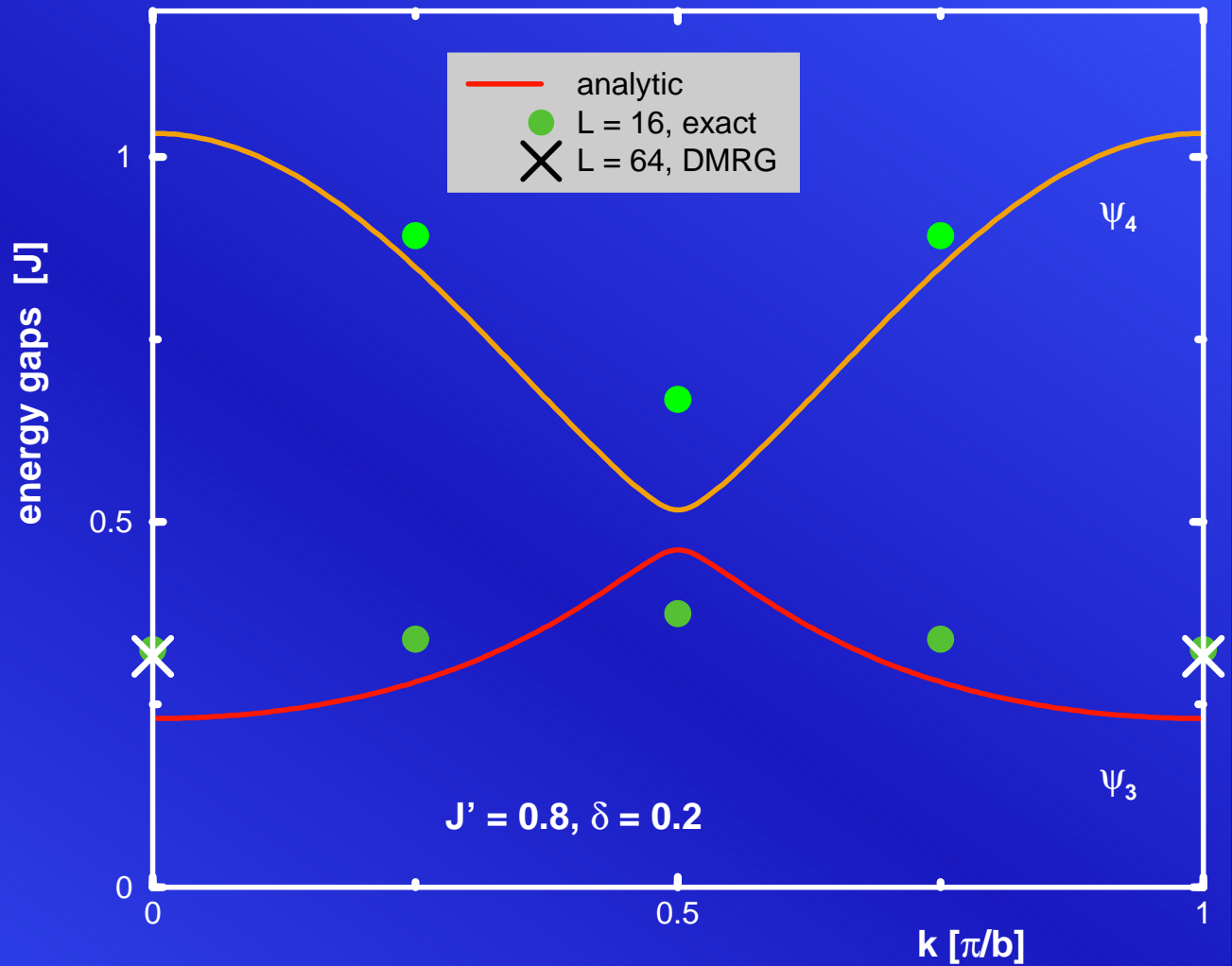


Dimerisierung: $J_1 = J(1 + \delta)$ $J_2 = J(1 - \delta)$

C. Gros, R. Valentí, J.V. Alvarez, K. Hamacher, and W. Wenzel. *Phys. Rev. B (Rapid Comm.)*, 62(22):R14617-R14620, 2000.

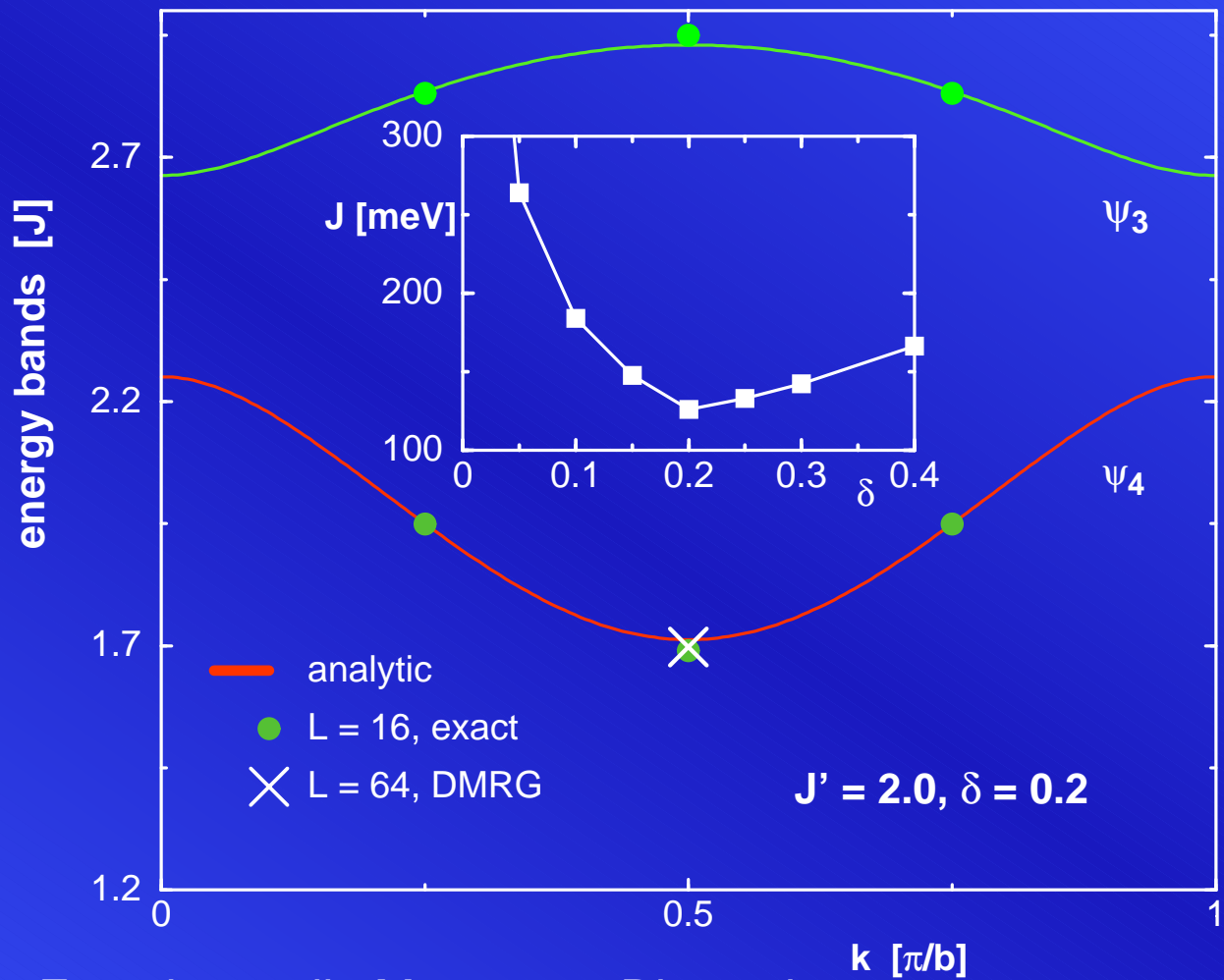
^aBoer, Meetsma, Baas, Palstra. *Phys.Rev.Lett.*, 84:3962, 2000.

Ergebnisse NaV_2O_5 I



Cluster-Operator-Theorie überschätzt die
Magnonen-Dispersion!

Ergebnisse NaV₂O₅ II



Experimentelle Magnonen-Dispersion:

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

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

Ungeordnete Spinketten in 1D

Hamiltonian mit Unordnung^a

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

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

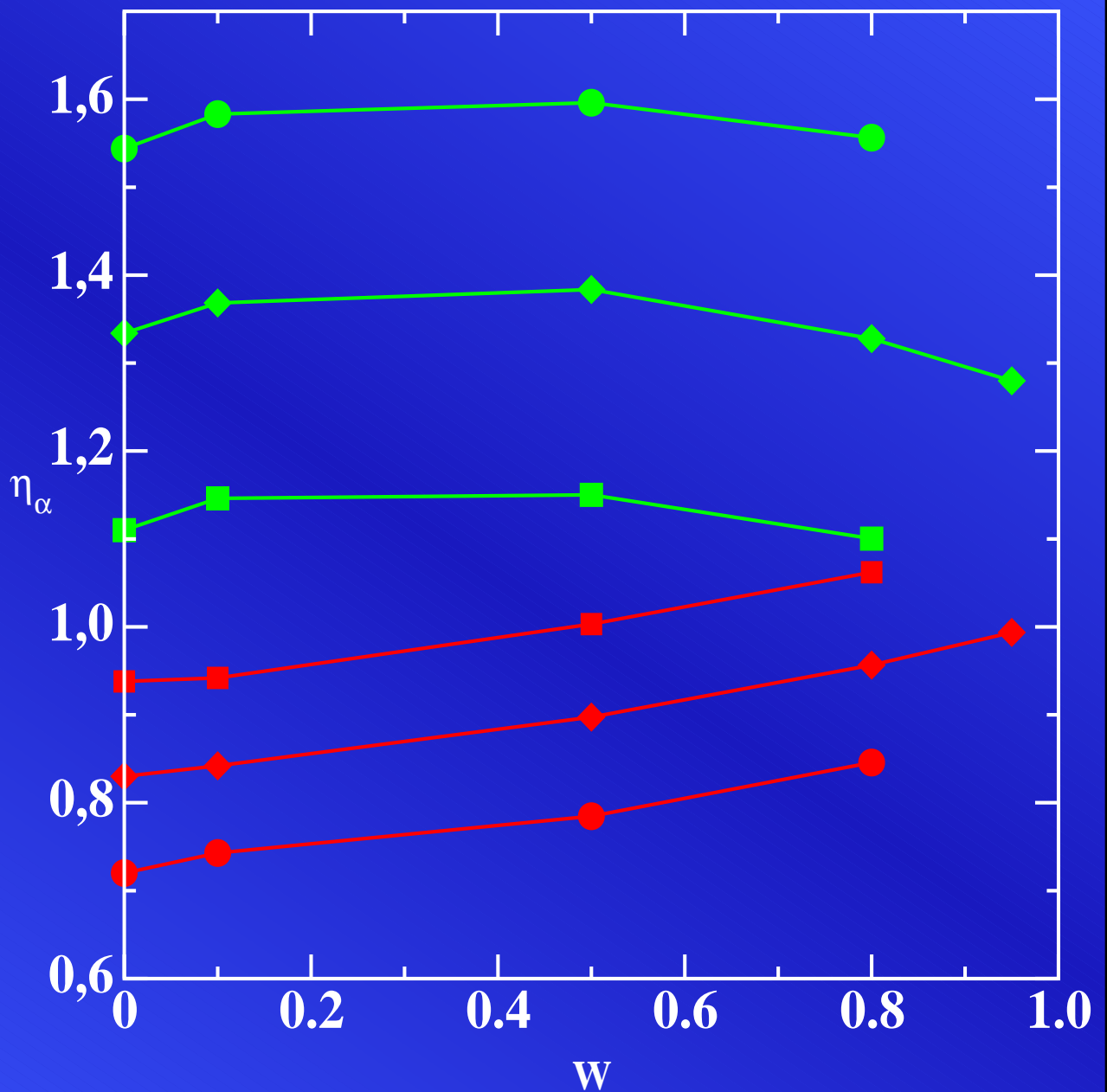
$$\text{RSRG}^b : \quad \left| \overline{\langle S_i^\alpha S_j^\alpha \rangle} \right| \sim |i - j|^{-2} \quad \alpha = x, y, z$$

Anisotropes Modell, isotroper Zerfall der Korrelationen

^aK. Hamacher, J. Stolze, W. Wenzel. *Disorder Induced Quantum Phase Transition in Random-Exchange Spin-1/2 Chains*. submitted to *Phys.Rev.Lett.*

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

Aufhebung der Universalität I



η_z und η_x

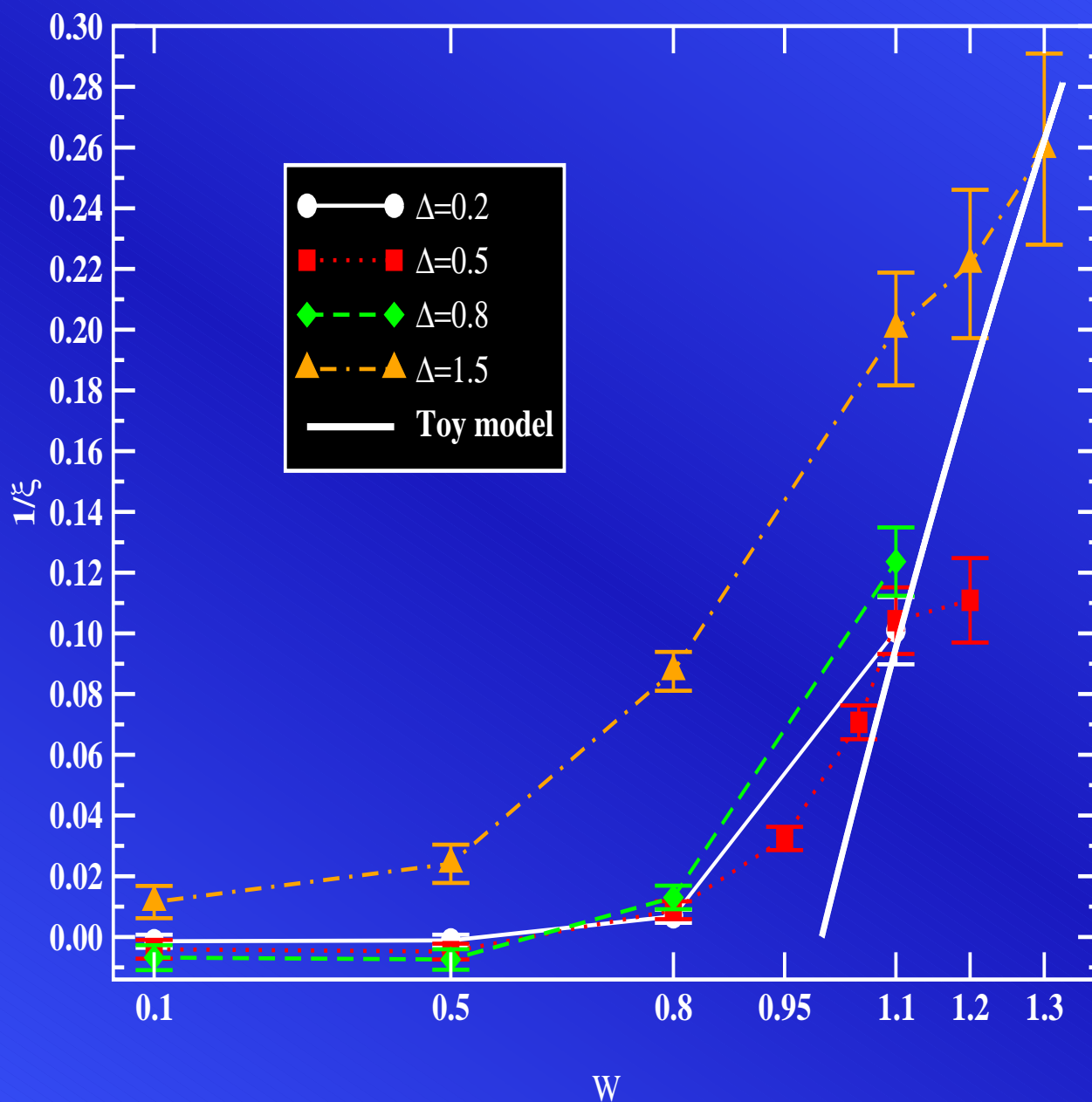
● : $\Delta = 0,2$

◆ : $\Delta = 0,5$

■ : $\Delta = 0,8$

Aufhebung der Universalität II

Quantenphasenübergang

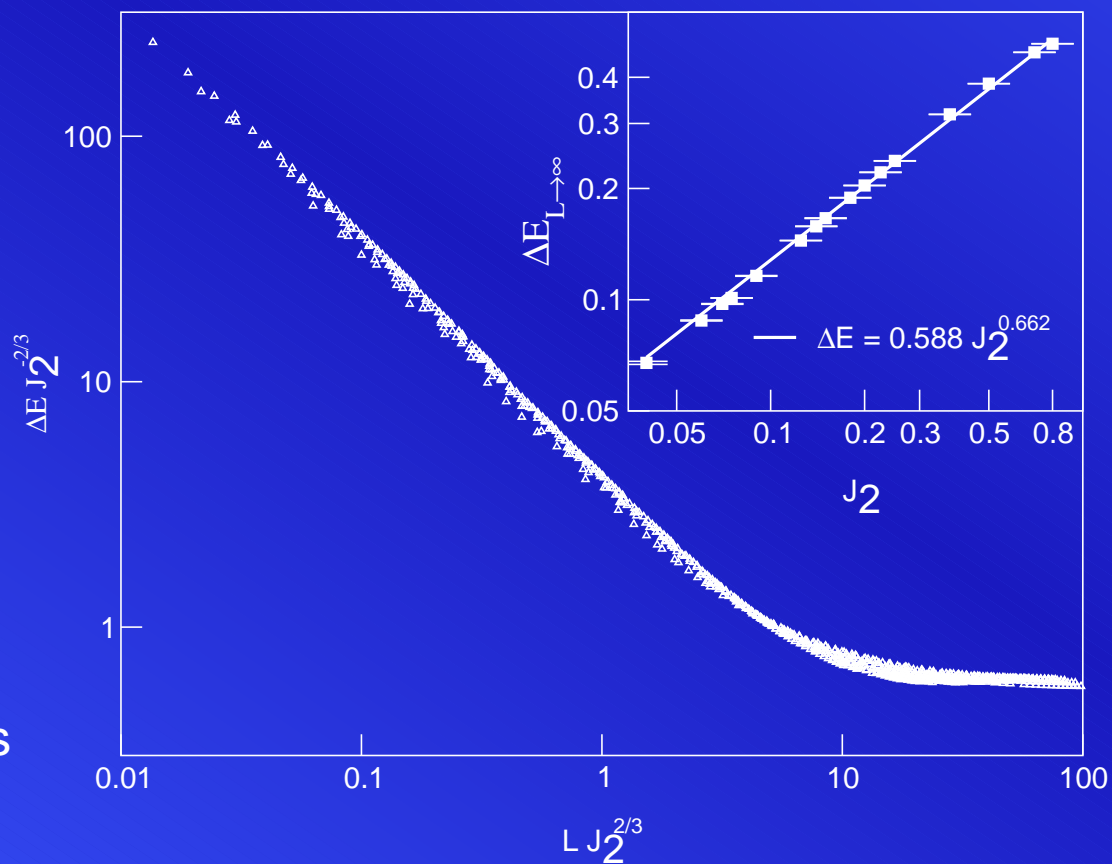


Toy model: $p(J) = p\delta(J+1) + [1-p]\delta(J-1)$

Spinsysteme in 2D

ΔE_{PBC}	ΔE_{OBC}	ΔE_{TMRG}
0,236522	0,238342	0,212

Skalenfunktion: Anregungslücke $\Delta \sim J_2^{2/3}$



J. Sirker, A. Klümper and K. Hamacher. Groundstate properties of two-dimensional dimerized Heisenberg models. submitted to Phys. Rev. B

Hubbardketten & Fermiflächen

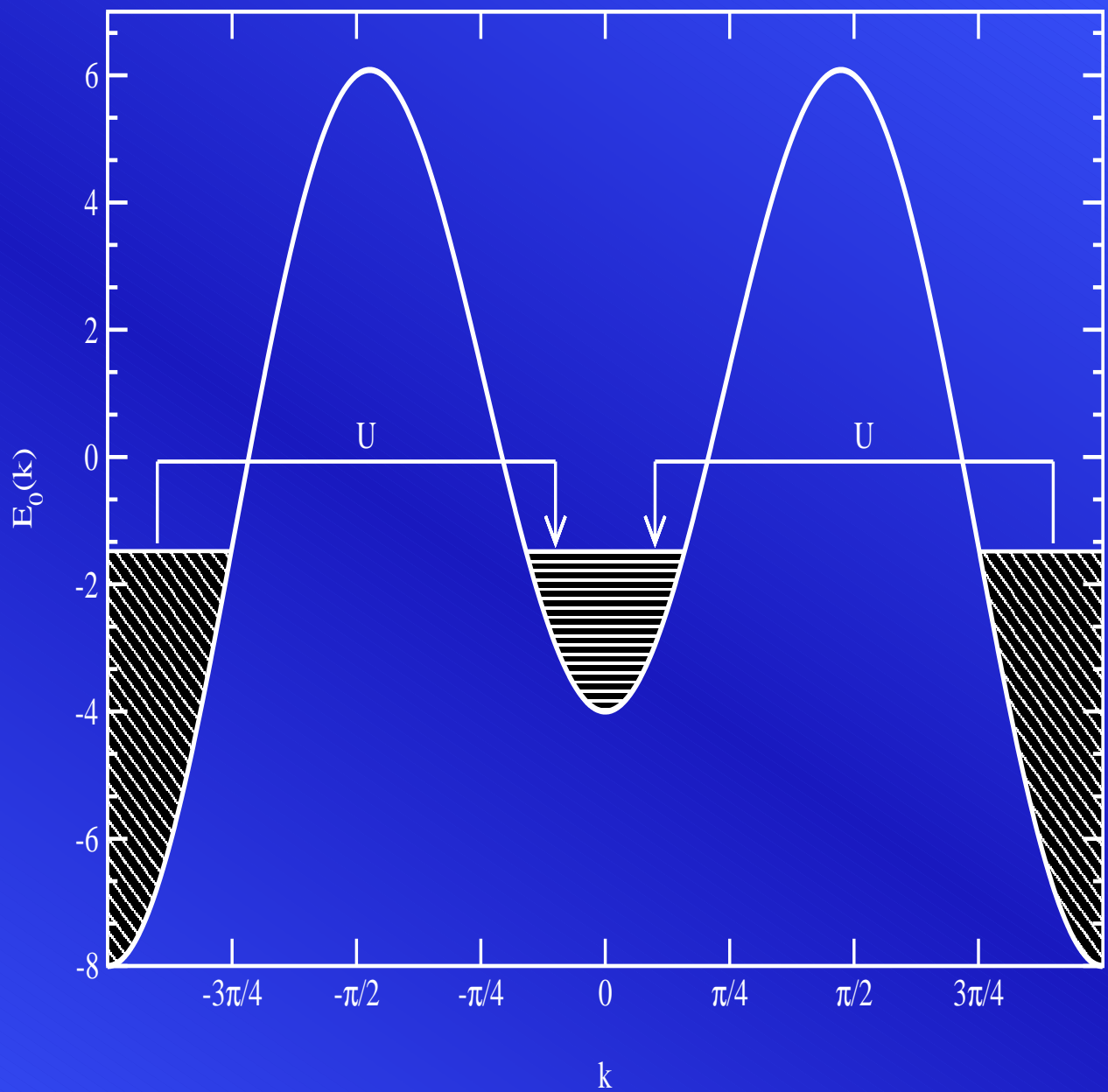
$$\begin{aligned} H = & -t_1 \sum_{i=1, \sigma=\uparrow, \downarrow}^L \left\{ c_{i\sigma}^\dagger c_{i+1\sigma} + \text{h.c.} \right\} \\ & -t_2 \sum_{i=1, \sigma=\uparrow, \downarrow}^L \left\{ c_{i\sigma}^\dagger c_{i+2\sigma} + \text{h.c.} \right\} \\ & +U \sum_{i=1}^L n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \end{aligned}$$

Dispersionsrelation für $U = 0$

$$E_0(k) = -2t_1 \cos(k) - 2t_2 \cos(2 \cdot k)$$

K. Hamacher, C. Gros and W. Wenzel “*Destruction of Fermi-surface pockets in interacting electron systems*”. to be submitted to Phys. Rev. Lett.

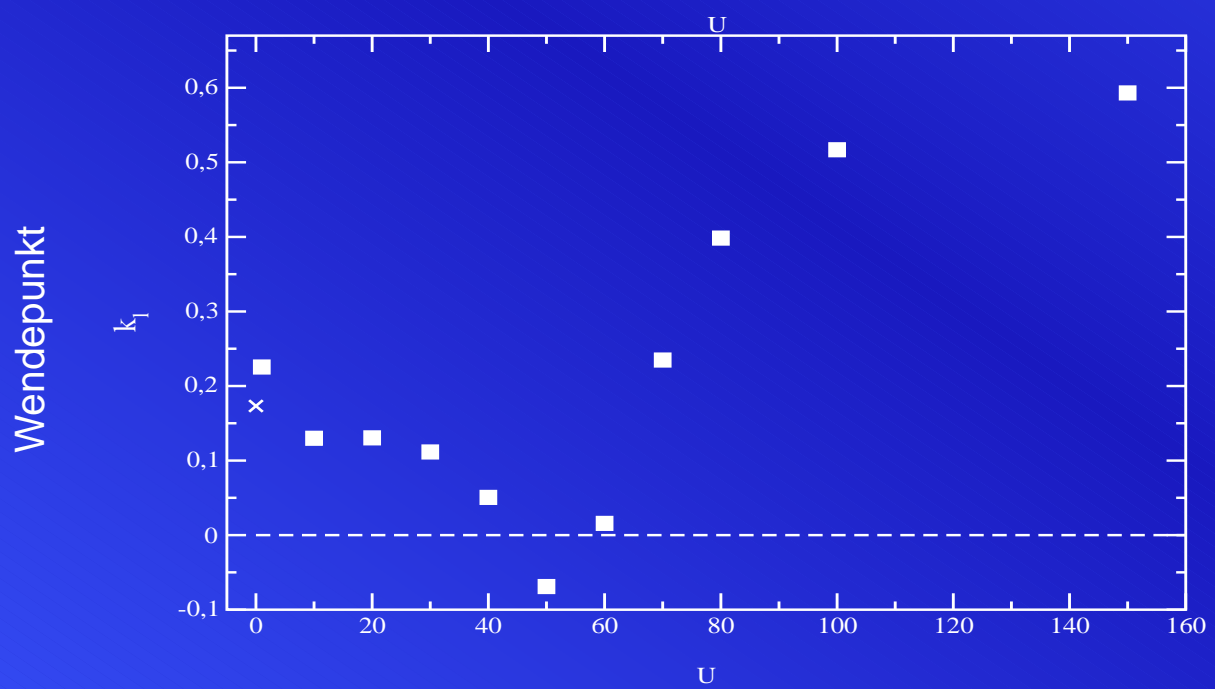
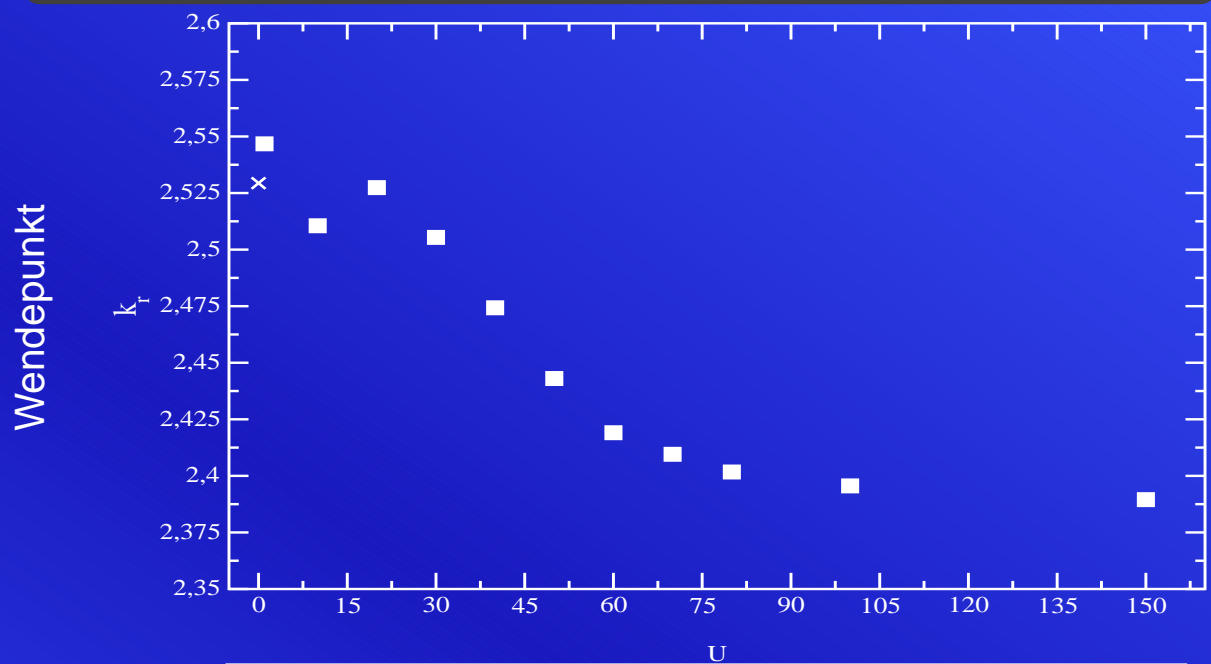
Verschiebung der Fermipunkte I



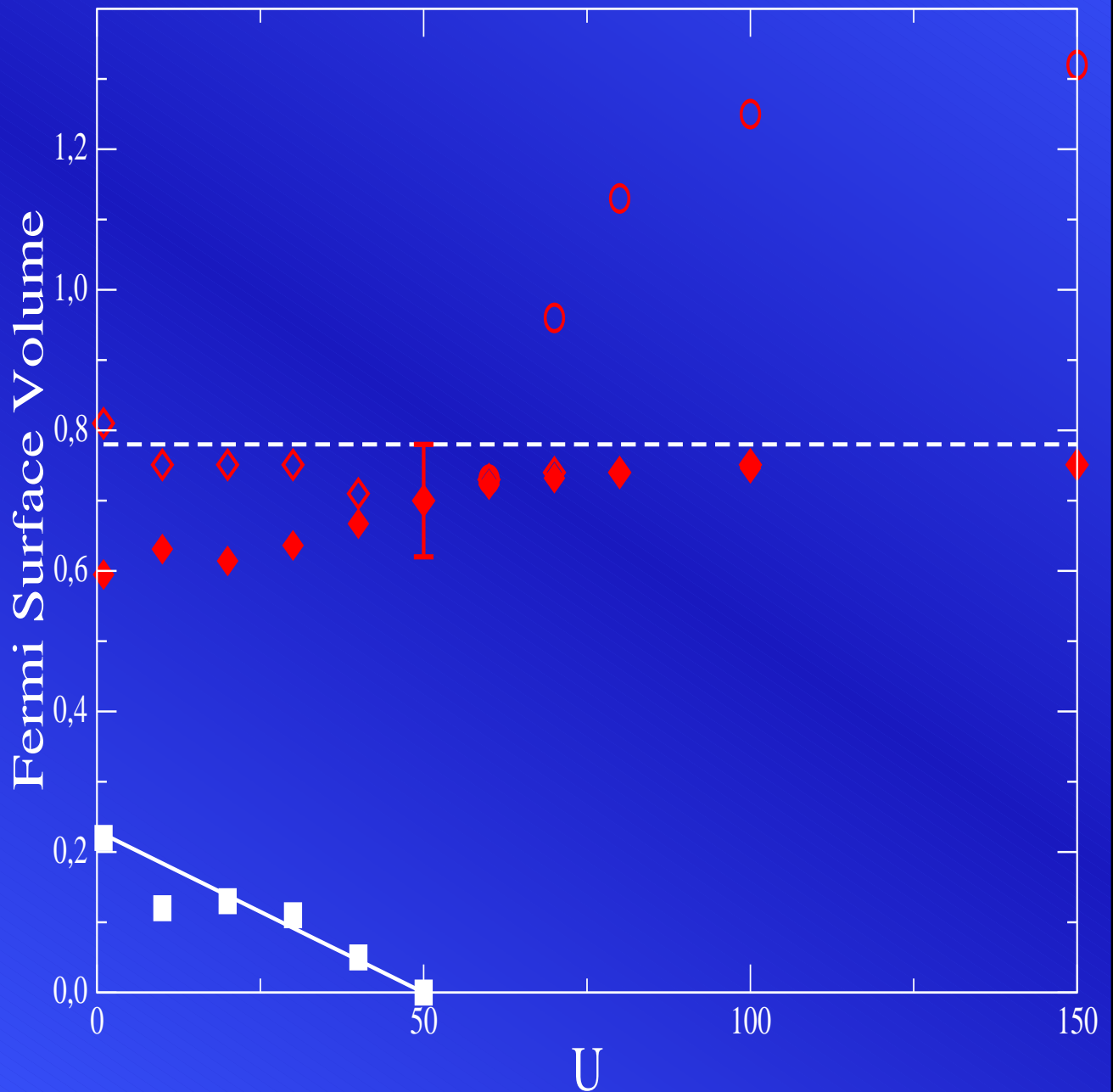
Renormierungsgruppe

$$\Delta k \sim U^2$$

Verschiebung der Fermipunkte II



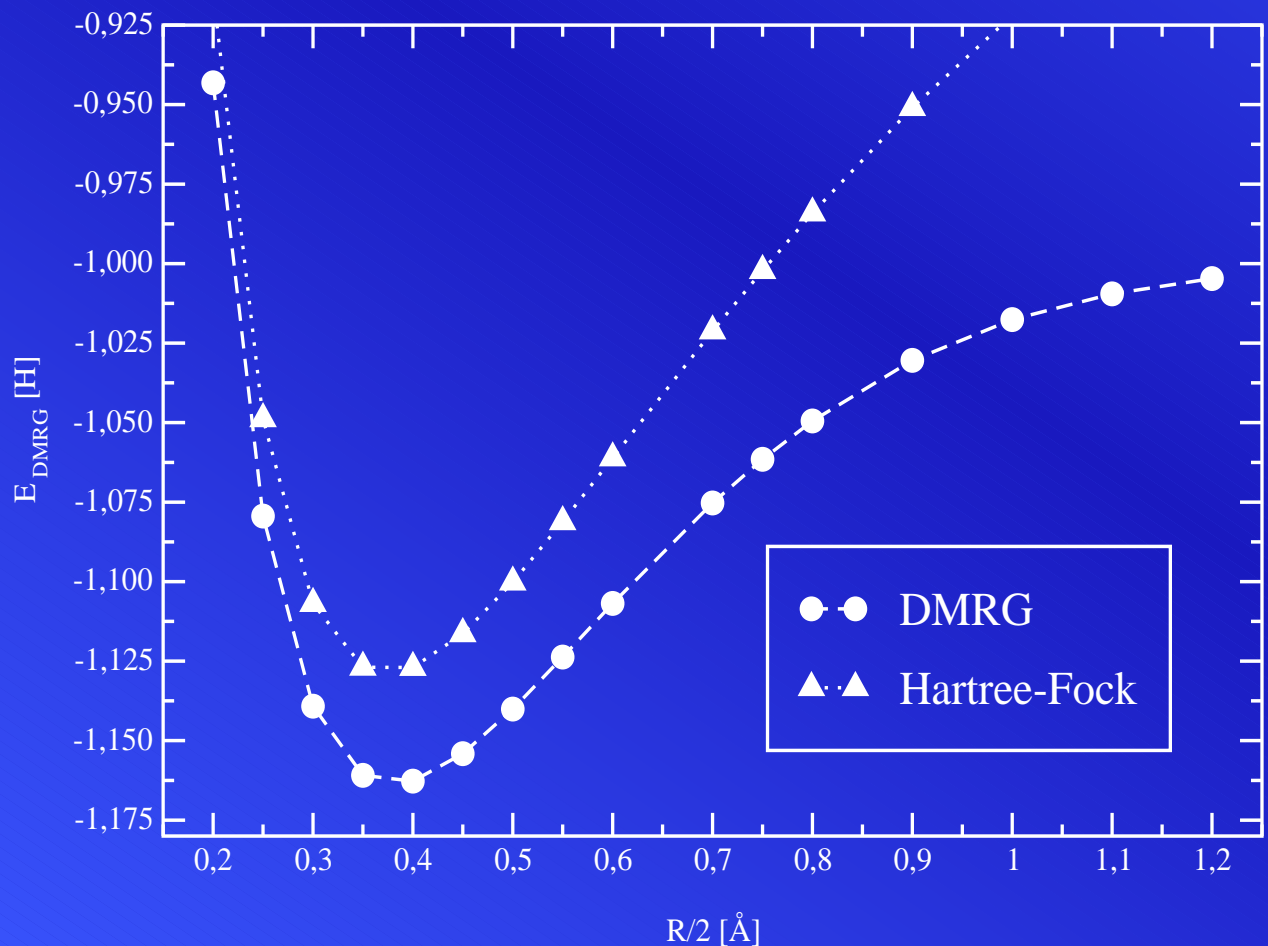
Verschiebung der Fermipunkte III



Quantenchemie

$$\begin{aligned}
 H = & - \sum_{\substack{ij \\ \sigma}} \underbrace{\langle i|h|j \rangle}_{\hat{T}+e^{-}-K} c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} \\
 & + \frac{1}{2} \sum_{\substack{ijkl \\ \sigma\sigma'}} \underbrace{\langle ij|V|kl \rangle}_{e^{-}-e^{-}} c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma'}^{\dagger} c_{l\sigma'} c_{k\sigma}
 \end{aligned}$$

H₂-Molekül als erste Anwendung. $\Delta_{\text{FCI-DMRG}} = 10^{-7}$ H.



Approximation bei H₂

$$\sum_{\substack{ijkl \\ \sigma\sigma'}} \langle ij | V | kl \rangle c_{i\sigma}^+ c_{j\sigma'}^+ c_{l\sigma'} c_{k\sigma}$$

- Komplementäre Operatoren im Zweiteilchenterm
 → Speicher $\sim N^2$

- Reduktion des Speichers und des

Transformationsaufwands durch Approximation

i.allg. $\langle i | \hat{O}_\alpha \hat{O}_\beta | j \rangle \neq \sum_k \langle i | \hat{O}_\alpha | k \rangle \langle k | \hat{O}_\beta | j \rangle$

aber hier $\sum_k |k\rangle \langle k| \approx \mathbf{1}$ wegen Molekülorbitalen

m	g	Anteil
10	10^{-5}	50,569%
20	10^{-5}	51,485%
20	10^{-10}	50,880%

Ausblick

- Weitere Berechnungen zu Hubbard-Ketten
- Große Orbitalzahlen: Approximation der $\mathbb{1}$ in der Quantenchemie zur Reduktion der Operatorenzahl
- Weitere Moleküle mit der Quantenchemie-DMRG

Danksagung

- Priv.Doiz. Dr. Wenzel (FZ Karlsruhe)
- Prof.Dr. Keiter (U Dortmund)
- Prof.Dr. Stolze (U Dortmund)
- Prof.Dr. Gros (U Saarbrücken)
- Prof.Dr. Klümper, Dipl.Phys. Sirker (U Dortmund)
- Prof.Dr. Weber (U Dortmund)
- Verband der chemischen Industrie, BMBF
- Studienstiftung des dt. Volkes