



# Berechnung von Korrelationseffekten mit Hilfe der DMRG

**Kay Hamacher**

**Theoretische Physik I  
Universität Dortmund**

**&**

**Institut für Nanotechnologie  
Forschungszentrum Karlsruhe**

**Universität Marburg, den 23.04.2001**

# Inhalt

1. Vorwort / Technik der DMRG
2. Realisierung in C++
3.  $\text{NaV}_2\text{O}_5$  und ein Spincluster-Modell
4. Spinketten in 1D
5. Spinsysteme in 2D
6. Hubbardketten
7. Ausblick

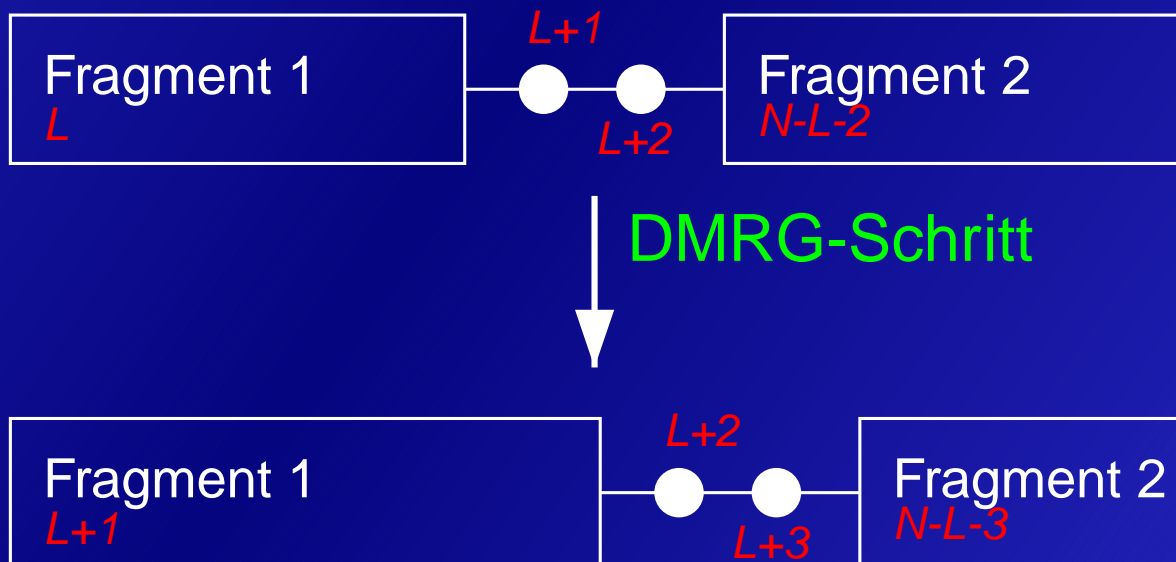
# DMRG-Technik

## Iteratives Verfahren

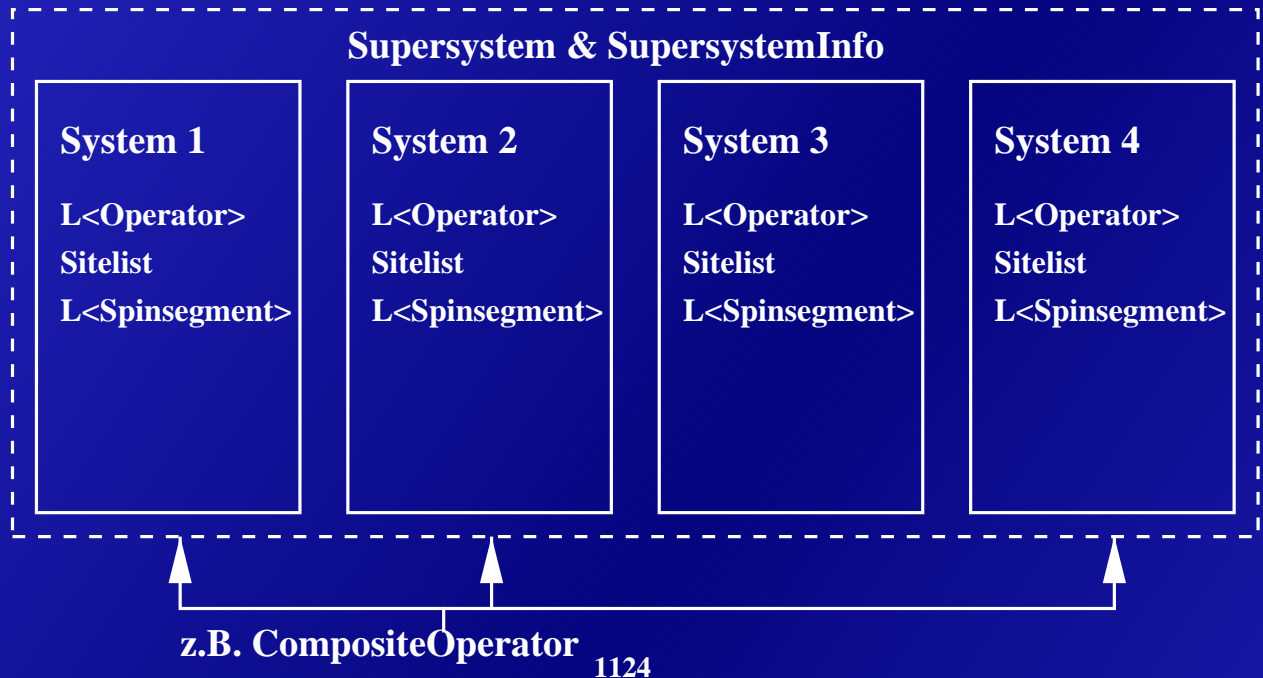
1. Diagonalisieren von  $H_{\text{Fragment 1}} + H_{\text{Site 1}}$   
 $+ H_{\text{Site 2}} + H_{\text{Fragment 2}} + H_{\text{Bindungen}}$

2. Diagonalisierung der reduzierten Dichtematrix

3. Anfügen einer Site / Operator-Transformation



# Implementierung in C++



SegmentConfig:  $(s_1, s_2, \dots, s_N)$

IndexConfig:  $(i_1, i_2, \dots, i_N)$

$\Rightarrow$  Konfiguration  $([s_1, i_1], \dots, [s_N, i_N])$

- Bindungstemplate
- Datenbank für Operatoren
- Parallelisierung
- Speichermodelle

# Jeder hat sein Päckchen zu tragen. . .

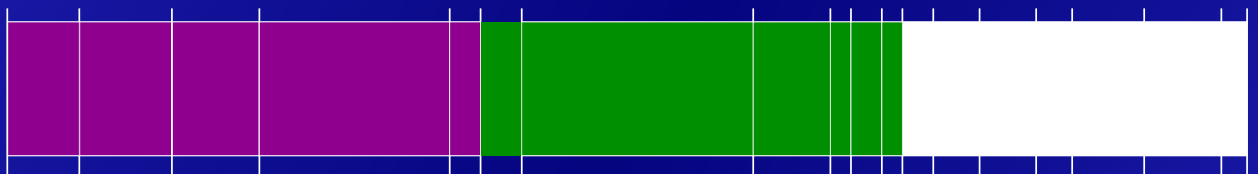
Annahme:

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”	$1.2424 \pm 0.0027$
C1	$1.1543 \pm 0.0018$
C2	$1.1556 \pm 0.0018$
C3	$1.1110 \pm 0.0012$
C4	$1.1662 \pm 0.0019$

---

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

## NaV<sub>2</sub>O<sub>5</sub> und ein Modell

- mag. Suszeptibilität 1D-Heisenberg-Modell  $\longrightarrow V^{4,5+}$
- $T_c = 34\text{K}$   
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<sup>g</sup>
- Spin-Cluster-Theorie kein Szenario<sup>a b</sup>
- Zig-Zag-Ladungsordnung ( $T < T_c$ )<sup>c d e f</sup> und Dimer-Phase ( $T > T_c$ )<sup>ge</sup>

---

<sup>a</sup>Gros, Valenti, Hamacher et al. **Phys.Rev.B(Rapid Comm.)** 62 (2000) R14617

<sup>b</sup>Boer, Meetsma, Baas, Palstra **Phys.Rev.Lett.** 84 (2000) 3962

<sup>c</sup>Gros and Valenti **Phys.Rev.Lett.** 82(1999)976

<sup>d</sup>Yosihama, Nakajima, Kakurai et al. **J.Phys.Chem.Sol.** 60(1999)1099

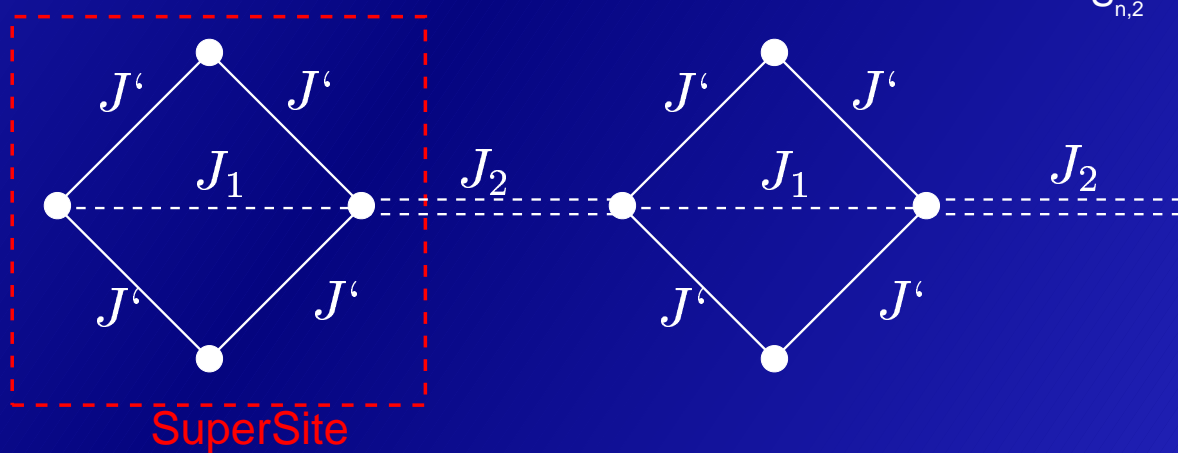
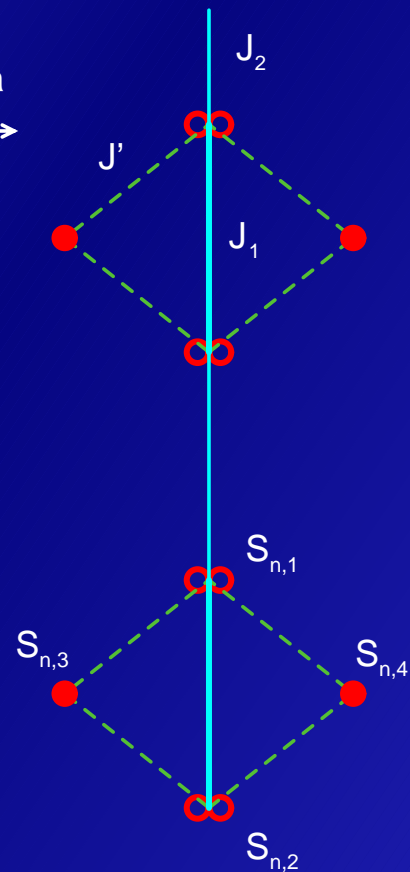
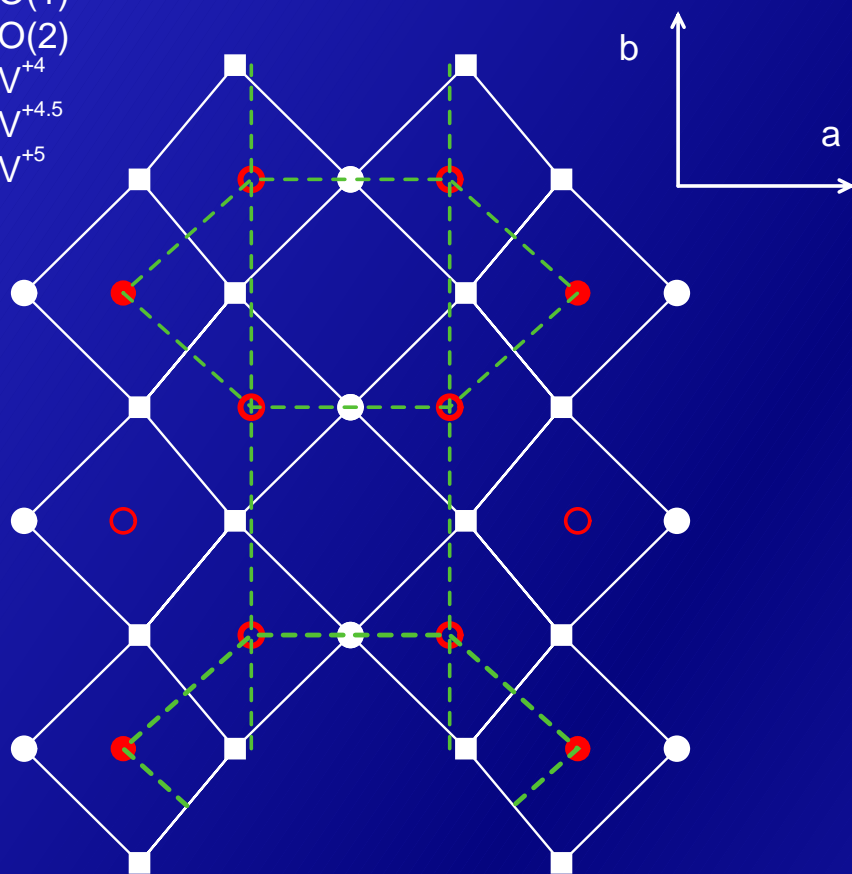
<sup>e</sup>Seo and Fukuyama **J.Phys.Soc.Jp.** 67(1998)2602

<sup>f</sup>Ohama, Goto, Shimizu et al. **J.Phys.Soc.Jp.** 69(2000)2751

<sup>g</sup>Smolinski, Weber, Gros et al. **Phys.Rev.Lett.** 80(1998)5164



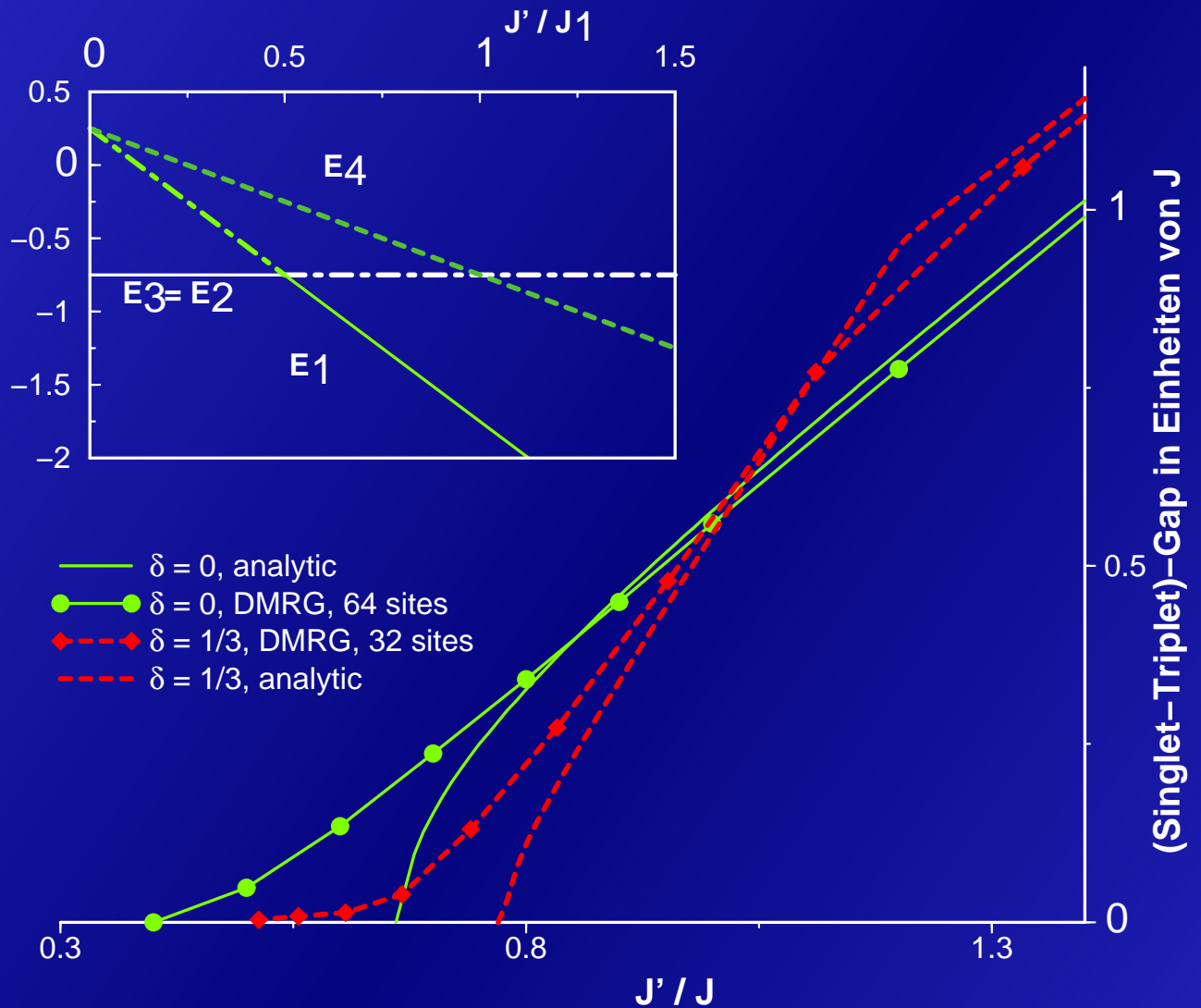
- O(1)
- O(2)
- $V^{+4}$
- $V^{+4.5}$
- $V^{+5}$



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



# Ergebnisse NaV<sub>2</sub>O<sub>5</sub> I

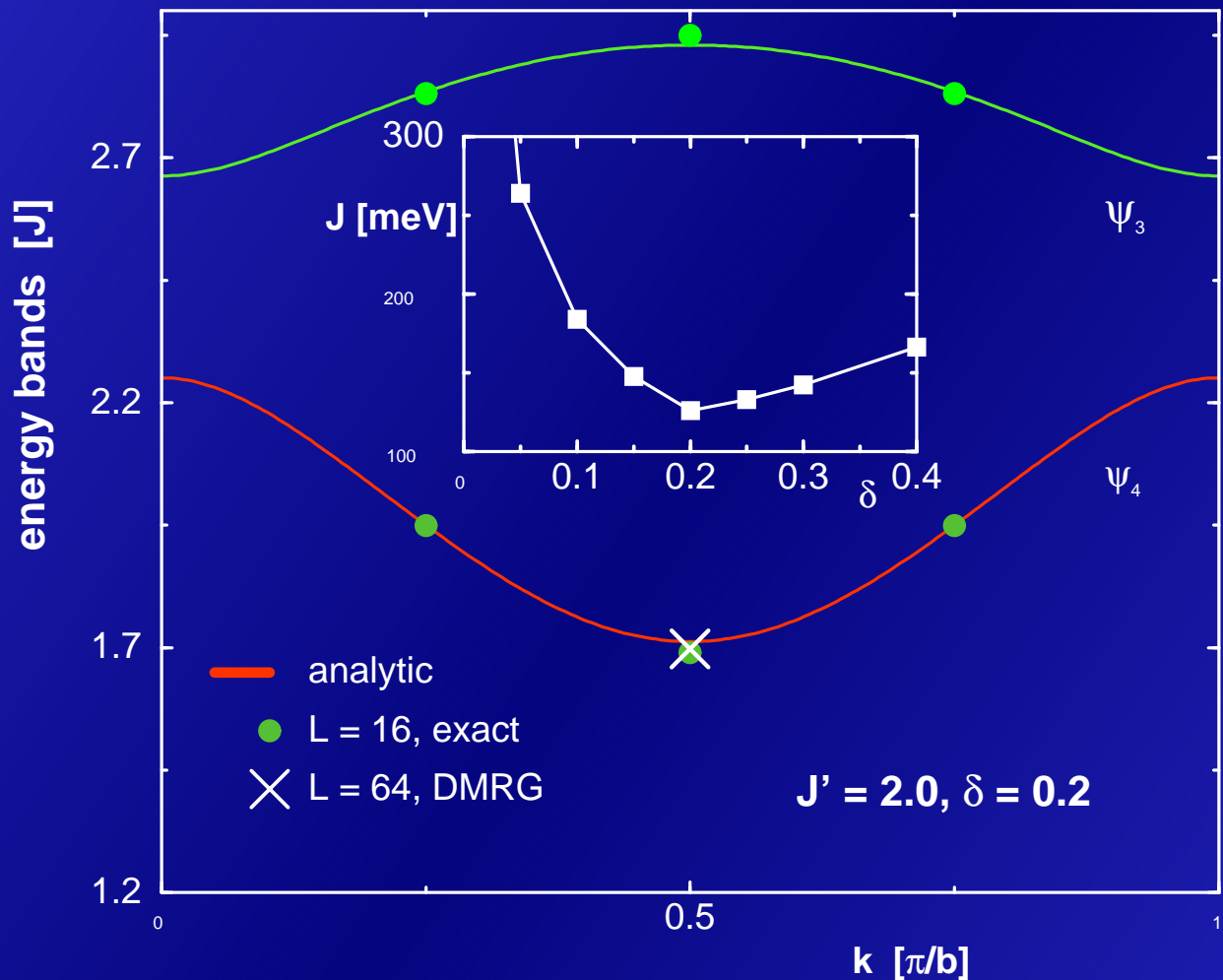


## Isoliertes Cluster:

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

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

## Ergebnisse NaV<sub>2</sub>O<sub>5</sub> II

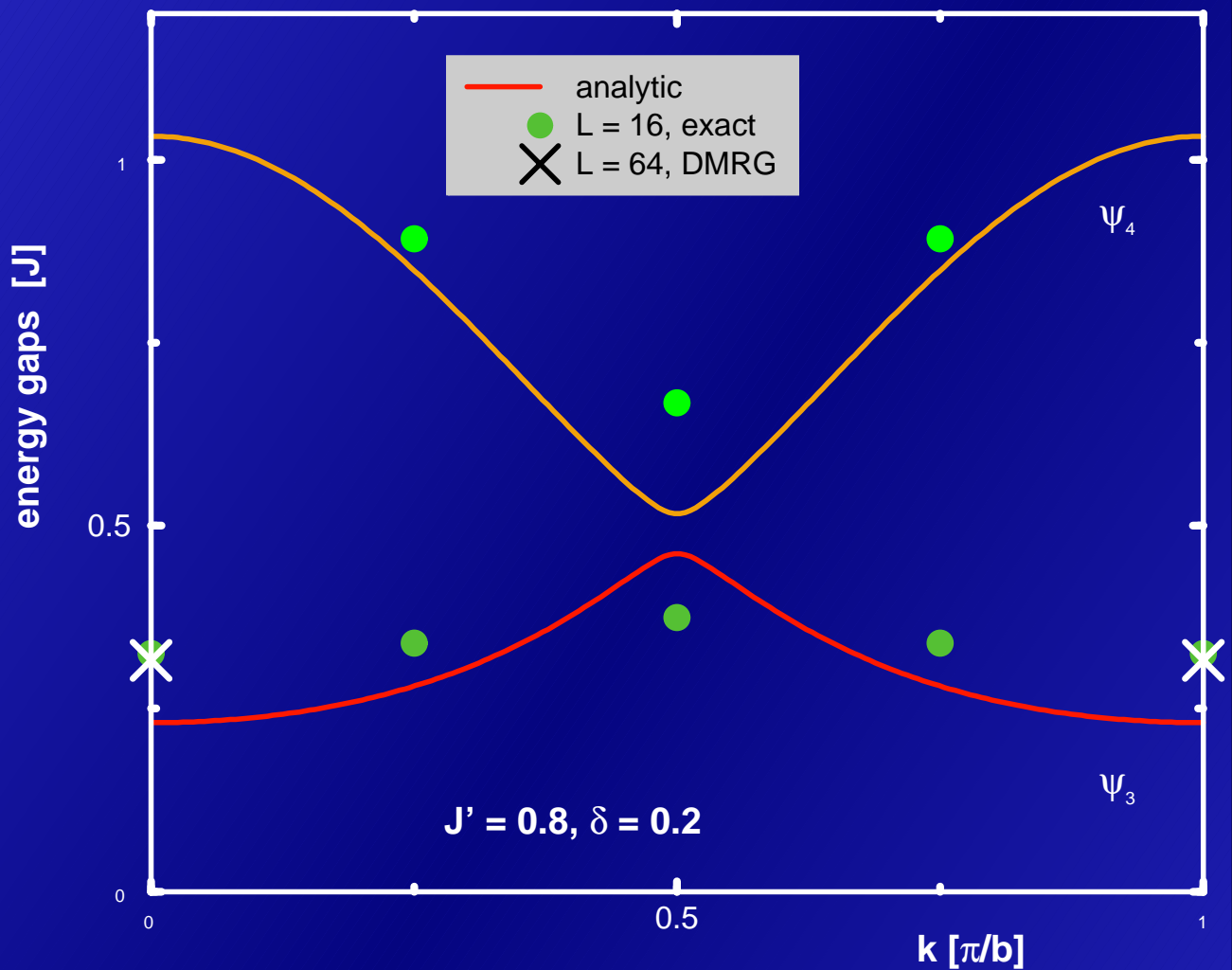


Experimentelle Magnonen-Dispersion:

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

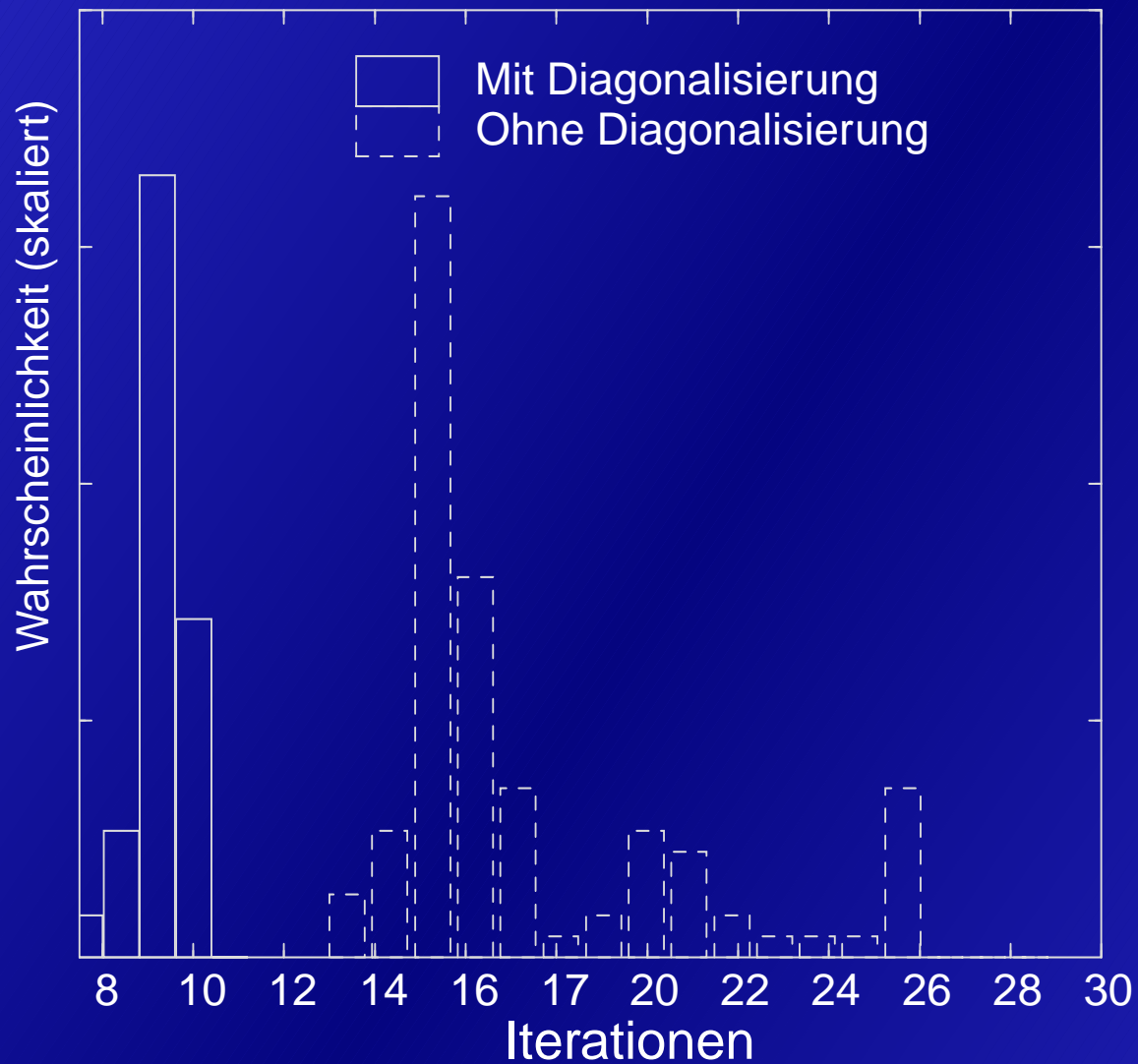
Minimum bei  $k = 0, \frac{\pi}{b}$

## Ergebnisse $\text{NaV}_2\text{O}_5$ III



Cluster-Operator-Theorie überschätzt die  
Magnonen-Dispersion!

## Lokale Diagonalisierung I

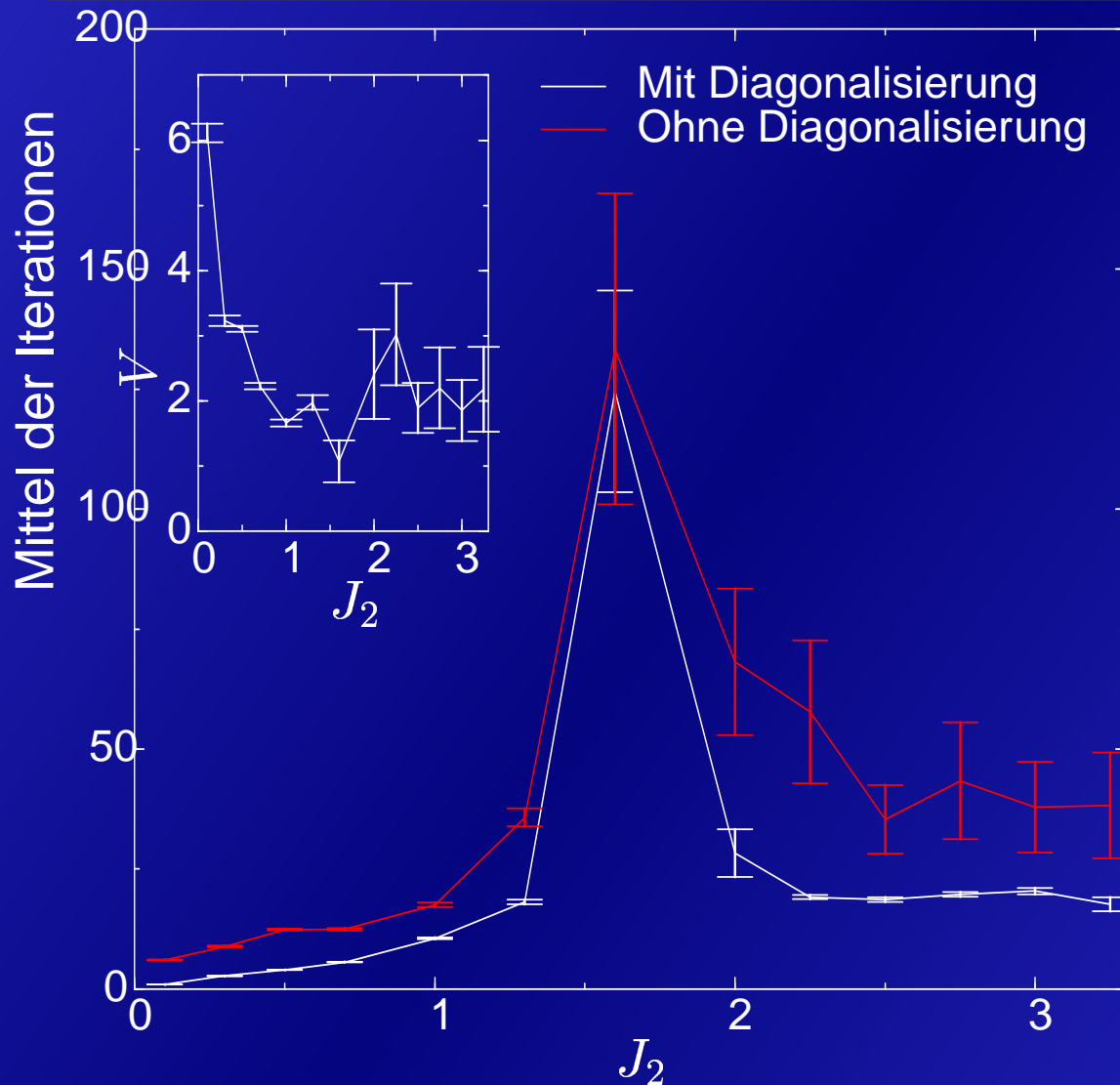


$$\bar{n}_{\text{mit}} = 10,973 \pm 0,103$$

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

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

# Ungeordnete Spinketten in 1D

## Hamiltonian mit Unordnung

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

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<sup>b</sup>

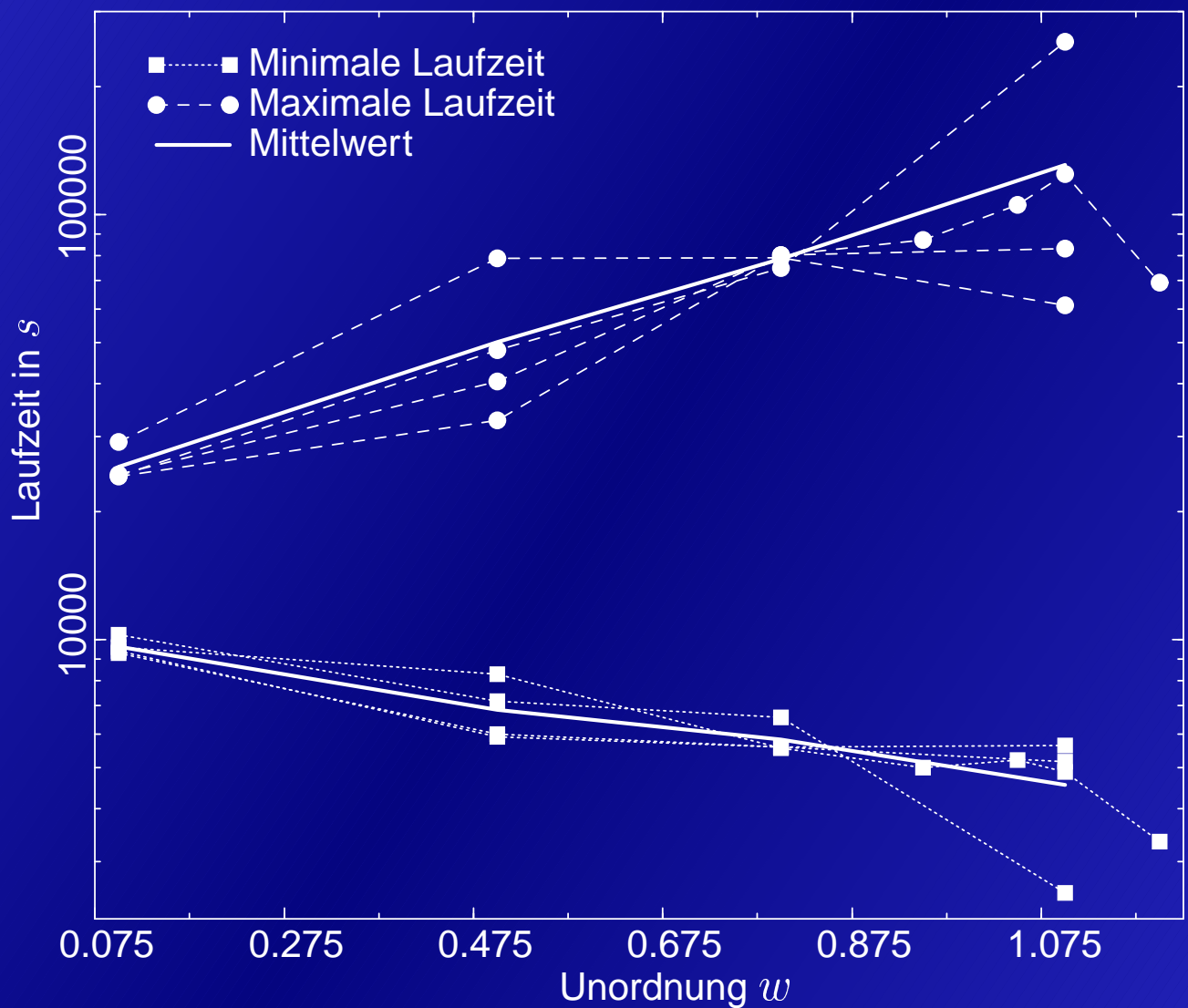
---

<sup>a</sup>Fisher **Phys.Rev.B** 50 (1994) 3799

<sup>b</sup>Röder, Stolze, Silver, Müller **J.Appl.Phys.** 79 (1996) 4632



## Laufzeiten der Spinketten



Insgesamt 13764 Replika gerechnet,

2593 CPU-Tage  $\sim$  7 CPU-Jahre,

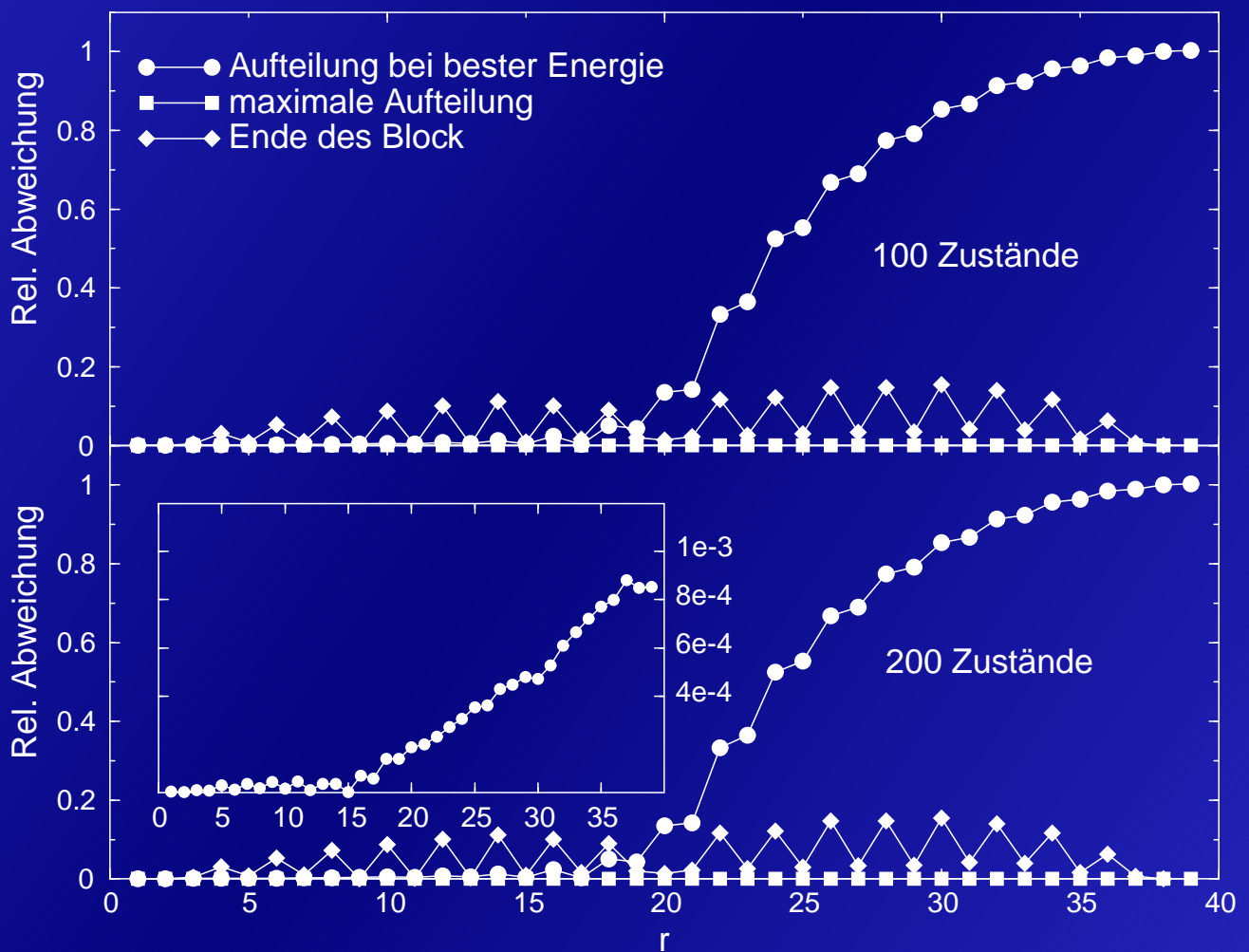
$4\frac{1}{2}$  Stunden pro Replika



# Berechnungsstrategien

Abweichung<sup>a</sup> der Erwartungswerte

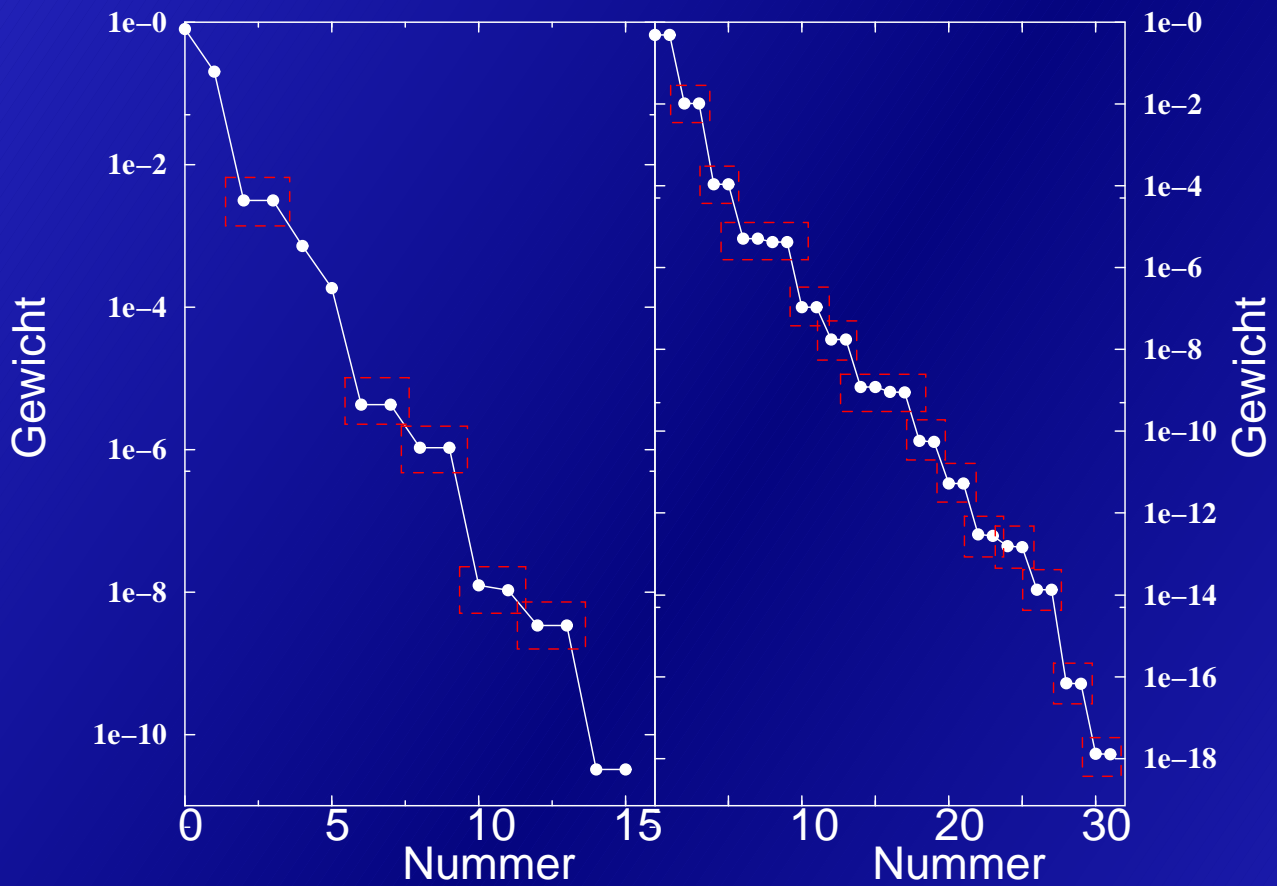
$$\langle S_o^+ S_r^- \rangle$$



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

<sup>a</sup>Vergleichswerte von J. Stolze

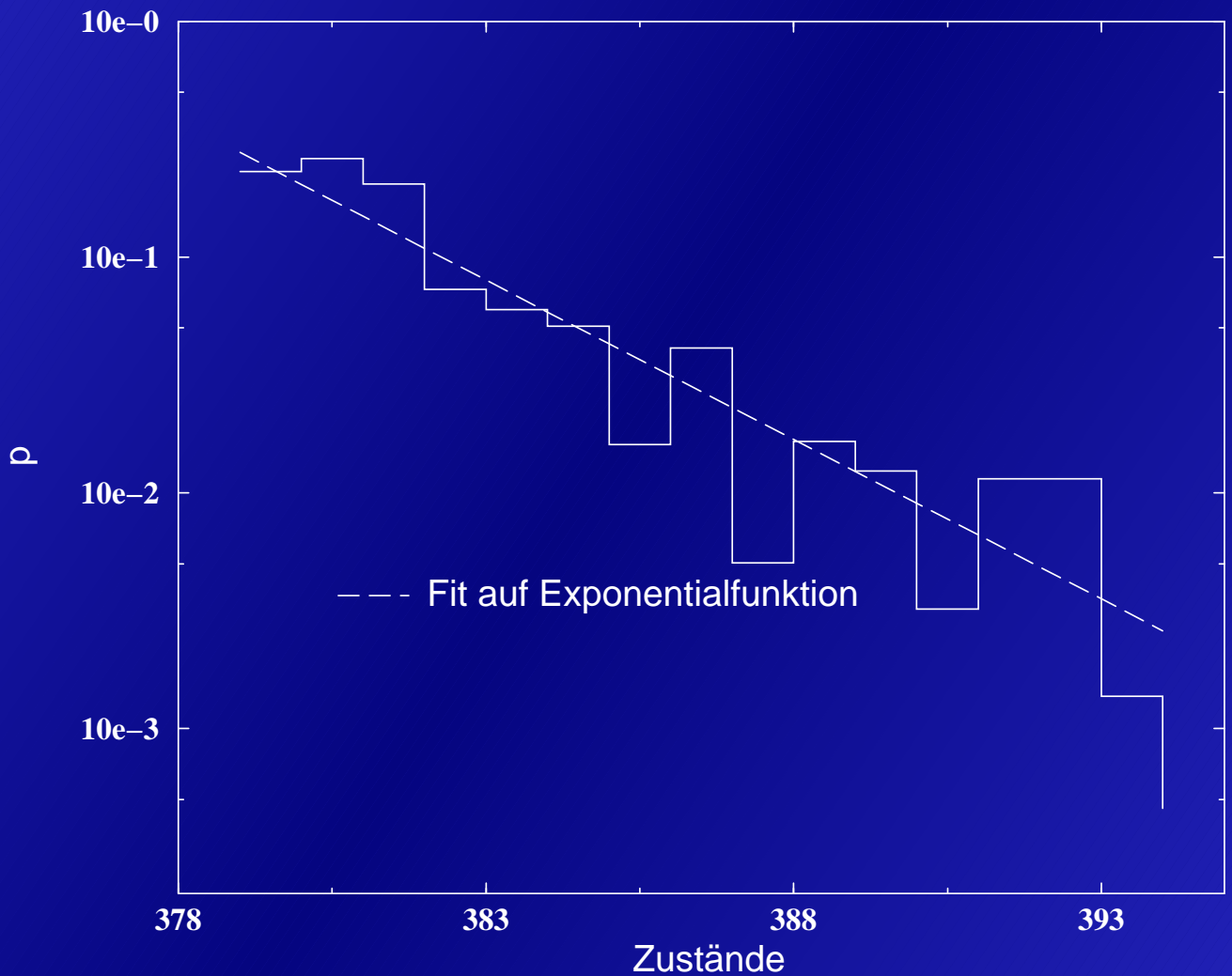
# Entartungen der Dichtematrix



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

# “Kampf” den Entartungen

Automatisches Zufügen von Zuständen:



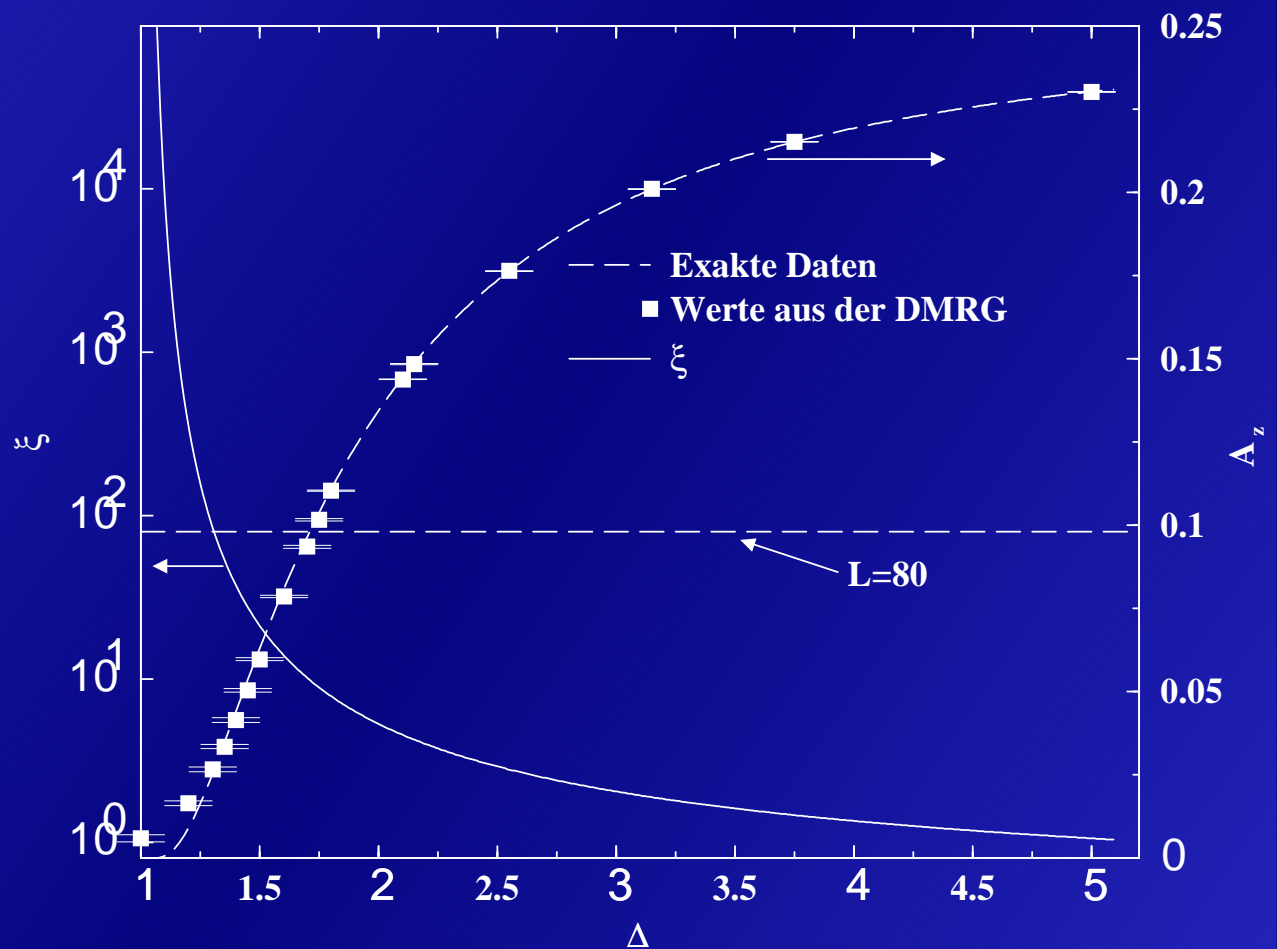
Hubbard-Kette,  $L = 64$ , 380 Zustände,  $U = 3$ ,  
 $t_2 = -0.8$ ,  $N_1 = 33$ ,  $N_1 = 31$   
(Rechenzeit 107 Stunden)

## Vergleich mit exakten Resultaten I

In **homogenen  $XXZ$ -Ketten** mit periodischen

Randbedingungen kennt man exakte Resultate<sup>a</sup> für  $\Delta > 1$ :

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



<sup>a</sup>R.J. Baxter **J.Stat.Phys.** 9 (1973) 145

## Vergleich mit exakten Resultaten II

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

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

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

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

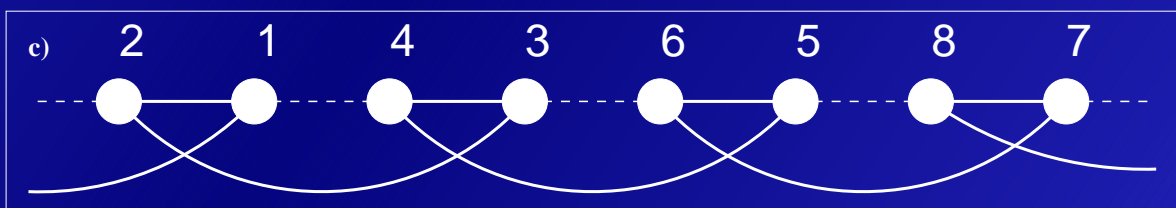
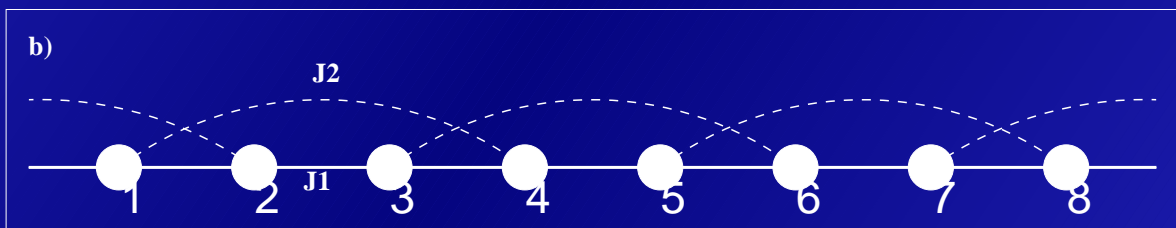
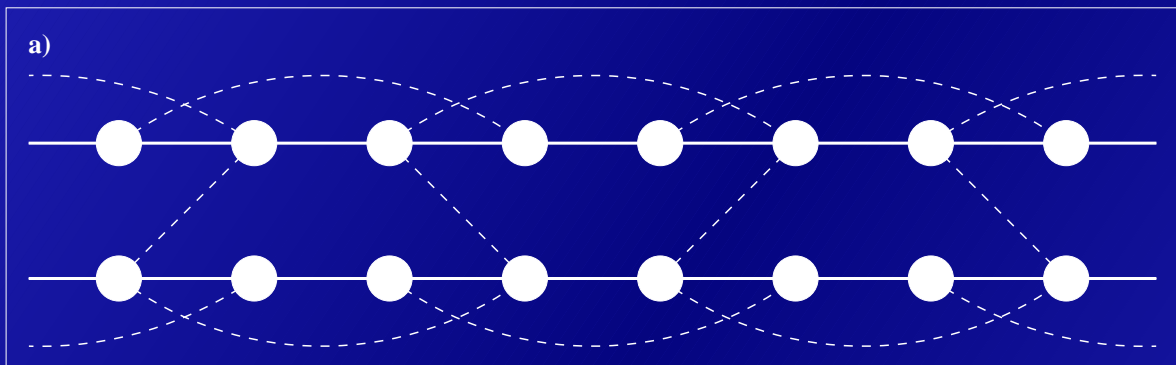
$$\eta_x = 1 - \frac{1}{\pi} \arccos(\Delta)$$

$\Delta$	$\nu_{x,20}$	$\nu_{x,40}$	$\nu_{x,60}$	$\nu_{x,80}$	$\nu_{x,100}$	$\nu_{\text{exakt}}$
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

<sup>a</sup>Luther 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<sup>a</sup>.



<sup>a</sup>Jesko Sirker, Diplomarbeit, Universität zu Köln, 2000



## Spinsysteme in 2D

—

### Vergleich mit der TMRG

Es wurden mit der DMRG Ketten der Längen 10 – 98 [PBC] und 10 – 122 [OBC] für  $J_1 = 1$ ,  $J_2 = 0,25$  gerechnet. Aus einem Fit von

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

ergab sich der asymptotische Wert

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

$$\Delta_{\text{OBC}} = 0,238342 \pm 0,00027$$

Ein Fit von TMRG-Resultaten für  $T \rightarrow 0$  ergab<sup>a</sup>

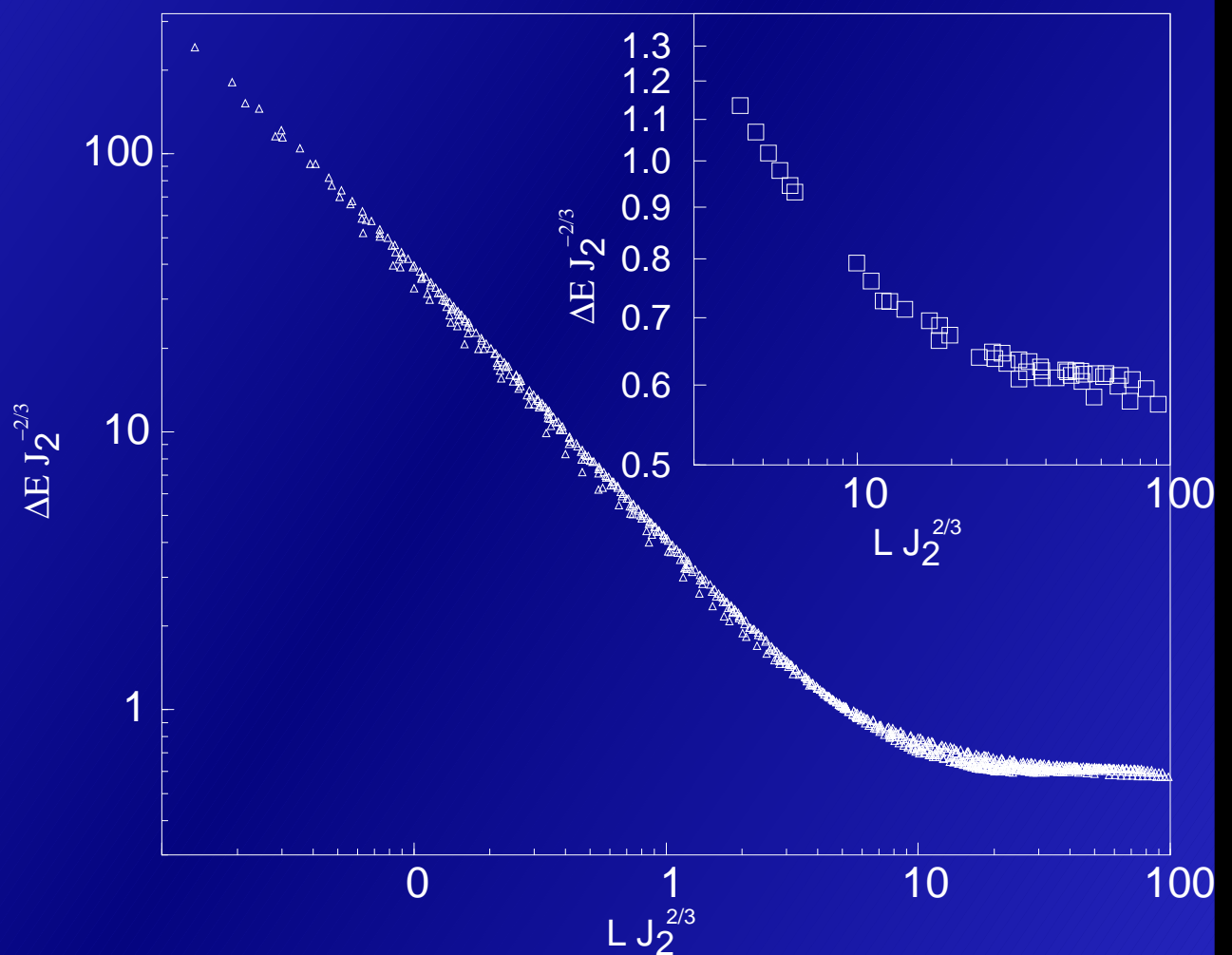
$$\Delta_{\text{TMRG}} = 0,212 \pm 0,002$$



# Spinsysteme in 2D – Skalenfunktion

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

862 verschiedene  $L$  und  $J_2$ -Kombinationen:

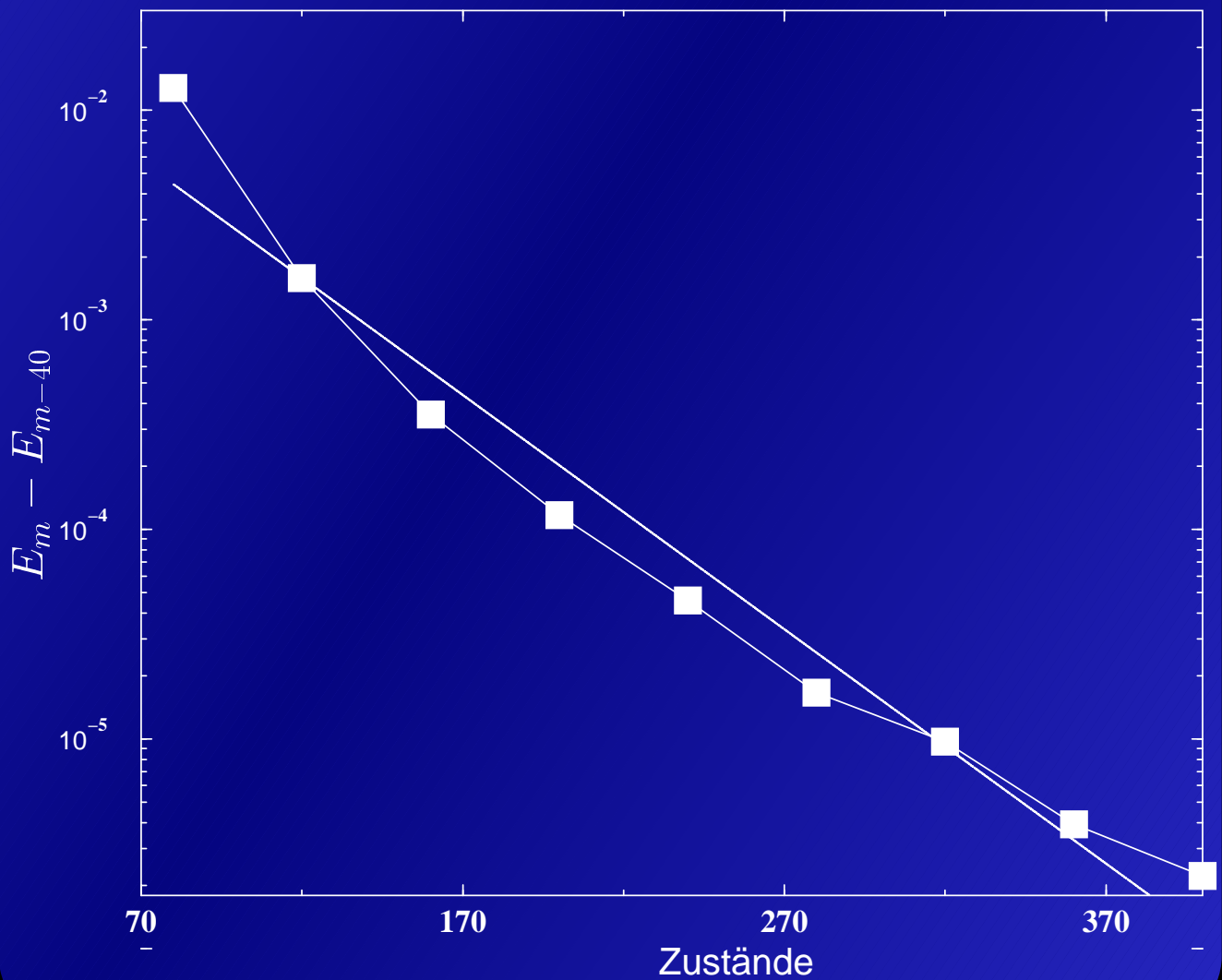


# Konvergenz bei Hubbard-Ketten

$$L = 64, U = 8, t_2 = 0, N_{\uparrow} = 16, N_{\downarrow} = 16$$

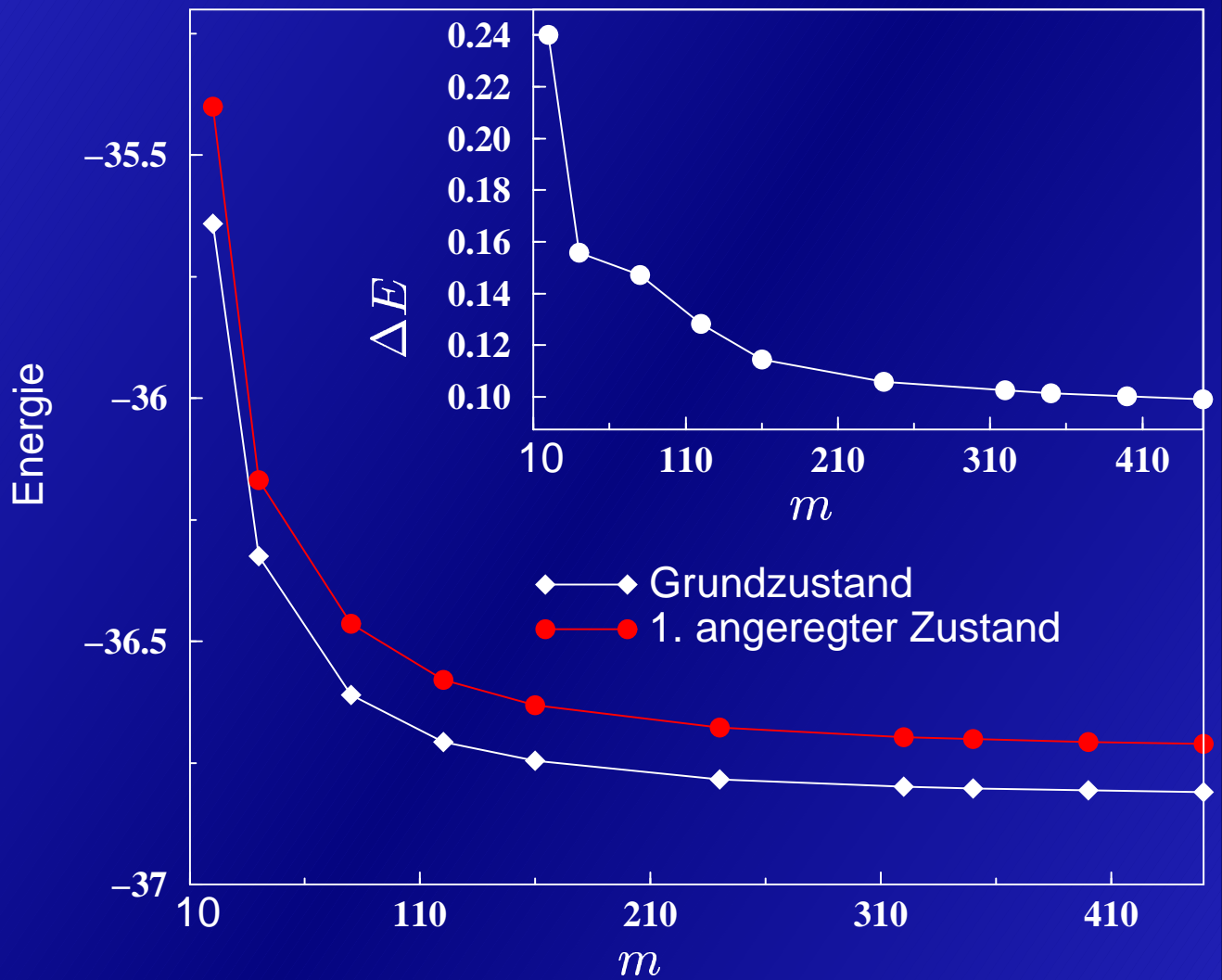
$$\text{für } H = -t \sum_{i=1, \sigma=\uparrow, \downarrow}^L \left\{ c_{i\sigma}^{\dagger} c_{i+1\sigma} + \text{h.c.} \right\} -$$

$$t_2 \sum_{i=1, \sigma=\uparrow, \downarrow}^L \left\{ c_{i\sigma}^{\dagger} c_{i+2\sigma} + \text{h.c.} \right\} + U \sum_{i=1}^L n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}$$



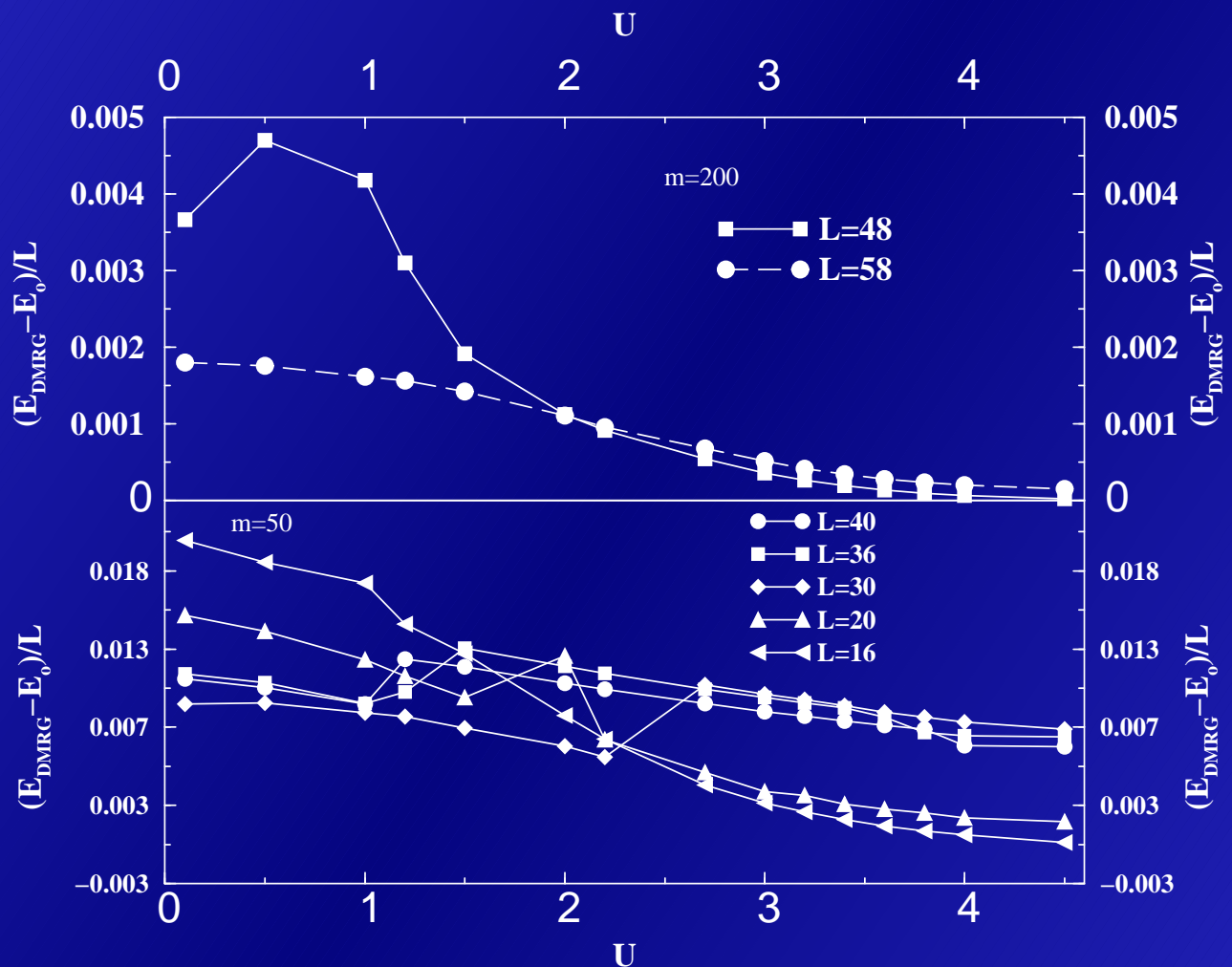
# Angeregte Zustände

Die Berechnung von angeregten Zuständen:



$$L = 32, N_1 = N_{\downarrow} = 16, U = 1, t_2 = -0,8$$

# Betrachtungen zum Konvergenzverhalten III



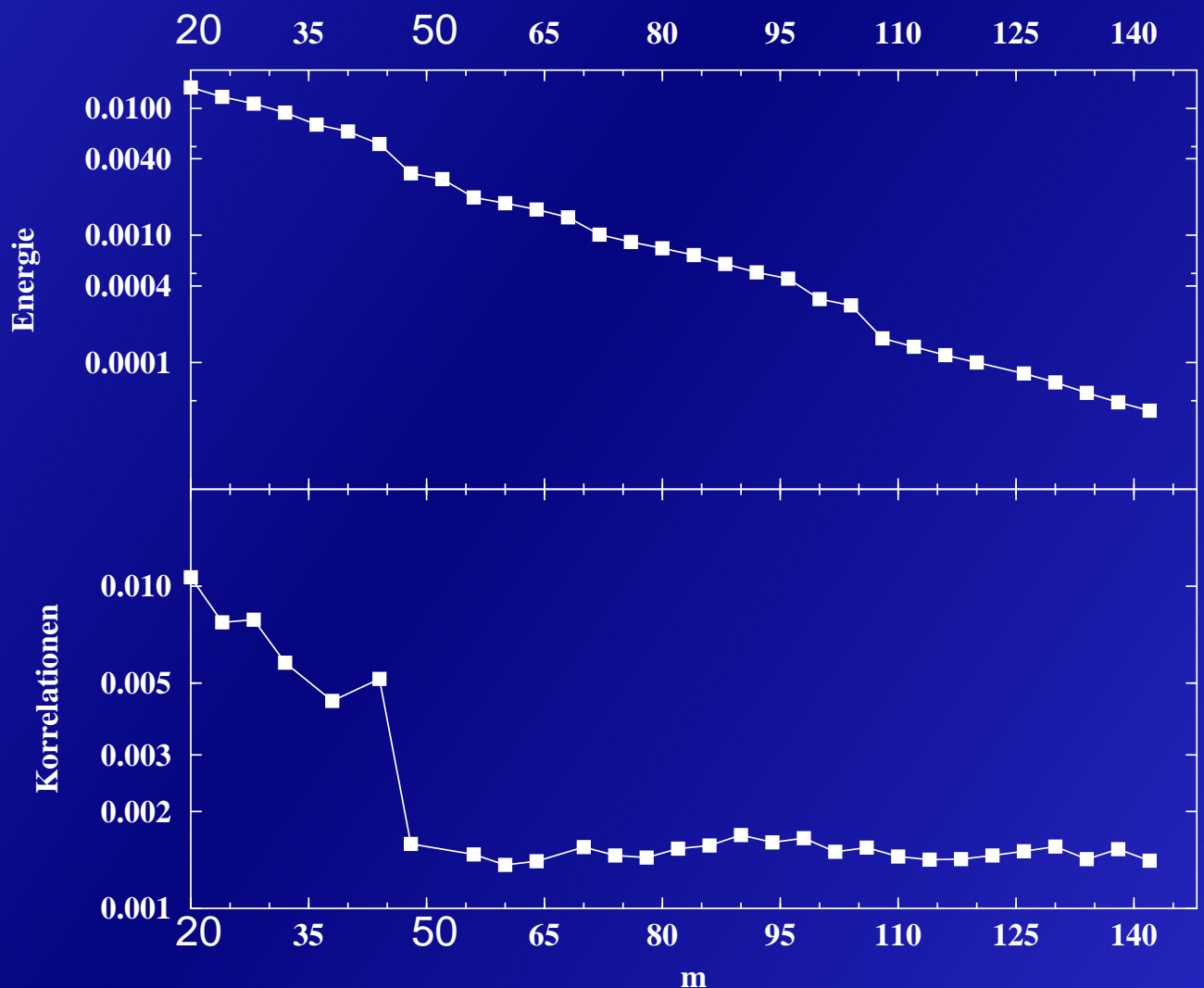
für  $t_2 = 0$ :

Vergleich zu analytischem Ergebnis <sup>a</sup>

<sup>a</sup>Lieb and Wu **Phys.Rev.Lett.** 20 (1968) 1445-1448

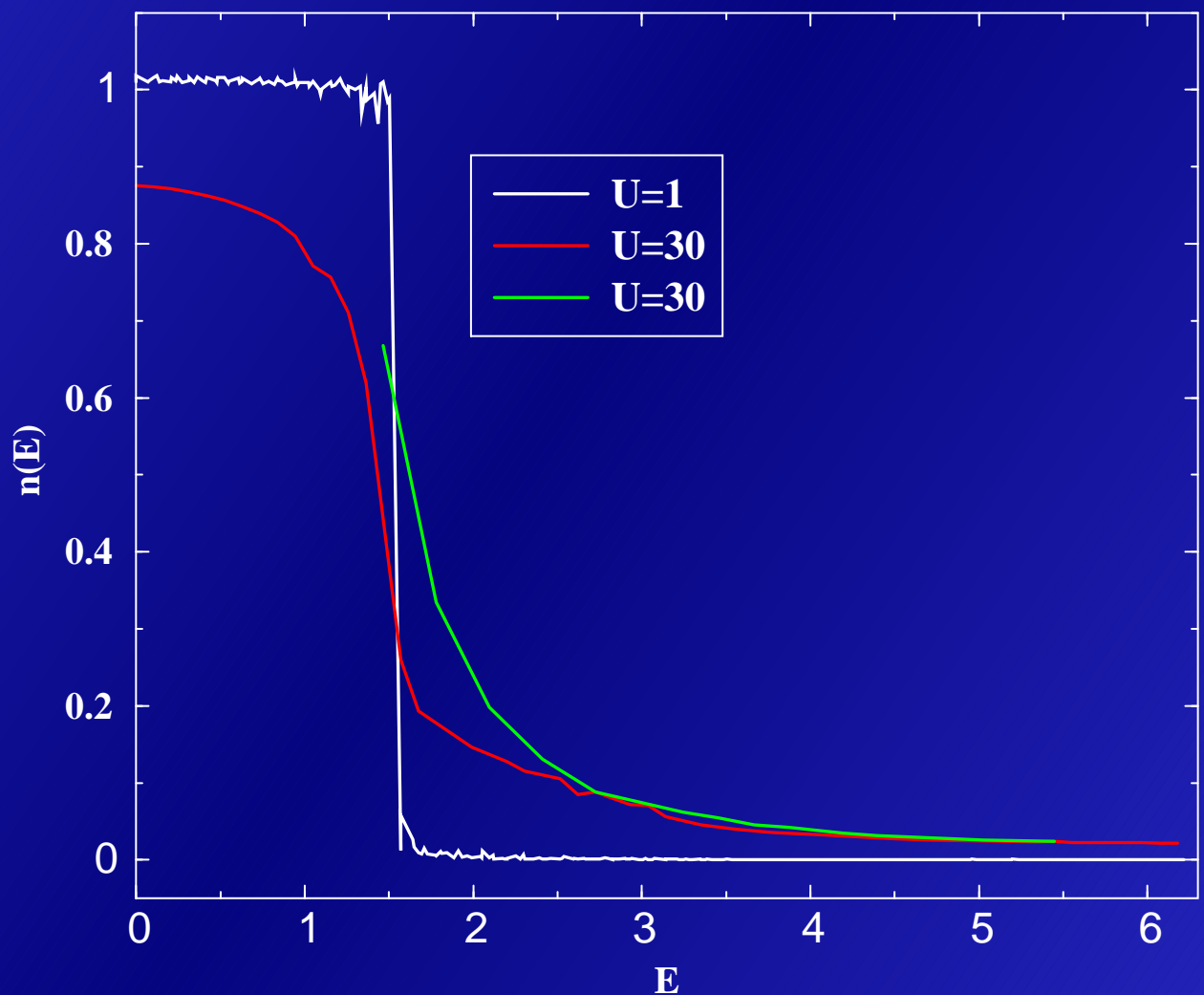
# Betrachtungen zum Konvergenzverhalten IV

Relativer Fehler der Energien und der Betragssumme der  
Korrelationswerte für  $U = 0$ ,  $L = 10$ ,  $t_2 = 2$  mit OBC



# Verschiebung der Fermiflächen

offene Randbedingungen,  $t_2 = -3$ , Viertelfüllung,  
 $m = 300 - 320$





# 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!



## Ausblick

- weitere Berechnungen zu Hubbard-Ketten und -Leitern
- Modell (Kopplungen aus SCF) für  $\text{CuGeO}_3$
- Quantenchemie mit DMRG
- Quantenchemie mit DMRG

## Danksagung

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

Weiteres (Paper etc.): <http://www.kay-hamacher.de>