

DMRG-Untersuchungen hochkorrelierter Vielteilchensysteme mit symmetrieger- schützten topologischen Zuständen

Masterarbeit im Fach Physik

an der Universität Greifswald
am 7. August 2015
vorgelegt von

Florian Lange

1. Gutachter: Prof. Dr. H. Fehske
2. Gutachter: Prof. Dr. R. Schneider

Inhaltsverzeichnis

1	Einleitung	1
2	Symmetriegeschützte Topologische Ordnung	3
2.1	Klassifikation von Phasen mit Energielücke	3
2.2	Haldane-Phase	4
2.2.1	Affleck-Kennedy-Lieb-Tasaki-Zustand	4
2.2.2	Heisenberg-Modell	5
3	Numerische Methoden	7
3.1	Matrixproduktzustände	7
3.1.1	Normierung	8
3.1.2	Unendliche Systeme	9
3.1.3	Matrixproduktoperatoren	11
3.1.4	Symmetrieeigenschaften	12
3.2	Dichtematrixrenormierungsgruppe	15
3.2.1	Formulierung mit Matrixproduktzuständen	16
3.2.2	Angeregte Zustände	19
3.2.3	Unendliche Dichtematrixrenormierungsgruppe	20
3.2.4	Unendliche Randbedingungen	22
3.3	Verschrankungsentropie und zentrale Ladung	23
3.4	Berechnung von Spektralfunktionen mittels Zeitentwicklung	24
3.4.1	Zeitabhängige Dichtematrixrenormierungsgruppe	25
3.4.2	Fehlerquellen	27
3.4.3	Lineare Vorhersage	28
4	Erweitertes Bose-Hubbard-Modell	31
4.1	Diskussion des Modells	31
4.1.1	Lokale Wechselwirkung	32
4.1.2	Nächste-Nachbar-Wechselwirkung	33
4.2	Numerische Ergebnisse [1]	34
4.2.1	Phasendiagramm	34
4.2.2	Topologischer Ordnungsparameter	36
4.2.3	Zentrale Ladung	37
4.2.4	Anregungsenergien	39
4.2.5	Dynamischer Dichtestrukturfaktor	40
5	Erweitertes Hubbard-Modell	45

5.1	Diskussion des Modells	45
5.1.1	Nächste-Nachbar-Wechselwirkung	46
5.1.2	Spinwechselwirkung	47
5.2	Numerische Ergebnisse [2]	48
5.2.1	Phasendiagramm	48
5.2.2	Topologischer Ordnungsparameter	49
5.2.3	Ladungsdichtewelle-Haldane-Isolator-Übergang	50
5.2.4	Anregungsenergien	53
5.2.5	Dynamische Strukturfaktoren	57
6	Zusammenfassung	59
A	MPO-Darstellung der Hamilton-Operatoren	63
A.1	Erweitertes Fermi-Hubbard-Modell	63
A.2	Erweitertes Bose-Hubbard-Modell	64
	Literaturverzeichnis	67

1 Einleitung

Bei der Beschreibung von Festkörpern und Atomen in optischen Gittern werden quantenmechanische Gittermodelle verwendet. Eine wesentliche Schwierigkeit bei ihrer numerischen Untersuchung ist das exponentielle Wachstum des Hilbert-Raums mit der Anzahl der Gitterplätze L , was dazu führt, dass häufig nur unrealistisch kleine Systeme direkt berechenbar sind. Aus diesem Grund wird üblicherweise eine Reihe von Systemen mit unterschiedlichen L betrachtet, um dann eine Extrapolation zum thermodynamischen Limes durchzuführen. An Phasenübergängen können im Rahmen eines Finite-Size-Scalings aus der Systemgrößenabhängigkeit bestimmter Observablen zudem die entsprechenden kritischen Exponenten ermittelt werden. Für beide Zwecke ist es allerdings wünschenswert, Ergebnisse zu möglichst großen L zur Verfügung zu haben.

Bei ausreichend niedriger Temperatur wird das System näherungsweise durch seinen Grundzustand beschrieben, d.h. es genügt sich auf den Eigenvektor zum kleinsten Eigenwert der Matrix des Hamilton-Operators zu beschränken. Mit exakter Diagonalisierung ist z.B. im Hubbard-Modell eine Berechnung nur für Systeme der Größenordnung $L \lesssim 25$ möglich. In einer Dimension bietet die im Jahr 1992 von Steven R. White eingeführte Dichtematrixrenormierungsgruppe [3] (DMRG) eine Möglichkeit, auch Grundzustände für deutlich höhere L sehr genau zu bestimmen. Die Rechnung ist dabei auf Unterräume mit handhabbarer Dimension eingeschränkt, die im Lauf des Algorithmus auf den gesuchten Zustand abgestimmt werden. Inzwischen wurde die DMRG in viele Richtungen weiterentwickelt, z.B. um dynamische Eigenschaften und endliche Temperaturen zu behandeln, sodass sie zur Zeit die wahrscheinlich mächtigste numerische Methode für eindimensionale Quantensysteme darstellt. Insbesondere wurde erkannt, dass sich die berechneten Zustände als sogenannte Matrixproduktzustände (MPS) schreiben lassen, was eine kompakte Darstellung unabhängig von einer bestimmten reduzierten Basis ermöglicht. Der MPS-Formalismus ist vorteilhaft, wenn mehrere Zustände gleichzeitig betrachtet werden, wie bei der Berechnung von Anregungen oder bei der Lanczos-Methode für dynamische Größen [4]. Zudem können translationsinvariante Zustände als MPS ausgedrückt durch eine sich wiederholende Einheitszelle beschrieben und damit effektiv parametrisiert werden. Der Infinite-System-Algorithmus, welcher in der klassischen Formulierung in erster Linie als Bestandteil der Berechnung endlicher Systeme dient, lässt sich modifizieren, um eine solche Einheitszelle zu bestimmen und Ergebnisse direkt für den thermodynamischen Limes zu liefern [5].

DMRG-Techniken sind u.a. zur Behandlung von Modellen geeignet, die bei der Beschreibung ultrakalter Atome in optischen Gittern auftauchen. Als Ausgangspunkt für diese Systeme können bosonische und fermionische Hubbard-Modelle verwendet

werden. Der experimentell beobachtbare Übergang zwischen suprafluiden und Mott-Isolator-Phase wird bereits durch das einfache Bose-Hubbard-Modell erklärt [6], generell sind die Systeme jedoch komplizierter und für eine korrekte Beschreibung müssen z.B. Terme zum Hamilton-Operatoren hinzugefügt oder zusätzliche Bänder einbezogen werden [7]. Solche Modelle sind analytisch und numerisch eventuell schwieriger zu handhaben, können aber interessante neue Phasen aufweisen.

Für den Fall einer Dimension ist mit der DMRG eine umfassende Untersuchung auch komplizierter Modelle möglich. In dieser Arbeit werden unterschiedliche DMRG- und MPS-Methoden auf verallgemeinerte Hubbard-Ketten mit Nächste-Nachbar-Wechselwirkungen angewendet. Die zusätzlichen Wechselwirkungsterme führen dabei zu stark veränderten Phasendiagrammen mit symmetriegeschützten topologischen (SPT) Zuständen. Diese sind bei Anwesenheit bestimmter Symmetrien durch Phasenübergänge voneinander getrennt, obwohl die entsprechenden Symmetrien nicht spontan gebrochen werden, und weisen häufig besondere Eigenschaften wie Randzustände oder nichtlokale Ordnungsparameter auf. In einer Dimension wurde eine Klassifikation solcher Phasen im MPS-Formalismus durchgeführt [8, 9], welche durch die Verbindung zur DMRG leicht in praktischen Rechnungen benutzt werden kann.

ITensor [10] ist eine C++-Tensorbibliothek, die speziell auf MPS-gestützte Verfahren ausgelegt ist. Wir benutzen die in ITensor enthaltenen Standard-DMRG- und -iDMRG-Programme und implementieren zusätzlich neuere Anwendungen, z.B. zur Berechnung zeitabhängiger Größen oder zur Analyse und Klassifikation symmetriegeschützter topologischer Zustände.

2 Symmetriegeschützte Topologische Ordnung

Lange Zeit wurde angenommen, dass sich alle Phasen physikalischer Systeme durch die Landau-Theorie für spontan gebrochene Symmetrien beschreiben lassen. Es stellte sich jedoch heraus, dass bei verschwindender Temperatur T Phasen existieren, die bezüglich der Symmetrie nicht unterscheiden und trotzdem durch scharfe Übergänge voneinander getrennt sind. Hierfür wurde der Begriff topologische Ordnung eingeführt [11]. Eine Unterkategorie sind die symmetriegeschützten topologischen Zustände, welche z.B. in den in dieser Arbeit betrachteten erweiterten Hubbard-Modellen auftreten. Für eindimensionale Systeme ist eine Kennzeichnung von SPT-Zuständen im Matrixproduktformalismus möglich (siehe Abschnitt 3.1.4). Zunächst wird im Folgenden die Stellung der SPT-Zustände innerhalb einer allgemeinen Klassifikation der Phasen bei $T = 0$ besprochen. Anschließend wird die Haldane-Phase von Spin-1-Ketten als Beispiel symmetriegeschützter topologischer Ordnung in einer Dimension vorgestellt. Diese ähnelt den SPT-Zuständen der untersuchten Hubbard-Modelle und kann daher als Ausgangspunkt für deren Beschreibung genommen werden.

2.1 Klassifikation von Phasen mit Energielücke

Es werden quantenmechanische Gittersysteme untersucht, deren Zustandsräume die Tensorprodukte identischer lokaler Hilbert-Räume sind:

$$\mathcal{H} = \bigotimes_i \mathcal{H}_i. \quad (2.1)$$

Die Elemente von \mathcal{H} können im Allgemeinen in verschiedene Phasen eingeteilt werden. Hier wird die in Ref. [12] beschriebene Klassifikation für Grundzustände lokaler Hamilton-Operatoren \hat{H} mit Energielücke verwendet. Zwei solche Zustände $|\psi_1\rangle$ und $|\psi_2\rangle$ sollen zur selben Phase gehören, wenn es einen glatten Pfad

$$\hat{H}(g), \quad 0 \leq g \leq 1, \quad (2.2)$$

$$\hat{H}(0) = \hat{H}_1, \quad \hat{H}(1) = \hat{H}_2 \quad (2.3)$$

zwischen den dazugehörigen Hamilton-Operatoren \hat{H}_1 und \hat{H}_2 gibt, entlang dessen kein Phasenübergang auftritt. Eventuell werden dabei noch bestimmte Symmetrien des Systems gefordert, die $\hat{H}(g)$ für alle $0 \leq g \leq 1$ zu erfüllen hat. Mit einem Phasenübergang ist ein Punkt gemeint, an dem der Erwartungswert eines lokalen Operators als Funktion von g eine Singularität aufweist, was ein Schließen der Energielücke impliziert [12].

Nicht alle so definierten Phasen weichen durch spontan gebrochene Symmetrien voneinander ab, in diesen Fällen spricht man von topologischer Ordnung. Zustände die sich in derselben Phase wie ein Produktzustand bezüglich der Gitterplätze, z.B.

$$|\psi_{\text{triv.}}\rangle = \bigotimes_i |\sigma_i\rangle, \quad |\sigma_i\rangle \in \mathcal{H}_i, \quad (2.4)$$

befinden, werden dabei topologisch trivial genannt. Wenn die Unterscheidung nur möglich ist, solange das System bestimmte Symmetrien erfüllt, liegt symmetriegeschützte, ansonsten intrinsische topologische Ordnung vor.

2.2 Haldane-Phase

Die Haldane-Phase von Spin- S -Ketten mit ungeradem ganzzahligen S ist eine SPT-Phase, die durch eine oder mehrere der folgenden Symmetrien geschützt wird:

$$\left. \begin{array}{l} \hat{S}_i^l \xrightarrow{\mathcal{I}} \hat{S}_{1-i}^l, \\ \hat{S}_i^l \xrightarrow{\mathcal{T}} -\hat{S}_i^l, \\ \hat{S}_i^l \xrightarrow{\mathcal{R}_{l'}} \begin{cases} \hat{S}_i^l, & l = l' \\ -\hat{S}_i^l, & l \neq l', \end{cases} \end{array} \right\} l = x, y, z, \quad (2.5)$$

d.h. räumliche Inversion \mathcal{I} , Zeitumkehrung \mathcal{T} und π -Rotation der Spins um die x -, y - und z -Achsen $\mathcal{R}_{x,y,z}$. Letztgenannte besitzt die Gruppenstruktur $\mathbb{Z}_2 \times \mathbb{Z}_2 = D_2$ und wird daher auch D_2 -Symmetrie genannt. \mathbb{Z}_2 wird durch die Zahlen 1 und -1 repräsentiert, mit der Multiplikation als Gruppenoperation. Im Folgenden wird nur der Fall $S = 1$ betrachtet.

2.2.1 Affleck-Kennedy-Lieb-Tasaki-Zustand

Die speziellen Eigenschaften der Haldane-Phase können am einfachsten anhand des Grundzustands von

$$\hat{H} = \sum_i \left[\hat{S}_i \hat{S}_{i+1} + \frac{1}{3} (\hat{S}_i \hat{S}_{i+1})^2 \right], \quad (2.6)$$

der als AKLT-Zustand (Affleck-Kennedy-Lieb-Tasaki [13]) bekannt ist, gezeigt werden. Er lässt sich exakt konstruieren, indem man die Spin-1- durch jeweils zwei Spin-1/2-Momente ersetzt und annimmt, dass benachbarte Spins, die zu unterschiedlichen Gitterplätzen gehören, Singulettzustände

$$\frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle) \quad (2.7)$$

bilden. Innerhalb der Gitterplätze werden hingegen nur Triplets

$$|+\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle, \quad (2.8)$$

$$|0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle), \quad (2.9)$$

$$|-\rangle = |\downarrow\downarrow\rangle \quad (2.10)$$

berücksichtigt, sodass der resultierende, noch nicht normierte Zustand eine Spin-1-Kette beschreibt. Bei periodischen Randbedingungen wird der Zustand hierdurch eindeutig festgelegt, während bei offenen Randbedingungen die äußeren halbzahligen Spins unbestimmt bleiben. Diese Spin-1/2-Freiheitsgrade, oder Randzustände, führen zu einer vierfachen Entartung des Grundzustands von (2.6). Da der AKLT-Zustand, von den Rändern abgesehen, keine Symmetrie des Hamilton-Operators (2.6) bricht, kann er nicht durch einen lokalen Ordnungsparameter gekennzeichnet werden. Stattdessen gibt es eine nichtlokale Stringordnung, die sich folgendermaßen erklären lässt. In den einzelnen Komponenten des Zustands bezüglich der S^z -Basis der Spin-1/2-Momente folgt auf ein Paar mit $S^z = \pm 1$ wegen der Einschränkung, dass zwischen den Gitterplätzen Singulettts gebildet werden, zwangsläufig eines mit $S^z = 0$ oder $S^z = \mp 1$. Im Fall $S^z = 0$ ist der nächste Zustand wieder $S^z = 0$ oder $S^z = \mp 1$. Zurück in der Spin-1-Basis bedeutet dies, dass $|+\rangle$ und $|-\rangle$ abwechselnd auftauchen, falls man Gitterplätze mit $|0\rangle$ ignoriert. Der dazugehörige Stringordnungsparameter lautet

$$\mathcal{O}_s = \lim_{r \rightarrow \infty} \langle \psi | \hat{S}_r^z e^{i\pi \sum_{i=1}^r \hat{S}_i^z} \hat{S}_0^z | \psi \rangle. \quad (2.11)$$

Im AKLT-Zustand ist $\mathcal{O}_s = -4/9$, während in einem topologisch trivialen Zustand mit D_2 -Symmetrie $\mathcal{O}_s = 0$ gilt.

2.2.2 Heisenberg-Modell

Wenn der Vorfaktor im zweiten Term von Gl. (2.6) kontinuierlich von $1/3$ auf 0 herabgesetzt wird, geht der Hamilton-Operator in den des Heisenberg-Modells über, ohne dass ein Phasenübergang stattfindet [14]. Demnach gehört der Grundzustand des

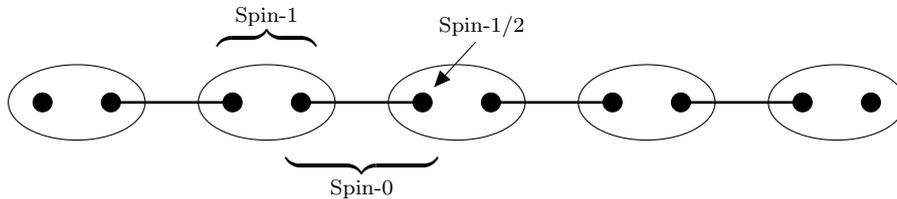


Abb. 2.1: AKLT-Zustand bei offenen Randbedingungen. Die Punkte repräsentieren Spin-1/2-Teilchen, die, wenn sie durch eine Linie verbunden sind, Singulett-Paare bilden. Innerhalb der der physikalischen Gitterplätze (Ellipsen) werden die Singulettts herausprojiziert.

antiferromagnetischen Heisenberg-Modells zur selben Phase wie der AKLT-Zustand. Die Randzustände bleiben erhalten, allerdings ist ihr Einfluss nicht mehr auf die äußersten Gitterplätze beschränkt, sondern nimmt exponentiell mit dem Abstand zum Rand ab, wodurch die vierfache Entartung erst im thermodynamischen Limes exakt wird. Im Heisenberg-Modell ist die Stringordnung zwar nicht streng erfüllt, \mathcal{O}_s bleibt jedoch endlich.

Es können weitere Terme zum Hamilton-Operator hinzugefügt werden, die in Gl. (2.5) definierte Symmetrien brechen. Wenn nur die Inversionssymmetrie übrig ist, lässt sich die Haldane-Phase nicht mehr notwendigerweise durch Randzustände oder den Stringordnungsparameter charakterisieren. Um die Haldane-Phase weiterhin von topologisch trivialen Zuständen zu unterscheiden, kann das Eigenwertspektrum w_α der reduzierten Dichtematrix eines Untersystems herangezogen werden [15]. In der Regel wird dabei der Logarithmus genommen, was das Verschränkungsspektrum $\epsilon_\alpha = -\ln(w_\alpha)$ definiert. Im thermodynamischen Limes sind die Eigenwerte des Spektrums für einen Schnitt durch das System mindestens zwei- bzw. vierfach entartet, je nachdem ob offene oder periodische Randbedingungen vorliegen. Dies ist eine allgemeine Eigenschaft der Haldane-Phase mit ungeradem Spin und gilt unabhängig davon, welche der Symmetrien in Gl. (2.5) den Zustand schützen.

3 Numerische Methoden

Es sollen die Grundzustandseigenschaften erweiterter Hubbard-Modelle untersucht werden. Da die Dimension des Hilbert-Raums exponentiell mit der Anzahl der Gitterplätze zunimmt, ist eine exakte Diagonalisierung jedoch nur für so kleine Systeme möglich, die keine verlässlichen Schlüsse auf den thermodynamischen Limes zulassen. Um größere L zu behandeln, müssen Näherungen durchgeführt werden. Wir benutzen die Dichtematrixrenormierungsgruppe, in der der Grundzustand in Form eines Matrixproduktzustands approximiert wird. Dieses Kapitel folgt größtenteils Ref. [16].

3.1 Matrixproduktzustände

Der allgemeine Zustand eines Systems aus L Gitterplätzen mit einem lokalen, durch die Basisvektoren $|\sigma\rangle$ aufgespannten Hilbert-Raum der Dimension d lautet

$$|\psi\rangle = \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_L} c_{\sigma_1, \dots, \sigma_L} |\sigma_1, \dots, \sigma_L\rangle. \tag{3.1}$$

Es lässt sich immer eine Darstellung als MPS finden, in der sich die Koeffizienten $c_{\sigma_1, \dots, \sigma_L}$ aus einer Reihe von Matrixprodukten ergeben:

$$|\psi\rangle = \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_L} A^{\sigma_1} \dots A^{\sigma_L} |\sigma_1, \dots, \sigma_L\rangle, \tag{3.2}$$

wobei A^{σ_i} Matrizen der Dimension $\chi_{i-1} \times \chi_i$ mit $\chi_0 = \chi_L = 1$ sind. Um den Zustand (3.1) exakt wiederzugeben, werden maximal Dimensionen $\chi_i = d^{\min(i, L-i)}$ mit $i = 1, \dots, L - 1$ benötigt, sodass die Gesamtzahl der Parameter exponentiell mit der Systemgröße L steigt. Der Nutzen von Matrixproduktzuständen besteht darin, dass in bestimmten Fällen, wie dem Grundzustand eines eindimensionalen Systems mit Energielücke, eine gute Näherung bereits für deutlich kleinere χ_i möglich ist, und diese z.B. mit der DMRG effektiv berechnet werden kann.

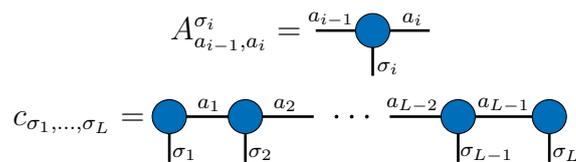


Abb. 3.1: Graphische Tensorschreibweise. Über verbundene Indizes wird summiert.

Häufig wird für MPS eine graphische Schreibweise verwendet (Abb. 3.1), wodurch sich viele Operationen übersichtlicher darstellen lassen. Die Gesamtheit der Matrizen an einem Gitterplatz i wird dabei als Tensor $A^{[i]}$ mit einem physikalischen Index σ_i und zwei Bindungsindizes a_{i-1}, a_i aufgefasst.

3.1.1 Normierung

Die Matrizen A^{σ_i} sind durch Gl. (3.1) noch nicht eindeutig festgelegt, z.B. sind folgende Ersetzungen möglich, ohne den Zustand zu verändern:

$$A^{\sigma_j} \rightarrow A^{\sigma_j} U, \quad (3.3)$$

$$A^{\sigma_{j+1}} \rightarrow U^{-1} A^{\sigma_{j+1}}, \quad \forall \sigma_j, \sigma_{j+1}, \quad (3.4)$$

wobei U eine beliebige invertierbare $\chi_j \times \chi_j$ -Matrix ist. Es ist günstig, die Matrizen so zu wählen, dass sie bestimmte Normierungen erfüllen:

$$\sum_{\sigma_i} A^{\sigma_i \dagger} A^{\sigma_i} = I \quad \text{linksnormiert}, \quad (3.5)$$

$$\sum_{\sigma_i} A^{\sigma_i} A^{\sigma_i \dagger} = I \quad \text{rechtsnormiert}, \quad (3.6)$$

mit der Identitätsmatrix I . Insbesondere verwendet man im DMRG-Verfahren Zustände, bei denen alle Gitterplätze i in $\{1, \dots, j\}$ linksnormiert und solche in $\{j+1, \dots, L\}$ rechtsnormiert sind, für ein $1 < j < L$. Dafür ist es nötig, eine zusätzliche $\chi_j \times \chi_j$ -Diagonalmatrix Λ zwischen den Plätzen j und $j+1$ einzuführen. Es handelt sich dann um eine Schmidt-Zerlegung des Systems, deren Koeffizienten die Einträge der Matrix Λ sind:

$$|\psi\rangle = \sum_{a_j=1}^{\chi_j} \Lambda_{a_j a_j} |\psi_{a_j}^l\rangle |\psi_{a_j}^r\rangle, \quad (3.7)$$

$$|\psi_{a_j}^l\rangle = \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_j} (A^{\sigma_1} \dots A^{\sigma_j})_{a_j} |\sigma_1, \dots, \sigma_j\rangle, \quad (3.8)$$

$$|\psi_{a_j}^r\rangle = \sum_{\sigma_{j+1}, \dots, \sigma_L} (A^{\sigma_{j+1}} \dots A^{\sigma_L})_{a_j} |\sigma_{j+1}, \dots, \sigma_L\rangle. \quad (3.9)$$

Den Werten des Indexes a_j lassen sich also Basisvektoren der beiden Blöcke zuordnen. Dass diese Vektoren tatsächlich orthonormal zueinander sind ergibt sich aus der Links- bzw. Rechtsnormierung:

$$\begin{aligned} \langle \psi_{a_j}^l | \psi_{a_j}^l \rangle &= \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_j} (A^{\sigma_j \dagger} \dots A^{\sigma_1 \dagger})_{a_j} (A^{\sigma_1} \dots A^{\sigma_j})_{a_j} \\ &= \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_j} (A^{\sigma_j \dagger} \dots \underbrace{A^{\sigma_1 \dagger} A^{\sigma_1}}_{\stackrel{(3.5)}{=} I} \dots A^{\sigma_j})_{a_j a_j} \end{aligned} \quad (3.10)$$

$$\begin{aligned}
 &= \sum_{\sigma_2, \dots, \sigma_j} (A^{\sigma_j \dagger} \dots \underbrace{A^{\sigma_2 \dagger} A^{\sigma_2}}_{\stackrel{(3.5)}{=} I} \dots A^{\sigma_j})_{a'_j a_j} \\
 &\quad \vdots \\
 &= \delta_{a'_j a_j}.
 \end{aligned}$$

Der Beweis für den rechten Block erfolgt analog unter Ausnutzung von Gl. (3.6). Eine häufig benötigte Operation ist die Verschiebung der Λ -Matrix um einen Gitterplatz, z.B. $j \rightarrow j+1$. Hierfür berechnet man den Tensor $(\Lambda A^{\sigma_{j+1}})_{a_j a_{j+1}}$ und fasst ihn als $d\chi \times \chi$ -Matrix mit Indizes $(\sigma_{j+1} a_j)$ und a_{j+1} auf. Durch Singulärwertzerlegung ergeben sich eine Diagonalmatrix Λ' und zwei Matrizen $U_{(\sigma_{j+1} a_j) a'_j}$ und $V_{a_{j+1} a'_j}$ mit orthonormalen Spalten, sodass $(\Lambda A^{\sigma_{j+1}})_{a_j a_{j+1}} = (U \Lambda' V^\dagger)_{(\sigma_{j+1} a_j) a_{j+1}}$. Aufgrund der Unitarität kann V^\dagger an $A^{\sigma_{j+2}}$ heranmultipliziert werden, ohne die Rechtsnormierung an diesem Gitterplatz zu zerstören. U liefert nach Trennung der Indizes die neue Matrix $A^{\sigma_{j+1}}$, die jetzt linksnormiert ist, da $\sum_{\sigma_{j+1}} A^{\sigma_{j+1} \dagger} A^{\sigma_{j+1}} = U^\dagger U = I$. Demnach liegt wieder eine Schmidt-Zerlegung vor, allerdings um einen Gitterplatz verschoben und mit neuen Koeffizienten Λ' . Eine ähnliche Operation kann auch für die andere Richtung durchgeführt werden.

Indem man die Zerlegung an jedem Bindungsindex berechnet, ergibt sich folgende alternative Form eines MPS:

$$|\psi\rangle = \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_L} \Gamma^{\sigma_1} \Lambda^{[1]} \Gamma^{\sigma_2} \Lambda^{[2]} \dots \Lambda^{[L-1]} \Gamma^{\sigma_L} |\sigma_1, \dots, \sigma_L\rangle, \quad (3.11)$$

mit linksnormierten $\Lambda^{[i-1]} \Gamma^{\sigma_i}$ und rechtsnormierten $\Gamma^{\sigma_i} \Lambda^{[i]}$. Ein solcher Zustand wird kanonischer MPS genannt.

3.1.2 Unendliche Systeme

Für einen translationsinvarianten Zustand im thermodynamischen Limes kann an jedem Bindungsindex dieselbe Schmidt-Zerlegung gewählt werden. Daher bietet es sich an, als Ansatz einen MPS der Form (3.11) zu verwenden, dessen Tensoren unabhängig vom Gitterplatz sind (iMPS). Besteht die Einheitszelle aus $L > 1$ Gitterplätzen, muss die Anzahl der Tensoren entsprechend erhöht werden:

$$\left. \begin{aligned} \Gamma^{[i]} &= \Gamma^{[i+nL]}, \\ \Lambda^{[i]} &= \Lambda^{[i+nL]}, \end{aligned} \right\} n \in \mathbb{Z}. \quad (3.12)$$

Aufgrund der Normierung der Tensoren lassen sich Erwartungswerte von Operatoren, die auf ein beliebig großes endliches Teilsystem wirken, berechnen, indem nur die betroffenen Tensoren explizit kontrahiert werden. Beispielsweise gilt für Korrelationsfunktionen eines translationsinvarianten Zustands:

$$\langle \psi | \hat{O}_i \hat{O}_j | \psi \rangle = \tilde{L} T^{j-i-1} \tilde{R}, \quad (3.13)$$

$$\tilde{L}_{a_i a'_i} = \sum_{a_{i-1} a'_{i-1}} \delta_{a_{i-1} a'_{i-1}} \left[\sum_{\sigma_i \sigma'_i} \left(\langle \sigma_i | \hat{O}_i | \sigma'_i \rangle \Lambda \Gamma^{\sigma'_i} \Lambda \otimes \Lambda \Gamma^{\sigma_i} \Lambda \right) \right]_{a_{i-1} a'_{i-1}, a_i a'_i}, \quad (3.14)$$

$$\tilde{R}_{a_j a'_j} = \sum_{a_j a'_j} \delta_{a_j a'_j} \left[\sum_{\sigma_j \sigma'_j} \left(\langle \sigma_j | \hat{O}_j | \sigma'_j \rangle \Gamma^{\sigma'_j} \Lambda \otimes \Gamma^{\sigma_j} \Lambda \right) \right]_{a_{j-1} a'_{j-1}, a_j a'_j},$$

$$T = \sum_{\sigma} (\Gamma^{\sigma} \Lambda \otimes \Gamma^{\sigma} \Lambda), \quad (3.15)$$

wobei \hat{O}_i und \hat{O}_j lokale Operatoren sind. Die Tensoren \tilde{L} und \tilde{R} werden in Gl. (3.13) als Vektoren der Länge χ^2 aufgefasst. Mit endlichen Matrixdimensionen χ kann ein Zustand in der Regel nicht exakt wiedergegeben werden. Um die Auswirkung des Ansatzes auf Korrelationsfunktionen (3.13) zu verstehen, betrachtet man die Eigenwertzerlegung der Transfermatrix T :

$$v_{\alpha} T = \lambda_{\alpha} v_{\alpha}, \quad \tilde{L} = \sum_{\alpha=1}^{\chi^2} l_{\alpha} v_{\alpha}, \quad (3.16)$$

$$\langle \psi | \hat{O}_i \hat{O}_j | \psi \rangle = \sum_{\alpha=1}^{\chi^2} l_{\alpha} (v_{\alpha}, \tilde{R}) \lambda_{\alpha}^{j-i-1}, \quad (3.17)$$

d.h. es ergibt sich eine Überlagerung exponentieller Terme. Nach Voraussetzung hat T einen Eigenwert $\lambda_1 = 1$ mit der Identitätsmatrix als rechten Eigenvektor. Alle übrigen Eigenwerte sind ebenfalls kleiner gleich 1 [16], sodass die mit Gl. (3.13) berechnete Korrelationsfunktion für $|j - i| \rightarrow \infty$ konvergiert. Insbesondere Potenzgesetze können durch eine endliche Summe von Exponentialfunktionen jedoch nur bedingt wiedergegeben werden. Dem System wird gewissermaßen eine künstliche,

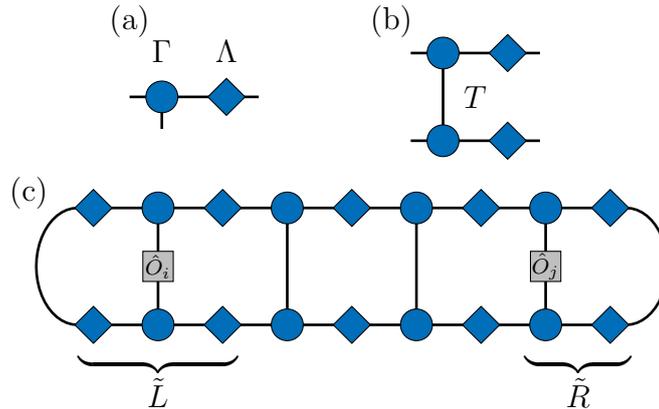


Abb. 3.2: (a) Einheitszelle eines iMPS. (b) Transfermatrix. (c) Berechnung von Korrelationsfunktionen.

durch den größten Eigenwert $\lambda_k < 1$ bestimmte Korrelationslänge ξ auferlegt:

$$\xi = -\frac{1}{\ln(\lambda_k)}. \quad (3.18)$$

Gegen welchen Wert ξ , z.B. in einer DMRG-Rechnung, konvergiert hängt im Allgemeinen von der gewählten Matrixdimension χ ab. Durch den Vergleich der Ergebnisse mehrerer Rechnungen mit unterschiedlichen χ und $\xi_\chi := \xi(\chi)$ ist so, analog zum Finite-Size-Scaling, ein Finite-Entanglement-Scaling möglich [17].

3.1.3 Matrixproduktoperatoren

Operatoren können analog zu Matrixproduktzuständen zerlegt werden:

$$\hat{W} = \sum_{\substack{\sigma'_1, \dots, \sigma'_L \\ \sigma_1, \dots, \sigma_L}} w_{\sigma_1, \dots, \sigma_L}^{\sigma'_1, \dots, \sigma'_L} |\sigma_1, \dots, \sigma_L\rangle \langle \sigma'_1, \dots, \sigma'_L| \quad (3.19)$$

$$w_{\sigma_1, \dots, \sigma_L}^{\sigma'_1, \dots, \sigma'_L} = W^{\sigma_1 \sigma'_1} \dots W^{\sigma_L \sigma'_L}, \quad (3.20)$$

wobei es im Unterschied zu Gl. (3.2) pro Gitterplatz einen zusätzlichen physikalischen Index σ'_i gibt. Ein Vorteil solcher Matrixproduktoperatoren (MPO) ist, dass sie effektiv auf einen MPS angewendet werden können und dessen Struktur erhalten:

$$\begin{aligned} |\psi'\rangle = \hat{W}|\psi\rangle &= \sum_{\substack{\sigma'_1, \dots, \sigma'_L \\ \sigma_1, \dots, \sigma_L}} (W^{\sigma_1 \sigma'_1} \dots W^{\sigma_L \sigma'_L}) (A^{\sigma'_1} \dots A^{\sigma'_L}) |\sigma_1, \dots, \sigma_L\rangle \\ &= \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_L} \prod_{i=1}^L \left[\sum_{\sigma'_i} (W^{\sigma_i \sigma'_i} \otimes A^{\sigma'_i}) \right] |\sigma_1, \dots, \sigma_L\rangle \\ &= \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_L} \prod_{i=1}^L A^{\sigma_i} |\sigma_1, \dots, \sigma_L\rangle, \end{aligned} \quad (3.21)$$

d.h. eine MPS-Darstellung des neuen Zustands ergibt sich, indem man die Bindungsindizes vom Ausgangszustand mit denen des MPOs kombiniert, wobei sich die Matrixdimensionen entsprechend vergrößern: $\chi_i(\psi') = \chi_i(W)\chi_i(\psi)$.

DMRG-Algorithmen lassen sich übersichtlicher formulieren, wenn der Hamilton-Operator als MPO vorliegt. Für die üblichen Modelle ist eine direkte Konstruktion mit niedrigen Matrixdimensionen $\chi_i(W)$ möglich. So wird das Hubbard-Modell (5.1) bei offenen Randbedingungen durch folgenden MPO repräsentiert:

$$\hat{W}^{[i]} = \begin{pmatrix} \hat{I} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ t\hat{a}_\uparrow^\dagger & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -t\hat{a}_\uparrow & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ t\hat{F}\hat{a}_\downarrow^\dagger & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -t\hat{F}\hat{a}_\downarrow & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ U\hat{n}_\uparrow\hat{n}_\downarrow & \hat{a}_\uparrow\hat{F} & \hat{a}_\uparrow^\dagger\hat{F} & \hat{a}_\downarrow & \hat{a}_\downarrow^\dagger & \hat{I} \end{pmatrix}, \quad i = 2, \dots, L-1,$$

$$\hat{W}^{[L]} = \begin{pmatrix} \hat{I} \\ t\hat{a}_\uparrow^\dagger \\ -t\hat{a}_\uparrow \\ t\hat{F}\hat{a}_\downarrow^\dagger \\ -t\hat{F}\hat{a}_\downarrow \\ U\hat{n}_\uparrow\hat{n}_\downarrow \end{pmatrix}, \quad \hat{W}^{[1]} = \begin{pmatrix} U\hat{n}_\uparrow\hat{n}_\downarrow & \hat{a}_\uparrow\hat{F} & \hat{a}_\uparrow^\dagger\hat{F} & \hat{a}_\downarrow & \hat{a}_\downarrow^\dagger & \hat{I} \end{pmatrix}, \quad (3.22)$$

wobei $W_{a_{i-1}a_i}^{\sigma_i\sigma'_i} = \langle \sigma_i | \hat{W}_{a_{i-1}a_i}^{[i]} | \sigma'_i \rangle$ ist. Wenn man die Matrixmultiplikationen von $i = 1$ bis j und von $i = L$ bis $j + 1$ ausführt, ergeben sich zwei Vektoren aus Operatoren auf dem Hilbert-Raum des linken bzw. rechten Blocks. Durch Ausführen des Skalarprodukts werden die Blockoperatoren zum Hamilton-Operator des Gesamtsystems kombiniert.

Die $\hat{a}^{(\dagger)}$ -Operatoren an verschiedenen Gitterplätzen kommutieren miteinander, wirken ansonsten aber wie Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren für Fermionen. Zur Erfüllung der Antikommutatorrelationen müssen an den Hüpferten zusätzliche Operatoren \hat{F} eingefügt werden, die abhängig von der Anzahl der Fermionen an einem Gitterplatz einen Phasenfaktor ± 1 bewirken:

$$\hat{n}|\sigma\rangle = n|\sigma\rangle \Rightarrow \hat{F}|\sigma\rangle = (-1)^n|\sigma\rangle. \quad (3.23)$$

Die übrigen Summanden des Hamilton-Operators enthalten eine gerade Anzahl von Fermionen-Operatoren pro Gitterplatz, sodass keine Modifikationen nötig sind. In Gl. (3.22) wird die Konvention benutzt, dass in den Basiszuständen die Erzeugungsoperatoren mit höherem Index zuerst stehen. Bei Doppelbesetzung wird der Spin-Unten- vor dem Spin-Hoch-Operator angewendet, wodurch sich insgesamt z.B. folgende Definition ergibt:

$$|\uparrow\downarrow, \uparrow\downarrow\rangle = \hat{c}_{\uparrow 1}^\dagger \hat{c}_{\downarrow 1}^\dagger \hat{c}_{\uparrow 2}^\dagger \hat{c}_{\downarrow 2}^\dagger |0\rangle. \quad (3.24)$$

Dabei sind \hat{c}^\dagger die eigentlichen fermionischen Erzeugungsoperatoren und $|0\rangle$ ist der Vakuumzustand.

3.1.4 Symmetrieeigenschaften

Der MPS-Formalismus kann dazu verwendet werden, die Phasen eindimensionaler Systeme mit Energielücke zu klassifizieren [8, 18]. insbesondere lassen sich für SPT-Zustände topologische Ordnungsparameter herleiten, welche durch MPS-basierte Verfahren wie DMRG numerisch zugänglich sind [9]. Es wird vorausgesetzt, dass ein translationsinvarianter kanonischer MPS

$$|\psi\rangle = \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_L} B^T \Gamma^{\sigma_1} \Lambda \Gamma^{\sigma_2} \dots \Lambda \Gamma^{\sigma_L} B |\sigma_1, \dots, \sigma_L\rangle, \quad (3.25)$$

$$B^T B = 1 \quad (3.26)$$

mit endlicher Matrixdimension χ vorliegt, wobei B eine $\chi \times 1$ Matrix ist, die die Randbedingungen festlegt. Zudem soll die Transfermatrix nur einen Eigenwert mit Betrag 1 besitzen, was z.B. Superpositionen der beiden symmetriegebrochenen Zustände in der CDW-Phase ausschließt.

In Ref. [9] wurden folgende Arten von Symmetrien betrachtet:

$$\Gamma^\sigma \rightarrow \sum_{\sigma'} \Sigma_{\sigma\sigma'} \tilde{\Gamma}^{\sigma'}, \quad (3.27)$$

wobei $\tilde{\Gamma}$ für Γ^T , Γ^* oder Γ steht, was Inversions-, Zeitumkehr- oder interner Symmetrie entspricht. Σ ist eine unitäre Matrix, die für Zeitumkehr- und Inversionssymmetrie zusätzlich $\Sigma\Sigma^* = I$ bzw. $\Sigma^2 = I$ erfüllt. Wenn der Zustand invariant unter einer solchen Operation ist, dürfen sich die Koeffizienten in Gl. (3.26) nur um einem globalen Phasenfaktor ändern, was bedeutet, dass für die transformierten Tensoren

$$\sum_{\sigma'} \Sigma_{\sigma\sigma'} \tilde{\Gamma}^{\sigma'} = e^{i\theta} U^\dagger \Gamma^\sigma U, \quad (3.28)$$

gelten muss [15], wobei θ eine Phase und U eine unitäre, mit Λ kommutierende Matrix ist. Dies kann als Ausgangspunkt für die Kennzeichnung der SPT-Ordnung von Matrixproduktzuständen benutzt werden.

Durch Gl. (3.27) werden alle Symmetrien abgedeckt, die für die Haldane-Phase von Bedeutung sind. D_2 - und Zeitumkehrsymmetrie schützen jedoch nicht die verallgemeinerten Haldane-Zustände der erweiterten bosonischen und fermionischen Hubbard-Modelle (4.9) und (5.8), weshalb hier nur Inversionssymmetrie \mathcal{I} behandelt wird. Σ dient u.a. dazu, die Antikommutatorrelationen im Fermionen-Modell zu berücksichtigen. Für die Operation $\hat{c}_i \rightarrow \hat{c}_{L+1-i}$ müssen nach der in Abschnitt 3.1.3 beschriebenen Konvention die Reihenfolge aller Erzeugungsoperatoren umgedreht und anschließend innerhalb der Gitterplätze die Spin-Oben- und Spin-Unten-Operatoren vertauscht werden. Bei fester Teilchenzahl wird dies durch

$$\Sigma_{\sigma\sigma'} = \begin{cases} -\delta_{\sigma\sigma'}, & |\sigma\rangle = |\uparrow\downarrow\rangle \\ \delta_{\sigma\sigma'}, & \text{sonst} \end{cases} \quad (3.29)$$

erreicht.

Falls der größte Eigenwert der Transfermatrix nicht entartet ist, lässt sich zeigen, dass in Gl. (3.28) $\theta = 0$ oder π sein muss und die Matrix U entweder symmetrisch oder antisymmetrisch ist:

$$U^T = e^{i\phi} U \quad (3.30)$$

mit $\phi = 0$ oder π . Eine Änderung von ϕ oder θ ist nur durch einem Phasenübergang möglich, indem sich entweder der Zustand diskontinuierlich ändert (Übergang erster Ordnung) oder die anfangs gestellten Bedingungen, dass ein endliches χ ausreicht

und nur ein Eigenwert der Transfermatrix gleich 1 ist, zusammenbrechen (kontinuierlicher Übergang). Durch ϕ und θ werden demnach vier verschiedene Phasen definiert, die alle symmetrisch unter \mathcal{I} sind. Im Haldane-Zustand ist $\phi = \theta = \pi$, im topologisch trivialen Zustand $\phi = \theta = 0$. Die doppelte Entartung im Verschränkungsspektrum kann auf die Phase $\phi = \pi$ zurückgeführt werden [15]. In einem Zustand mit einer Einheitszelle aus zwei Gitterplätzen gibt es zwei Parameter $\phi_{1/2}$, sodass insgesamt 8 Phasen möglich sind [19].

Wendet man das Transformationsgesetz auf Gl. (3.26) für gerade L an, so ergibt sich:

$$|\psi\rangle' = \mathcal{I}|\psi\rangle = \sum_{\sigma_1, \dots, \sigma_L} B^T \Gamma^{\sigma_1} \Lambda \Gamma^{\sigma_2} \dots \Lambda \Gamma^{\sigma_L} B |\sigma_1, \dots, \sigma_L\rangle \quad (3.31)$$

$$\Gamma^{\sigma_i} = \sum_{\sigma'_i} \Sigma_{\sigma_i \sigma'_i} \Gamma^{\sigma'_i T}. \quad (3.32)$$

Falls der Zustand invariant unter Inversion ist, folgt

$$\begin{aligned} |\langle \psi | \psi' \rangle| &= |(B^T \otimes B^{T*}) \cdot \prod_{i=1}^{L-1} \left[\underbrace{\sum_{\sigma_i} (\Gamma^{\sigma_i} \Lambda \otimes \Gamma^{\sigma_i*} \Lambda)}_{=: T} \right] \cdot (\Gamma^{\sigma_L} B \otimes \Gamma^{\sigma_L*} B^*)| \\ &= 1, \end{aligned} \quad (3.33)$$

was für $L \rightarrow \infty$ impliziert, dass die verallgemeinerte Transfermatrix T einen Eigenwert vom Betrag 1 besitzt. Der dazugehörige rechte Eigenvektor sei X . Führt man die Kontraktionen vom rechten Rand beginnend für ausreichend viele Gitterplätze aus, konvergiert der entstehende Tensor gegen X . Einsetzen von Gl. (3.28)

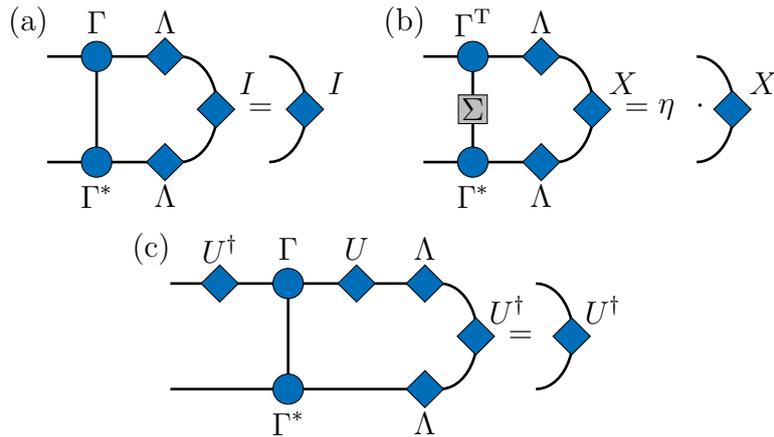


Abb. 3.3: (a) und (b) zeigen die dominanten Eigenvektoren der gewöhnlichen und verallgemeinerten Transfermatrizen. Für symmetrische Zustände gilt (c), weil U und Λ kommutieren. Da η nicht entartet ist, folgt $X = U^\dagger$ [19].

zeigt, dass bis auf einen eventuellen Phasenfaktor $X = U^\dagger$ gilt. Indem man für einen iMPS den dominanten Eigenvektor der verallgemeinerten Transfermatrix T berechnet, kann also die Matrix U bestimmt werden, die seine Transformation unter räumlicher Inversion beschreibt. Abhängig von ϕ ist U entweder symmetrisch oder antisymmetrisch, weshalb sich folgende Größe als topologische Invariante anbietet:

$$\mathcal{O}_{\mathcal{I}} = \begin{cases} 0, & |\eta| < 1 \\ \text{Sp}(UU^*)/\chi, & |\eta| = 1, \end{cases} \quad (3.34)$$

wobei η der größte Eigenwert von T ist. Für einen symmetrischen Zustand ist $\mathcal{O}_{\mathcal{I}} = \pm 1$ und das Vorzeichen unterscheidet zwischen topologisch trivialer und nicht-trivialer Phase. Bei gebrochener Symmetrie ist $\mathcal{O}_{\mathcal{I}} = 0$.

3.2 Dichtematrixrenormierungsgruppe

Die DMRG ist im Wesentlichen ein Verfahren zur Bestimmung von Grundzuständen eindimensionaler Quantensysteme. Um die exponentiell zunehmende Dimension des Hilbert-Raums handhaben zu können, wird der Grundzustand iterativ berechnet, indem man jeweils nur einen relativ kleinen Unterraum betrachtet. Es wird dabei eine Zerlegung in zwei Blöcke und, je nach Implementierung, ein oder zwei einzelne Gitterplätze verwendet. Die Näherung besteht darin, dass die Basen der Blöcke auf eine feste Größe χ begrenzt werden. Welche Basisvektoren zur Darstellung eines gegebenen Zustands $|\psi\rangle$ am besten geeignet sind, wird durch dessen reduzierte Dichtematrizen

$$\hat{\rho}_A = \sum_j \langle j_B | (|\psi\rangle\langle\psi|) | j_B \rangle \quad (3.35)$$

bestimmt, wobei A für den jeweiligen Block steht und die Zustände $|j_B\rangle$ eine Orthonormalbasis vom Rest des Systems B bilden. Die Eigenwerte w_α von $\hat{\rho}_A$ können als Wahrscheinlichkeit aufgefasst werden, A in dem dazugehörigen Eigenzustand vorzufinden. Im Allgemeinen sind A und B verschränkt, d.h. es gibt mehr als einen Eigenwert und $|\psi\rangle$ lässt sich nicht in einen Produktzustand zerlegen. Für festes χ wird der Fehler minimiert, wenn man als Basis die wahrscheinlichsten Zustände, also die Eigenvektoren zu den größten Eigenwerten wählt. Voraussetzung für eine genaue Näherung ist, dass die nach der Größe sortierten Eigenwerte w_i schnell genug abfallen. Für Grundzustände eindimensionaler Systeme mit Energielücke ergibt sich üblicherweise ein exponentieller Verlauf $w_\alpha \propto e^{-\alpha \cdot \text{const}}$ [16], weshalb die DMRG dort erfolgreich anwendbar ist.

In dem eigentlichen Algorithmus müssen die Basiszustände iterativ bestimmt werden, da die reduzierte Dichtematrix des exakten Grundzustands nicht zur Verfügung steht. Ein größerer Block wird schrittweise aufgebaut, indem jeweils ein Gitterplatz hinzugefügt und die Anzahl der Zustände von $d\chi$ auf χ reduziert wird. Um zu

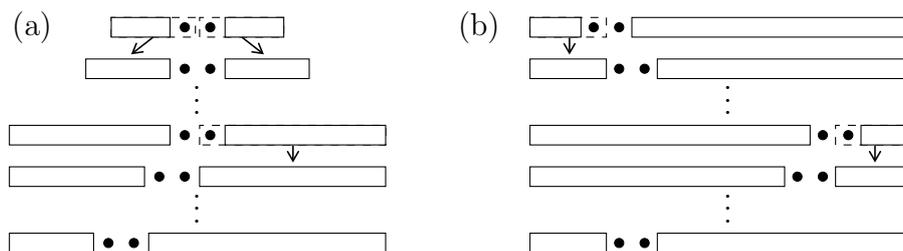


Abb. 3.4: (a) Vorbereitung der rechten Blöcke. (b) Die Iterationen in der DMRG mit fester Systemgröße bestehen aus jeweils einem Links- und Rechtssweep.

bestimmen, welche Basisvektoren sinnvoll sind, berechnet man eine Näherung des Grundzustands, wobei das System aufgeteilt wird in den aktuellen Block, den hinzuzufügenden Gitterplatz und dem Umgebungsblock, für den bereits eine reduzierte Basis vorhanden sein soll. Häufig wird noch ein weiterer freier Gitterplatz verwendet, um den zur Verfügung stehenden Hilbert-Raum zu vergrößern. Als Basis des neuen Blocks dienen die in dieser Näherung wahrscheinlichsten Eigenvektoren der reduzierten Dichtematrix. Die Prozedur wird fortgesetzt, bis der Umgebungsblock mit χ Basiszuständen exakt beschrieben werden kann. Hier vertauschen sich die Rollen der beiden Blöcke, wobei für die neuen Umgebungen die gerade berechneten Basen benutzt werden. Durch wiederholte Anwendung solcher Sweeps wird die Näherung des Grundzustands sukzessive verbessert. Man nennt dieses Verfahren Finite-System-Algorithmus.

Es wurde zunächst angenommen, dass für die Blöcke Startbasen, bzw. die Matrixelemente des Hamilton-Operators in diesen, vorhanden sind. Als Ausgangspunkt kann z.B. ein einfacher Produktzustand mit $\chi = 1$ benutzt werden. Üblicherweise beginnt die Rechnung jedoch mit dem Infinite-System-Algorithmus, in dem, von einem exakt berechenbaren System aus, jeweils zwei Gitterplätze hinzugefügt und anschließend auf die beiden Blöcke verteilt werden. Sobald die gewünschte Größe erreicht ist, startet die eigentliche Rechnung mit festem Gesamtsystem.

In der Regel beginnen die Blöcke am linken bzw. rechten Rand des Systems und bestehen aus nebeneinanderliegenden Gitterplätzen, was zu der in Abb. 3.4 gezeigten Konfiguration führt.

3.2.1 Formulierung mit Matrixproduktzuständen

Dass die Blöcke durch Hinzufügen einzelner Gitterplätze mit anschließender Trunkierung der Basis aufgebaut werden, führt zu einer MPS-Struktur des berechneten Zustands, wobei die Anzahl der Basisvektoren der Matrixdimension an der jeweiligen Bindung entspricht. In der Tat kann die Dichtematrixrenormierungsgruppe komplett im MPS-Formalismus implementiert werden, was z.B. in der Berechnung angeregter Zustände oder der Verallgemeinerung auf Systeme im thermodynamischen Limes vorteilhaft ist. Im Folgenden wird dies für die DMRG-Variante mit

zwei freien Gitterplätzen beschrieben. Der Hamilton-Operator soll dabei in Form eines Matrixproduktoperators mit Tensoren $W^{[i]}$ vorliegen.

Die Sweeps durch das System lassen sich als iterative Suche des Grundzustands innerhalb eines MPS-Ansatzes mit begrenzten Matrixdimensionen auffassen. Man passt nur zwei benachbarte Tensoren $A^{[j]}$ und $A^{[j+1]}$ zur Zeit an, sodass sich der Zustand wie folgt parametrisieren lässt:

$$|\psi\rangle = \sum_{\substack{a_{j-1}a_{j+1} \\ \sigma_j\sigma_{j+1}}} \Psi_{a_{j-1}a_{j+1}}^{\sigma_j\sigma_{j+1}} |\psi_{a_{j-1}}^l\rangle |\sigma^j\rangle |\sigma^{j+1}\rangle |\psi_{a_{j+1}}^r\rangle, \quad (3.36)$$

mit analog zu (3.8) und (3.9) definierten Blockzuständen $|\psi_{a_{j-1}}^l\rangle$ und $|\psi_{a_{j+1}}^r\rangle$. Wenn die Tensoren für $i < j$ links- und für $i > j + 1$ rechtsnormiert sind, bilden $|\psi_{a_{j-1}}^l\rangle$ und $|\psi_{a_{j+1}}^r\rangle$ Orthonormalsysteme der beiden Blöcke und die Minimierung der Energie entspricht der Lösung eines gewöhnlichen Eigenwertproblems:

$$H\Psi = E\Psi, \quad (3.37)$$

$$H_{a_{j-1}a_{j+1}a'_{j-1}a'_{j+1}}^{\sigma_j\sigma_{j+1}\sigma'_j\sigma'_{j+1}} = \sum_{b_{j-1}, b_j, b_{j+1}} \tilde{L}_{a'_{j-1}b_{j-1}a_{j-1}} W_{b_{j-1}b_j}^{\sigma_j\sigma'_j} W_{b_j b_{j+1}}^{\sigma_{j+1}\sigma'_{j+1}} \tilde{R}_{a'_{j+1}b_{j+1}a_{j+1}}, \quad (3.38)$$

$$\tilde{L} = \prod_{i=1}^{j-1} \sum_{\sigma_i\sigma'_i} \left(A^{\sigma'_i} \otimes W^{\sigma_i\sigma'_i} \otimes A^{\sigma_i*} \right), \quad (3.39)$$

$$\tilde{R} = \prod_{i=j+2}^L \sum_{\sigma_i\sigma'_i} \left(A^{\sigma'_i} \otimes W^{\sigma_i\sigma'_i} \otimes A^{\sigma_i*} \right), \quad (3.40)$$

wobei $a_{j-1}, a_{j+1}, \sigma_j$ und σ_{j+1} in Gl. (3.37) zu einem Index zusammengefasst sind. \tilde{L} und \tilde{R} enthalten bei festem Index $b_{j\pm 1}$ die Matrixelemente des dazugehörigen Blockoperators bezüglich der Blockzustände $|\psi_{a_{j-1}}^l\rangle$ und $|\psi_{a_{j+1}}^r\rangle$, H ist die Matrix des auf den Unterraum projizierten Hamilton-Operators. Zur Lösung des Eigenwertproblems wird ein iteratives Verfahren (z.B. Davidson) verwendet, wobei das Produkt der alten Tensoren $A^{[j]}$ und $A^{[j+1]}$ als Startvektor dient.

Nachdem der Tensor Ψ berechnet wurde, wird er zerlegt in

$$\Psi_{a_{j-1}a_{j+1}}^{\sigma_j\sigma_{j+1}} = \sum_{a_j=1}^{\chi_j} A_{a_{j-1}a_j}^{\sigma_j} A_{a_j a_{j+1}}^{\sigma_{j+1}}, \quad (3.41)$$

damit die MPS-Struktur des Zustands erhalten bleibt. Obige Gleichung kann für $\chi_j = \chi d$ immer exakt erfüllt werden, um jedoch die Matrixdimensionen konstant zu halten muss im Allgemeinen trunziert werden. Hierfür fasst man den Tensor Ψ als $\chi d \times \chi d$ -Matrix mit den Indizes $(a_{j-1}\sigma_j)$ und $(a_{j+1}\sigma_{j+1})$ auf und betrachtet die Singulärwertzerlegung

$$\Psi = U\Lambda V^\dagger, \quad (3.42)$$

$$U^\dagger U = I, \quad V^\dagger V = I, \quad (3.43)$$

$$\Lambda = \text{diag}(s_1, \dots, s_{\chi d}), \quad s_1 \geq s_2 \geq \dots \geq s_{\chi d}. \quad (3.44)$$

Gl. (3.44) entspricht der Linksnormierung von $U_{a_{j-1}a_j}^{\sigma_j}$ und Rechtsnormierung von $V_{a_j a_{j+1}}^{\dagger \sigma_{j+1}}$. Nach Abschnitt 3.1.1 ist somit eine Schmidt-Zerlegung des Systems gegeben und der Trunkierungsfehler ist am geringsten, wenn man den Index a_j auf die χ größten Einträge der Matrix Λ beschränkt und renormiert:

$$\Lambda' = \text{diag}(s'_1, \dots, s'_\chi, 0, \dots, 0), \quad (3.45)$$

$$s'_i = s_i / \left(\sum_{i=1}^{\chi} s_i^2 \right)^{\frac{1}{2}}, \quad i \leq \chi. \quad (3.46)$$

Die Singulärwerte sind die Quadratwurzeln aus den Eigenwerten der reduzierten Dichtematrizen für die Blöcke $\{1, \dots, j\}$ und $\{j+1, \dots, L\}$, die Spalten von U bzw. V sind die dazugehörigen Eigenvektoren in der kombinierten Basis aus Block- und lokalen Zuständen. Als Maß für den Trunkierungsfehler kann die Summe der vernachlässigten Eigenwerte der reduzierten Dichtematrix verwendet werden:

$$\epsilon_{\text{trunk}} = \sum_{i>\chi} s_i^2. \quad (3.47)$$

Im nächsten Schritt werden die Tensoren an einer benachbarten Bindung aktualisiert, d.h. $j \rightarrow j \pm 1$, je nachdem in welchem Sweep sich der Algorithmus befindet. Die in der Berechnung notwendigen Tensoren \tilde{L} und \tilde{R} sind aus dem vorigen Sweep bekannt (für den kleiner werdenden Block) oder werden über

$$\tilde{L}^{[j+1]} = \tilde{L}^{[j]} \cdot \sum_{\sigma_j \sigma'_j} \left(A^{\sigma'_j} \otimes W^{\sigma_j \sigma'_j} \otimes A^{\sigma_j*} \right), \quad \tilde{L}^{[1]} = 1, \quad (3.48)$$

bzw.

$$\tilde{R}^{[j-1]} = \sum_{\sigma_{j+1} \sigma'_{j+1}} \left(A^{\sigma'_{j+1}} \otimes W^{\sigma_{j+1} \sigma'_{j+1}} \otimes A^{\sigma_{j+1}*} \right) \cdot \tilde{R}^{[j]}, \quad \tilde{R}^{[L-1]} = 1, \quad (3.49)$$

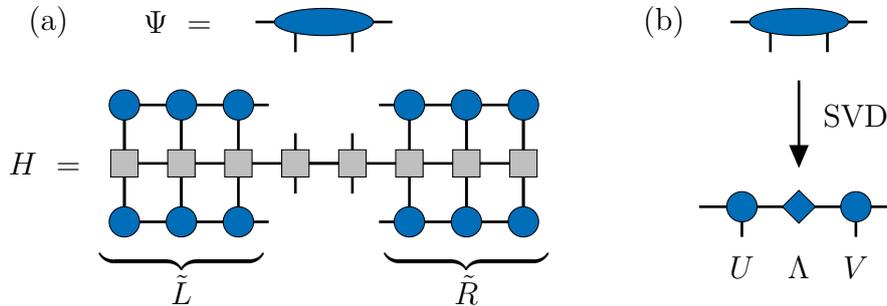


Abb. 3.5: (a) Wellenfunktion und Hamilton-Operator im reduzierten Hilbert-Raum, (b) Singulärwertzerlegung des neuen Tensors Ψ .

berechnet (für den wachsenden Block). Damit wieder orthonormale Basiszustände entstehen wählt man während der Rechtsbewegung als neue Tensoren

$$A_{a_{j-1}a_j}^{\sigma_j} = U_{a_{j-1}a_j}^{\sigma_j}, \quad (3.50)$$

$$A_{a_j a_{j+1}}^{\sigma_{j+1}} = s'_{a_j} V_{a_j a_{j+1}}^{\dagger \sigma_{j+1}}, \quad (3.51)$$

und während der Linksbewegung

$$A_{a_{j-1}a_j}^{\sigma_j} = U_{a_{j-1}a_j}^{\sigma_j} s'_{a_j}, \quad (3.52)$$

$$A_{a_j a_{j+1}}^{\sigma_{j+1}} = V_{a_j a_{j+1}}^{\dagger \sigma_{j+1}}. \quad (3.53)$$

3.2.2 Angeregte Zustände

Zusätzlich zum Grundzustand $|\psi_0\rangle$ können der DMRG niedrig liegende angeregte Zustände bestimmt werden. Das Verfahren ist dasselbe wie in der Berechnung von $|\psi_0\rangle$, nur dass man dem Hamilton-Operator einen zusätzlichen Term $g|\psi_0\rangle\langle\psi_0|$ hinzufügt [20]. Hierdurch wird die Energie von $|\psi_0\rangle$ um g angehoben, während die übrigen Eigenwerte und die Eigenzustände unverändert bleiben. Allgemeiner kann der n -te angeregte Zustand als Grundzustand des modifizierten Hamilton-Operators

$$\hat{H}' = \hat{H} + \sum_{i=0}^{n-1} g|\psi_m\rangle\langle\psi_m| \quad (3.54)$$

bestimmt werden, wobei $|\psi_m\rangle$ der m -te angeregte Zustand ist und g grösser als die Energiedifferenzen zwischen $|\psi_0\rangle$ und $|\psi_n\rangle$ sein muss.

Der Hamilton-Operator wird in einer DMRG-Rechnung dadurch definiert, wie er auf die Wellenfunktion $\Psi_{a_{j-1}a_{j+1}}^{\sigma_j\sigma_{j+1}}$ in Gl. (3.36) wirkt. Um die zusätzlichen Terme anwenden zu können, werden die Skalarprodukte $\langle\psi_m|\psi_0\rangle$ und die Projektionen $\hat{P}|\psi_m\rangle$ auf den aktuellen reduzierten Hilbert-Raum benötigt.

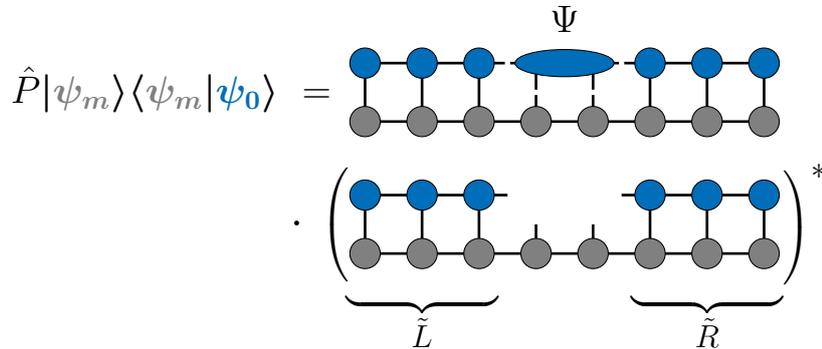


Abb. 3.6: Anwendung eines Projektionsoperators auf die Wellenfunktion in Gl. (3.36).

Zur effektiven Berechnung dieser Größen müssen, wie für die MPO-Form von \hat{H} , \tilde{L} - und \tilde{R} -Tensoren mitgeführt werden, in denen die Kontraktionen innerhalb der jeweiligen Blöcke bereits ausgeführt wurden. Die Wellenfunktion nach Anwendung einer der Operatoren lautet dann:

$$\Psi'_{a_{j-1}a_{j+1}}{}^{\sigma_j\sigma_{j+1}} = \langle \psi_m | \psi_0 \rangle \sum_{a'_{j-1}a'_j a'_{j+1}} \tilde{L}_{a_{j-1}a'_{j-1}}^* B_{a'_{j-1}a'_j}^{\sigma_j} B_{a'_j a'_{j+1}}^{\sigma_{j+1}} \tilde{R}_{a_{j+1}a'_{j+1}}^*, \quad (3.55)$$

$$\langle \psi_m | \psi_0 \rangle = \sum_{\substack{a'_{j-1}a'_j a'_{j+1} \\ \sigma_j\sigma_{j+1} a_{j-1}a_{j+1}}} \tilde{L}_{a_{j-1}a'_{j-1}} B_{a'_{j-1}a'_j}^{\sigma_j*} \Psi_{a_{j-1}a_{j+1}}^{\sigma_j\sigma_{j+1}} B_{a'_j a'_{j+1}}^{\sigma_{j+1}*} \tilde{R}_{a_{j+1}a'_{j+1}}, \quad (3.56)$$

$$\tilde{L} = \prod_{i=1}^{j-1} \sum_{\sigma_i} (A^{\sigma_i} \otimes B^{\sigma_i*}), \quad \tilde{R} = \prod_{i=j+2}^L \sum_{\sigma_i} (A^{\sigma_i} \otimes B^{\sigma_i*}), \quad (3.57)$$

wobei B^{σ_i} die Matrizen von $|\psi_m\rangle$ sind. Wenn Quantenzahlen Q berücksichtigt werden, lässt sich die oben beschriebene Methode für alle Werte von Q getrennt durchführen. Insbesondere kann der niedrigste Zustand jedes Sektors berechnet werden, ohne \hat{H} zu verändern.

Für das Verfahren mit modifiziertem Hamilton-Operator muss die MPS-Variante der DMRG benutzt werden, da ansonsten die Zustände nicht in der ursprünglichen Basis $|\sigma_1, \dots, \sigma_L\rangle$ vorliegen und somit nicht das Skalarprodukt zweier aus unterschiedlichen Rechnungen stammenden Zustände gebildet werden kann. In der klassischen Formulierung der DMRG erfolgt die Berechnung der angeregten Zustände stattdessen parallel zu der des Grundzustands, indem die Blockbasen für alle $|\psi_m\rangle$, $0 \leq m \leq n$ gleichzeitig optimiert werden, wodurch allerdings größere Matrixdimensionen χ erforderlich sind.

3.2.3 Unendliche Dichtematrixrenormierungsgruppe

Die mit der endlichen DMRG berechneten Größen müssen in der Regel für $L \rightarrow \infty$ extrapoliert werden. Häufig ist es daher günstiger, mit einer iMPS-Darstellung des Grundzustands direkt im thermodynamischen Limes zu arbeiten. Zur Bestimmung des iMPS kann die unendliche Dichtematrixrenormierungsgruppe verwendet werden. In der iDMRG wird das System schrittweise um jeweils eine Einheitszelle der Länge $2L_Z$ in der Mitte erweitert und die Energie unter der Einschränkung dass die übrigen Tensoren konstant bleiben, minimiert. Hierfür kann die endliche DMRG benutzt werden, indem man die Sweeps nur über die aktuelle Einheitszelle laufen lässt. Der Algorithmus verläuft wie bei einem System der Größe $L = 2L_Z$, lediglich die Randtensoren $\tilde{L}^{[1]}$ und $\tilde{R}^{[L-1]}$ in Gl. (3.48) und (3.49) müssen modifiziert werden, um auch die äußeren Gitterplätze zu berücksichtigen:

$$\tilde{L}^{[1]}(n+1) = \tilde{L}^{[1]}(n) \cdot \left[\prod_{i=1}^{L_Z} \sum_{\sigma_i \sigma'_i} \left(A^{\sigma'_i}(n) \otimes W^{\sigma_i \sigma'_i} \otimes A^{\sigma_i*}(n) \right) \right], \quad (3.58)$$

$$\tilde{R}^{[2L_Z-1]}(n+1) = \left[\prod_{i=L_Z+1}^{2L_Z} \sum_{\sigma_i \sigma'_i} \left(A^{\sigma'_i}(n) \otimes W^{\sigma_i \sigma'_i} \otimes A^{\sigma_i^*}(n) \right) \right] \cdot \tilde{R}^{[2L_Z-1]}(n), \quad (3.59)$$

$$\tilde{L}^{[1]}(0) = \tilde{R}^{[2L_Z-1]}(0) = 1, \quad (3.60)$$

$$A^{\sigma_i} = \begin{cases} \Lambda^{[i-1]} \Gamma^{\sigma_i} & \text{(linksnormiert), } i \leq L_Z \\ \Gamma^{\sigma_i} \Lambda^{[i]} & \text{(rechtsnormiert), } i > L_Z \end{cases}, \quad (3.61)$$

wobei n die Nummer der Iteration angibt. Nach jedem Schritt wird durch die Γ - und Λ -Tensoren der Einheitszelle ein iMPS $|\psi(n)\rangle$ definiert. Wenn die Folge der $|\psi(n)\rangle$ konvergiert kann der entsprechende iMPS, sofern es sich nicht nur um ein lokales Minimum der Energie handelt, als Näherung des Grundzustands verwendet werden. Aufgrund des Trunkierungsfehlers ist die Orthonormierung im berechneten iMPS zunächst nur näherungsweise erfüllt. Sie kann jedoch nachträglich exakt gemacht werden [5].

Da in jedem Schritt nur die neuen Tensoren angepasst werden, ergibt sich im Allgemeinen keine gute Näherung des endlichen Grundzustands. Aufgrund der endlichen Korrelationslänge eines MPS werden Fehler am Rand die Genauigkeit der Einheitszelle im thermodynamischen Limes zwar nicht beeinflussen, allerdings können sie dazu führen, dass der Algorithmus in einem falschen Zustand „steckenbleibt“. Es ist daher sinnvoll, die erste Einheitszelle bereits in eine Startumgebung einzubetten, wodurch sich der Zustand in eine bestimmte Richtung lenken oder die Konvergenz beschleunigen lässt.

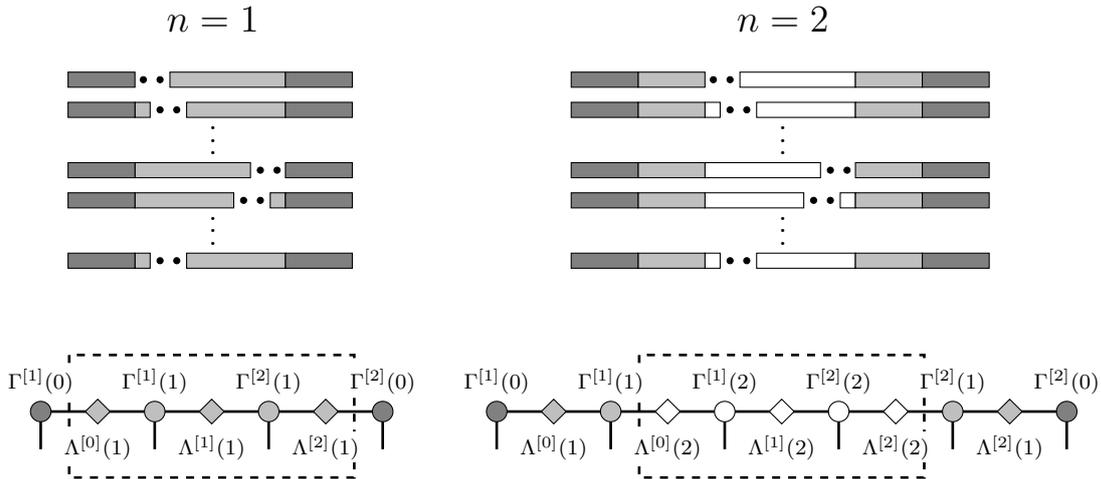


Abb. 3.7: Zwei Iterationen im iDMRG-Algorithmus. Im unteren Teil wird die Wellenfunktion für $L_Z = 1$ in der kanonischen Form gezeigt, wobei der umrandete Bereich die aktuellen, den iMPS definierenden Tensoren enthält. Falls der iMPS konvergiert ist, gilt $\Lambda^{[0]}(n) = \Lambda^{[2L_Z]}(n) = \Lambda^{[L_Z]}(n-1)$.

3.2.4 Unendliche Randbedingungen

Mit dem konvergierten iMPS lassen sich Erwartungswerte des Grundzustands, insbesondere Korrelationsfunktionen, bestimmen, ohne dass Ränder oder eine endliche Größe des Systems die Ergebnisse verfälschen. In einigen Anwendungen kann die endliche DMRG jedoch nicht ohne Weiteres durch iDMRG ersetzt werden. Insbesondere nicht, wenn keine Translationssymmetrie vorhanden ist, wie bei der Berechnung der Antwort des Systems auf eine lokale Störung. In diesem Zusammenhang wurden in Ref. [21] sogenannte „unendliche Randbedingungen“ (IBC) eingeführt. Dabei werden die Tensoren eines iMPS nur in einem endlichen Fenster als Variablen behandelt und ansonsten konstant gehalten, ähnlich wie bei einer Iteration im iDMRG-Algorithmus. Unter der Einschränkung, dass der Hilbert-Raum außerhalb des Fensters nur durch die Basiszustände des Ausgangszustands aufgespannt wird, sind Verfahren für endliche Systeme so auch im thermodynamischen Limes einsetzbar.

Um einen Matrixproduktoperator auf einen MPS mit solchen Randbedingungen anzuwenden, sind die entsprechenden Matrixelemente der linken und rechten Umgebung nötig, z.B. \tilde{L} und \tilde{R} für den Hamilton-Operator \hat{H} . Diese können mit dem in Ref. [22] beschriebenen Verfahren bestimmt werden, für \hat{H} ergeben sie sich jedoch bei ausreichend vielen Iterationen bereits als Nebenprodukt in der Berechnung des Grundzustands mit der iDMRG. Genau genommen divergieren \tilde{L} und \tilde{R} wegen der endlichen Energie pro Gitterplatz. Dieser Anteil hängt aber nur von den Tensoren außerhalb des Fensters ab und ist daher nicht von Bedeutung.

Der iMPS-Ansatz kann zwar auf angeregte Zustände erweitert werden [23], allerdings ist die Berechnung mit der herkömmlichen iDMRG dann nicht mehr möglich. Eine einfache Methode, die Systemgrößenabhängigkeit in der Bestimmung von Energielücken mit der DMRG zu reduzieren, ist die Verwendung der oben beschriebenen Randbedingungen [10]. Mit Systemgröße ist in hierbei die Anzahl der Gitterplätze L innerhalb des Fensters gemeint. Nachdem man mittels iDMRG die iMPS-Form des Grundzustands und die Randtensoren des Hamilton-Operators berechnet hat, können dieselben Verfahren wie für endliche Systeme benutzt werden. Im Gegensatz

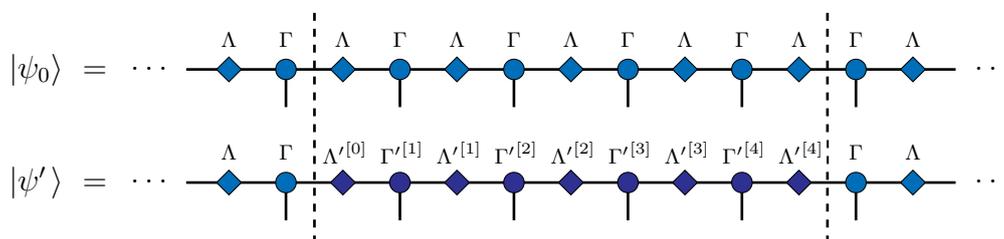


Abb. 3.8: Oben: Ein translationsinvarianter Grundzustand $|\psi_0\rangle$ wird als iMPS angenähert. Unten: Allgemeiner Zustand $|\psi'\rangle$ bei unendlichen Randbedingungen zu $|\psi_0\rangle$. Die Tensoren können sich nur innerhalb eines endlichen Fensters ändern, das hier aus $L = 4$ Gitterplätzen besteht.

zu diesen werden dabei nicht die Quantenzahlen des Gesamtsystems, sondern die entsprechenden Mittelwerte in dem Fenster vorgegeben.

Während man bei der Zeitentwicklung nach einer lokalen Störung argumentieren kann, dass sich die Tensoren in größeren Abständen nur geringfügig ändern, ist in der Bestimmung angeregter Zustände nicht klar, inwiefern die für den Grundzustand optimierte Basis noch geeignet ist. Eine Extrapolation $L \rightarrow \infty$ für die berechneten Energielücken ist daher immer noch erforderlich. In jedem Fall liefern die Lücken zu fester Fenstergröße jedoch eine obere Schranke. Wenn die iMPS-Näherung hinreichend genau ist, bleibt die Grundzustandsenergie beim Erhöhen der Fenstergröße nahezu konstant. Der Hilbert-Raum des Gesamtsystems wächst, wobei alle Zustände der kleineren Fenster noch enthalten sind, d.h. die angeregten Energien und damit die Lücken werden als Funktion von L monoton abfallen.

3.3 Verschränkungsentropie und zentrale Ladung

Wenn man aus einem System, das sich in einem reinen Quantenzustand $|\psi\rangle$ befindet, einen Teil A herausgreift, wird dieser durch eine reduzierte Dichtematrix ρ_A beschrieben. Ein Maß für die Verschränkung mit dem Rest des Systems B ist die Von-Neumann- oder Verschränkungsentropie

$$S_{AB} = -\text{Sp}(\rho_A \ln(\rho_A)) = -\sum_{\alpha} w_{\alpha} \ln(w_{\alpha}), \quad (3.62)$$

wobei w_i die Eigenwerte von ρ_A sind. Im thermodynamischen Limes ist S_{AB} für Grundzustände lokaler Hamilton-Operatoren mit Energielücke proportional zur Oberfläche zwischen A und B [16]. Für eindimensionale Systeme bedeutet dies, dass die Verschränkungsentropie $S(L/2, L)$ zwischen der linken und rechten Hälfte mit steigender Gitterlänge L gegen einen festen Wert konvergiert.

In kritischen eindimensionalen Systemen ist die Situation anders: $S(L/2, L)$ divergiert logarithmisch, mit einem von der Universalitätsklasse abhängigen Vorfaktor. Genauer gilt für die Verschränkungsentropie zwischen den Untersystemen $\{1, \dots, l\}$ und $\{l+1, \dots, L\}$ [24]:

$$S(l, L) = \begin{cases} \frac{c}{6} \ln((L/\pi) \sin(\pi l/L)) + s_0, & \text{OBC} \\ \frac{c}{3} \ln((L/\pi) \sin(\pi l/L)) + s_1, & \text{PBC} \end{cases} \quad (3.63)$$

$$(3.64)$$

bei offenen bzw. periodischen Randbedingungen. c ist darin die zentrale Ladung der zur Universalitätsklasse korrespondierenden konformen Feldtheorie, s_0 und s_1 sind nichtuniverselle Konstanten.

Um kritische Punkte zu kennzeichnen, ist es wünschenswert ihre zentrale Ladung zu kennen. Die DMRG ist zur Bestimmung von c geeignet, da im Verlauf eines Sweeps an jeder Bindung das Eigenwertspektrum berechnet wird, welches sofort die entsprechende Entropie liefert. c kann z.B. durch eine Approximation von $S(l, L)$ mit einer

Funktion gemäß Gl. (3.63) bzw. (3.64) ermittelt werden, wobei periodische Randbedingungen wegen des geringeren Einflusses der endlichen Systemgröße vorzuziehen sind. Geeigneter ist jedoch ein direktes Einsetzen in die aus Gl. (3.64) abgeleitete Beziehung

$$c_L^* = \frac{S(L/2 - 1, L) - S(L/2, L)}{\ln \left[\cos \left(\frac{\pi}{L} \right) \right]}, \quad (3.65)$$

da die unbekannt Konstante dort eliminiert wurde [25]. Die berechnete Größe wird c_L^* genannt, um sie von dem physikalischen c zu unterscheiden, das unabhängig von der Systemgrößen ist. An einer Bindung mit Matrixdimension χ ist die Verschränkungsentropie maximal $S = \ln(\chi)$. Während endliche Zustände auch in kritischen Systeme als MPS ausgedrückt werden können, ist eine genaue iMPS-Darstellung aufgrund der im thermodynamischen Limes divergierenden Verschränkungsentropie daher nicht möglich. Dies hatte sich bereits in den Korrelationsfunktionen gezeigt, die in einem iMPS für große Abstände zwangsläufig exponentiell abfallen. Aus dem Zusammenhang zwischen der Verschränkungsentropie an einem Schnitt durch den translationsinvarianten Grundzustand und der verwendeter Matrixdimension kann durch ein Finite-Entanglement-Scaling die zentrale Ladung c bestimmt werden [26]:

$$S_\chi = \frac{1}{\sqrt{\frac{12}{c} + 1}} \ln(\chi), \quad (3.66)$$

Voraussetzung hierfür ist allerdings ein sehr gut konvergierter iMPS. Aus diesem Grund ist eine Berechnung über die ebenfalls von χ abhängige künstliche Korrelationslänge ξ_χ besser geeignet:

$$S_\chi = \frac{c}{6} \ln(\xi_\chi) + s_2, \quad (3.67)$$

wobei s_2 eine nichtuniverselle Konstante ist und $1 \ll \xi_\chi \ll \xi_{\text{phys}}$ vorausgesetzt wird [17]. Anschaulich kann Gl. (3.67) verstanden werden, indem man in Gl. (3.63) die Systemlänge L durch ξ_χ ersetzt.

3.4 Berechnung von Spektralfunktionen mittels Zeitentwicklung

Spektralfunktionen können mit MPS-Verfahren direkt im Frequenzraum (dynamische DMRG [27], Lanczos-DMRG [28]) oder über die Fourier-Transformation der entsprechenden zeitabhängigen Größen berechnet werden. In dieser Arbeit wird letztere Methode verwendet, um dynamische Strukturfaktoren aus Korrelationsfunktionen

$$C_{ij}(\tau) = \langle \psi_0 | \hat{O}_j^\dagger(\tau) \hat{O}_i(0) | \psi_0 \rangle \quad (3.68)$$

zu bestimmen, wobei $\hat{O}(\tau)$ ein lokaler Operator im Heisenberg-Bild ist. Zunächst approximiert man hierfür den Grundzustand $|\psi_0\rangle$ als MPS und wendet den Operator \hat{O}_i an. Anschließend lässt man den neuen Zustand $|\tilde{\psi}_0\rangle = \hat{O}|\psi_0\rangle$ eine Reihe von kleinen Zeitschritten $\delta\tau$ durchlaufen, nach denen jeweils die Erwartungswerte

$$C_{ij}(\tau) = \langle \psi_0 | e^{i\hat{H}\tau} \hat{O}_j^\dagger e^{-i\hat{H}\tau} | \tilde{\psi}_0 \rangle = e^{iE_0\tau} \langle \psi_0(0) | \hat{O}_j^\dagger | \tilde{\psi}_0(\tau) \rangle, \quad (3.69)$$

$$\tau = n \delta\tau, \quad n = 0, 1, \dots$$

für alle gesuchten j berechnet werden. Da $|\psi_0(0)\rangle$ und $|\psi_0'(\tau)\rangle$ verschieden sind, ist dabei in dem Fenster eine Summation über alle physikalischen Indizes nötig. Außerhalb des Fensters sind die Tensoren beider Zustände hingegen identisch, sodass die Links- und Rechtsnormierungen ausgenutzt werden können:

$$\langle \psi_0(0) | \hat{O}_j^\dagger | \tilde{\psi}_0(\tau) \rangle = \sum_{\substack{\sigma_1, \dots, \sigma_L \\ \sigma_j'}} \langle \sigma_j | \hat{O}_j | \sigma_j' \rangle \text{Sp} \left(\tilde{A}^{\sigma_L \dagger} \dots \tilde{A}^{\sigma_j' \dagger} \dots \tilde{A}^{\sigma_1 \dagger} A^{\sigma_1} \dots A^{\sigma_j} \dots A^{\sigma_L} \right). \quad (3.70)$$

3.4.1 Zeitabhängige Dichtematrixrenormierungsgruppe

Die Zeitentwicklung entspricht der Anwendung des Operators $\hat{U}(\tau) = e^{-i\hat{H}\tau}$, der, wenn der Hamilton-Operator höchstens Nächste-Nachbar-Terme enthält, durch eine Suzuki-Trotter-Zerlegung angenähert werden kann. Zu diesem Zweck wird \hat{H} als eine Summe von Operatoren \hat{h}_j ausgedrückt, die jeweils nur auf die Gitterplätze j und $j+1$ wirken:

$$\hat{H} = \sum_j \hat{h}_j. \quad (3.71)$$

Für das Hubbard-Modell wäre z.B. die Aufteilung

$$\hat{h}_j = \begin{cases} -t(\hat{c}_{\uparrow j}^\dagger \hat{c}_{\uparrow, j+1} + \hat{c}_{\downarrow j}^\dagger \hat{c}_{\downarrow, j+1} + \text{H.c.}) + U(\hat{n}_{\uparrow j} \hat{n}_{\downarrow j} + \hat{n}_{\uparrow, j+1} \hat{n}_{\downarrow, j+1}), & j \text{ ungerade} \\ -t(\hat{c}_{\uparrow j}^\dagger \hat{c}_{\uparrow, j+1} + \hat{c}_{\downarrow j}^\dagger \hat{c}_{\downarrow, j+1} + \text{H.c.}), & j \text{ gerade} \end{cases} \quad (3.72)$$

denkbar. Die zu den geraden j gehörenden Terme kommutieren miteinander, genauso wie die zu den ungeraden j . Demnach kann \hat{H} in zwei Anteile

$$\hat{H} = \hat{H}_A + \hat{H}_B, \quad (3.73)$$

$$\hat{H}_A = \sum_{j \text{ ungerade}} \hat{h}_j, \quad \hat{H}_B = \sum_{j \text{ gerade}} \hat{h}_j,$$

aufgespalten werden, deren Exponentiale leicht berechenbar sind, denn $e^{-i\tau\hat{h}_i}$ entspricht lediglich einem Matrixexponential der Dimension $d^2 \times d^2$ und es gilt

$$e^{-i\tau\hat{H}_A} = \prod_{j \text{ ungerade}} e^{-i\tau\hat{h}_j}, \quad e^{-i\tau\hat{H}_B} = \prod_{j \text{ gerade}} e^{-i\tau\hat{h}_j}. \quad (3.74)$$

Durch geeignete Kombination der Operatoren in Gl. (3.74) können nun Suzuki-Trotter-Approximationen des Zeitentwicklungsoperators konstruiert werden, z.B. [29]

$$\hat{U}(\tau) = \begin{cases} e^{-i\tau\hat{H}_A}e^{-i\tau\hat{H}_B} + O(\tau^2) \\ e^{-i\frac{s}{2}\tau\hat{H}_A}e^{-is\tau\hat{H}_B}e^{i\frac{s-1}{2}\tau\hat{H}_A}e^{i(2s-1)\tau\hat{H}_B}e^{i\frac{s-1}{2}\tau\hat{H}_A}e^{-is\tau\hat{H}_B}e^{-i\frac{s}{2}\tau\hat{H}_A} + O(\tau^5) \end{cases}, \quad (3.75)$$

in erster und vierter Ordnung, wobei $s = (2 - 2^{\frac{1}{3}})^{-1}$ ist. Offensichtlich wird dabei die Unitarität von $\hat{U}(\tau)$ erhalten.

Nach der Anwendung eines Operators $e^{-i\hat{h}_j\tau}$ ist, wie bei der Lösung des Eigenwertproblems in der DMRG (3.37), die MPS-Struktur an der entsprechenden Bindung zerstört, d.h. die Tensoren $A_{a_{j-1}a_j}^{\sigma_j}$ und $A_{a_j a_{j+1}}^{\sigma_{j+1}}$ werden durch einen Tensor $\Psi_{a_{j-1}a_{j+1}}^{\sigma_j\sigma_{j+1}}$ ersetzt. Um die Zeitentwicklung an den anderen Bindungen fortsetzen zu können, ist eine Zerlegung von $\Psi_{a_{j-1}a_{j+1}}^{\sigma_j\sigma_{j+1}}$ gemäß Gl. (3.44) nötig. Ein exponentielles Wachstum der Matrixdimensionen wird verhindert, indem man sich auf die χ größten Singulärwerte beschränkt. Als Maß für den dadurch verursachten Fehler lässt sich wieder das Gewicht (3.47) der weggelassenen Basiszustände verwenden. Damit die Trunkierungsvorschrift optimal ist, müssen die übrigen A -Tensoren allerdings dieselben Normierungsbedingungen wie in der DMRG erfüllen. Es ist daher sinnvoll, die Operatoren $e^{-i\tau\hat{H}_A}$ und $e^{-i\tau\hat{H}_B}$ in Form eines Sweeps anzuwenden, was man als zeitabhängige DMRG oder tDMRG bezeichnet. Die Reihenfolge der Operatoren in einer Zerlegung erster Ordnung nach Gl. (3.75) lautet dann $e^{-i\tau\hat{h}_1}e^{-i\tau\hat{h}_3}\dots e^{-i\tau\hat{h}_{L-1}}e^{-i\tau\hat{h}_{L-2}}\dots e^{-i\tau\hat{h}_2}$. Da sich die Position jeweils um zwei Gitterplätze verschiebt, ist gegenüber der DMRG eine zusätzliche Singulärwertzerlegung notwendig, um mit der in Abschnitt 3.1.1 beschriebenen Methode die geeigneten Links- und Rechtsnormierungen zu erreichen.

Der ursprüngliche tDMRG-Algorithmus wird bei offenen Randbedingungen durchgeführt. Ziel ist es jedoch, die Spektralfunktionen eines unendlich ausgedehnten Systems zu bestimmen, weshalb man $C_{ij}(\tau)$ nur in einem Abstand von den Rändern berechnet, z.b. $j = L/2$, $|L/2 - i| \leq L/4$, und $C_{i+l,j+i}(\tau) = C_{ij}(\tau)$ für $l \in \mathbb{Z}$ annimmt (Translationssymmetrie im thermodynamischen Limes vorausgesetzt) [30]. Zudem ist die maximale Zeit, für die $C_{ij}(\tau)$ noch verwendbar ist, durch die Systemgröße beschränkt. Eine ursprünglich lokalisierte Störung verteilt sich nämlich mit der Zeit über das Gitter, bis sie schließlich auf den Rand trifft, wo eventuell Rückreflexionen auftreten. Diese bewirken, dass die Ergebnisse nicht mehr die Situation im thermodynamischen Limes widerspiegeln.

Indem man den Grundzustand als iMPS annähert und die unendlichen Randbedingungen verwendet, lassen sich die oben genannten Probleme vermeiden [21]. Der Operator \hat{O}_i bricht die Translationssymmetrie, sodass in der Zeitentwicklung streng genommen unendlich viele Tensoren aktualisiert werden müssten. Es genügt jedoch, sich auf die eines endlichen Teilsystems der Länge L , das den gestörten Gitterplatz enthält, zu beschränken. Außerhalb dieses Fensters werden die Tensoren konstant gehalten, was bedeutet, dass die Zeitentwicklung dort nur in dem ursprünglichen

Hilbert-Raum stattfindet. Man kann den effektiven Hamilton-Operator des Gesamtsystems wie folgt zerlegen:

$$\hat{H} = \hat{h}_l + \hat{h}_r + \sum_{j=1}^{L-1} \hat{h}_j, \quad (3.76)$$

wobei sich \hat{h}_l und \hat{h}_r aus einer Multiplikation der Randtensoren der iDMRG-Rechnung mit einem geeigneten Vektor aus lokalen Operatoren am Gitterplatz 1 bzw. L ergeben. \hat{h}_l und \hat{h}_r wirken auf die linke bzw. rechte Umgebung und den angrenzenden Gitterplatz des Fensters, weshalb sie mit den \hat{h}_j -Termen für gerade j kommutieren und in der Suzuki-Trotter-Zerlegung zu \hat{H}_B hinzugezählt werden. Im Zeitentwicklungsoperator ergeben sich dann zwei zusätzliche Matrizen der Dimension $d\chi \times d\chi$ für $e^{-i\tau\hat{h}_l}$ und $e^{-i\tau\hat{h}_r}$.

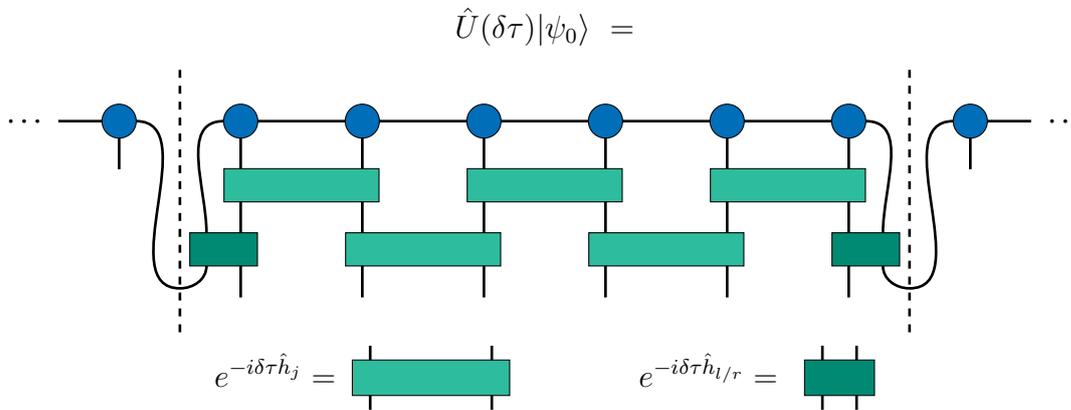


Abb. 3.9: Anwendung des Zeitentwicklungsoperators in einer Suzuki-Trotter-Zerlegung erster Ordnung bei unendlichen Randbedingungen.

3.4.2 Fehlerquellen

Im tDMRG-Algorithmus entstehen Fehler zum einen durch die Suzuki-Trotter-Zerlegung des Zeitentwicklungsoperators, zum anderen durch die Trunkierung der Matrixdimensionen. Der erstgenannte Fehler verhält er sich für eine Zerlegung n -ter Ordnung wie $O(\tau \delta\tau^n)$, d.h. er nimmt linear mit der simulierten Zeit τ zu und lässt sich durch die Ordnung der Zerlegung und die Schrittweite $\delta\tau$ kontrollieren. Dagegen wächst der Zweitgenannte nahezu exponentiell mit der Anzahl der Schritte, was die berechneten Daten nach einer gewissen Zeit unbrauchbar macht [31]. Indem man die Trunkierungsfehler durch Erhöhen der Matrixdimensionen χ verringert, kann dieser Effekt verlangsamt werden. In der Regel nimmt jedoch in einem gestörten Zustand die Verschränkung mit der Zeit zu, wodurch immer größere χ nötig werden, um den Trunkierungsfehler pro Schritt konstant zu halten. Maximal kann die

Verschrankungsentropie dabei linear mit τ steigen, was ein exponentiellen Wachstum von χ notwendig machen würde [16]. Für lange simulierte Zeiten ist die Rechnung daher nicht mehr praktikabel. Es gibt unterschiedliche Ansätze, die zugänglichen Zeiten zu vergrößern. Am einfachsten ist eine Extrapolation aus den berechneten Werten mit der im nächsten Abschnitt beschriebenen linearen Vorhersage.

Wenn ein iMPS als Ausgangspunkt dient, tritt ein zusätzlicher Fehler durch die Verwendung der unendlichen Randbedingungen auf, die den Hilbert-Raum außerhalb des Fensters einschränken. In Ref. [21] wurde jedoch durch einen Vergleich der Ergebnisse für unterschiedliche Fenstergrößen gezeigt, dass dieser Fehler zumindest innerhalb des Fensters vernachlässigbar ist.

Da in jedem Fall nur eine endliche Anzahl von Datenpunkten vorhanden ist, tritt bei der Fourier-Transformation zwangsläufig ein Leckeffekt auf, d.h. es wird die Faltung der eigentlichen Spektralfunktion mit der Fourier-Transformierten $\mathcal{F}[w](\omega)$ der verwendeten Fensterfunktion $w(\tau)$ berechnet. Je kleiner τ_{\max} ist, desto stärker wird das Spektrum dabei verschmiert. Ein einfaches Abschneiden der Korrelationsfunktionen bei $|\tau| = \tau_{\max}$ entspricht einem rechteckigen Fenster

$$w_r(\tau) = \begin{cases} 1, & |\tau| \leq \tau_{\max} \\ 0, & |\tau| > \tau_{\max} \end{cases} \quad (3.77)$$

mit Fourier-Transformierter

$$\mathcal{F}[w_r](\omega) = \frac{1}{\pi} \sin(\omega\tau_{\max})/\omega, \quad (3.78)$$

weshalb in diesem Fall zudem unerwünschte künstliche Oszillationen auftreten. Durch andere Funktionen $w(\tau)$, die sich für $\tau \rightarrow \tau_{\max}$ stetig null annähern, kann dieser Effekt vermieden werden.

3.4.3 Lineare Vorhersage

Unter Umständen kann aus den mit tDMRG berechneten Werten im Intervall $0 \leq \tau \leq \tau_{\max}$ eine Extrapolation zu größeren Zeiten ausgeführt und so die Auflösung im Frequenzraum verbessert werden. Die Beschreibung der Methode folgt Ref. [32]. Seien $N + 1$ Messwerte x_0, \dots, x_N gegeben, die im gleichen zeitlichen Abstand voneinander liegen. In der linearen Vorhersage wird nun der Ansatz

$$\tilde{x}_n = \sum_{i=1}^p a_i x_{n-i} \quad (3.79)$$

verwendet, wobei $p \leq N/2$ ein vorgegebener Parameter ist. Man wählt die Koeffizienten a_i so, dass die vorhandenen x_i in einem Intervall $\{N - N_{\text{fit}}, \dots, N\}$ möglichst gut reproduziert werden, z.B. durch Lösung des linearen Ausgleichsproblems

$$\min \left(\sum_{n=N-N_{\text{fit}}}^N |\tilde{x}_n - x_n|^2 \right). \quad (3.80)$$

Mit bekannten a_i lassen sich prinzipiell beliebig viele zusätzliche Datenpunkte erzeugen, die aber im Allgemeinen immer stärker von den korrekten Werten abweichen werden, sodass trotzdem eine Fensterfunktion nötig ist. Zur Interpretation bietet sich eine Schreibweise in Matrixform an:

$$\begin{pmatrix} x_{n+1} \\ x_n \\ x_{n-1} \\ \vdots \\ x_{n+2-p} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_n \\ x_{n-1} \\ x_{n-2} \\ \vdots \\ x_{n+1-p} \end{pmatrix} \cdot \underbrace{\begin{pmatrix} a_1 & a_2 & a_3 & \cdots & a_p \\ 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & 0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}}_{=: A}. \quad (3.81)$$

Aus dieser Gleichung geht hervor, dass die lineare Vorhersage einer wiederholten Anwendung der Matrix A auf den Vektor $\vec{x}_N = (x_N, \dots, x_{N+1-p})^T$ entspricht. Es ergibt sich daher eine Überlagerung exponentieller Terme mit den komplexen Eigenwerten α_i von A als Basis, was oszillierenden und exponentiell gedämpfte Beiträgen entspricht. Je größer die Anzahl p der Eigenwerte ist, desto genauer kann die Funktion theoretisch wiedergegeben werden. Gleichzeitig stehen weniger Gleichungen für die Bestimmung der Koeffizienten a_i zur Verfügung, sodass diese eventuell schlechter an den weiteren Verlauf der Funktion angepasst sind. Die optimale Wahl für p ist also nicht offensichtlich. Wenn der Ansatz geeignet ist, sollten die Ergebnisse jedoch nicht stark von p oder L_{fit} abhängig sein [32]. Eventuell tauchen auch unphysikalische Eigenwerte $|\alpha_i| > 1$ auf, die für $\tau \rightarrow \infty$ zu Divergenzen führen. In diesem Fall setzt man z.B. $\alpha_i \rightarrow \alpha_i/|\alpha_i|$.

Der implizierte exponentielle Ansatz ist vor allem dann geeignet, wenn das Spektrum von wenigen Polen dominiert wird. In kritischen eindimensionalen Systemen fallen die Korrelationsfunktionen mit einem Potenzgesetz bezüglich der Zeit ab. Die Überlagerung der exponentiellen Terme approximiert diesen Verlauf dann für begrenzte Zeiten.

4 Erweitertes Bose-Hubbard-Modell

Dieses Kapitel beschäftigt sich mit dem um abstoßende Nächste-Nachbar-Wechselwirkungen erweiterten Bose-Hubbard-Modell bei Temperatur $T = 0$. Wie auch im Modell mit Wechselwirkungen ausschließlich zwischen Teilchen am selben Gitterplatz, sind abhängig von den Parametern des Hamilton-Operators suprafluide und isolierende Zustände möglich. Die Ausweitung auf nächste Nachbarn führt jedoch dazu, dass im isolierenden Parameterbereich zwischen mehreren Phasen unterschieden werden kann. Neben den anschaulich leicht verständlichen Mott-Isolator-(MI) und Ladungsdichtewelle-Zuständen (CDW) taucht auch eine symmetriegeschützte topologische Phase auf. Diese wurde zuerst in Ref. [33] erkannt und durch näherungsweise Abbildung auf ein Spin-1-Modell als verallgemeinerte Haldane-Phase erklärt. Es folgten weitere Untersuchungen durch analytische und numerische Verfahren [34, 35], sodass dieser Zustand inzwischen gut verstanden ist. Wir benutzen die DMRG, um einige der theoretischen Vorhersagen zu überprüfen und experimentell relevante dynamische Größen zu berechnen. Im folgenden Abschnitt wird zunächst das Bose-Hubbard-Modell hergeleitet und anschließend der Einfluss der zusätzlichen Nächste-Nachbar-Wechselwirkung diskutiert.

4.1 Diskussion des Modells

Es werden identische Bosonen in einem eindimensionalen periodischen Potential V_G betrachtet. Zunächst sei das System endlich und bestehe aus L Gitterplätzen mit periodischen Randbedingungen. Eine mögliche Einteilchenbasis ist durch die Energieeigenfunktionen des Einteilchen-Hamilton-Operators gegeben. Aufgrund der Periodizität des Potentials handelt es sich um Bloch-Zustände $|\psi_{kn}\rangle$, wobei

$$k = -\pi + \frac{2\pi}{L}j, \quad j = 1, \dots, L \quad (4.1)$$

der Quasiimpuls und n der Bandindex ist. Aus den Bloch-Wellen können durch Fourier-Transformation für jedes Band lokalisierte Wannier-Zustände gebildet werden, deren Wellenfunktionen wie folgt miteinander zusammenhängen:

$$w_{in}(x - x_i) = w_{jn}(x - x_j), \quad i, j \in \{1, \dots, L\}. \quad (4.2)$$

Dabei gehören die Punkte x_i zu den durch das Potential definierten Gitterplätzen, d.h. $V_G(x - x_i) = V_G(x - x_j)$. Die Wannier-Zustände bilden eine alternative Orthonormalbasis, die besser zur Beschreibung der Wechselwirkung geeignet ist. Falls es eine ausreichend große Lücke zu dem ersten angeregten Band gibt, genügt es den

sich auf Zustände im niedrigsten Band zu beschränken. In diesem Fall ergibt sich genau ein Zustand pro Gitterplatz, da jedes Band aus L Quasiimpulsen besteht. Der Hamilton-Operator \hat{H} des Vielteilchensystems setzt sich aus Einteilchen-Termen durch die kinetische Energie und das äußere Potential und Zweiteilchen-Termen durch die Wechselwirkung U der Bosonen untereinander zusammen. Um \hat{H} in der Wannier-Basis anzugeben, werden die Matrixelemente

$$t_{ijnm} = \int w_{in}^*(x) \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + \hat{V}_G(x) \right) w_{jm}(x) dx, \quad (4.3)$$

$$U_{ijj'n'm'}^{i'j'n'm'} = \frac{1}{2} \int \int w_{in}^*(x) w_{i'n'}^*(y) U(x, y) w_{jm}(x) w_{j'm'}(y) dx dy \quad (4.4)$$

benötigt.

4.1.1 Lokale Wechselwirkung

Beschränkt man sich auf ein einziges Band und setzt zudem $t_{ij} = -t\delta_{1,|i-j|}$ und $U_{ijj'n'm'}^{i'j'n'm'} = U\delta_{ij}\delta_{i'j'}\delta_{ii'}$, gelangt man zum eindimensionalen Bose-Hubbard-Modell

$$\hat{H} = -t \sum_{i=1}^L (\hat{b}_i^\dagger \hat{b}_{i+1} + \hat{b}_{i+1}^\dagger \hat{b}_i) + \frac{U}{2} \sum_{i=1}^L \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1) - \mu \sum_{i=1}^L \hat{n}_i, \quad (4.5)$$

$$\hat{b}_{L+1}^{(\dagger)} = \hat{b}_1^{(\dagger)}. \quad (4.6)$$

Darin ist $\hat{n}_i = \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_i$, und es gelten die üblichen Kommutatorrelationen

$$[\hat{b}_i^\dagger, \hat{b}_j]_- = \delta_{ij}, \quad (4.7)$$

$$[\hat{b}_i^\dagger, \hat{b}_j^\dagger]_- = [\hat{b}_i, \hat{b}_j]_- = 0. \quad (4.8)$$

\hat{H} kommutiert mit dem Operator $\hat{N} = \sum_i \hat{n}_i$ der Gesamtteilchenzahl, sodass beide Operatoren gleichzeitig diagonalisierbar sind. Welchen Eigenwert N der Grundzustand hat, hängt von dem chemischen Potential μ ab. In der hier verwendeten kanonischen Betrachtungsweise wird stattdessen N vorgegeben und der Hilbert-Raum entsprechend eingeschränkt.

Sei nun die Dichte $\rho = N/L$ ganzzahlig. Für $U = 0$ sind alle Bosonen im niedrigsten Quasiimpulszustand $\tilde{b}_k^\dagger = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_j e^{ikj} \hat{b}_j^\dagger$, während sich für $t = 0$ eine feste Anzahl Teilchen an jedem Gitterplatz befinden, d.h. $\langle (\hat{n}_i - \rho)^2 \rangle = 0$. Die beiden Zustände sind im thermodynamischen Limes $L \rightarrow \infty$ die Grenzfälle zweier verschiedener Phasen. Oberhalb eines kritischen Verhältnisses $(U/t)_c$ bildet das System einen Mott-Isolator mit endlicher Energielücke ΔE_c für Ladungsanregungen. Bei kleineren U/t ist der Grundzustand ein Suprafluid (SF) und $\Delta E_c = 0$. In der SF-Phase divergiert die mittlere Anzahl der Teilchen im niedrigsten Impulszustand, eine makroskopische Besetzung liegt in 1D jedoch nicht vor, solange $U \neq 0$ ist.

Der Quantenphasenübergang zwischen SF und MI gehört zur Kosterlitz-Thouless-Universalitätsklasse [36]. Für $\rho = 1$ findet er Ref. [37] zufolge bei $(U/t)_c^{\rho=1} = 0.305^{-1}$ statt. Falls $\rho \notin \mathbb{N}$ befindet sich das System immer in einem suprafluiden Zustand. Im großkanonischen Ensemble nehmen die Mott-Isolatoren für $U/t < (U/t)_c$ endliche Intervalle $(\mu_-^\rho(U/t), \mu_+^\rho(U/t))$ des chemischen Potentials ein, zwischen denen die suprafluide Phase liegt. Bei $U/t = (U/t)_c^\rho$ und $\mu = \mu_-[(U/t)_c^\rho] = \mu_+[(U/t)_c^\rho]$ findet der Kosterlitz-Thouless-Übergang statt. Die übrigen Phasenübergänge, an denen sich die Dichten ändern, gehören zu einer anderen Universalitätsklasse.

4.1.2 Nächste-Nachbar-Wechselwirkung

Indem man $U_{i'j'}^{ij} = U\delta_{ij}\delta_{i'j'}\delta_{ii'} + V\delta_{ij}\delta_{i'j'}(\delta_{i',i+1} + \delta_{i',i-1})$ setzt, erhält man das erweiterte Bose-Hubbard-Modell mit Nächste-Nachbar-Wechselwirkungen:

$$\hat{H} = -t \sum_{i=1}^L (\hat{b}_i^\dagger \hat{b}_{i+1} + \hat{b}_{i+1}^\dagger \hat{b}_i) + \frac{U}{2} \sum_{i=1}^L \hat{n}_i (\hat{n}_i + 1) + V \sum_{i=1}^L \hat{n}_{i+1} \hat{n}_i. \quad (4.9)$$

Im Folgenden wird nur der Fall $\rho = 1$ betrachtet. Bei ausreichend kleinem Hüpfparameter t ist das System in einem isolierenden Zustand. Aufgrund der länger reichweitigen Wechselwirkung existieren neben dem MI nun jedoch weitere Phasen, in Abhängigkeit vom Verhältnisse V/U . Bei konstanten t und U sind im Grenzfall $V \rightarrow \infty$ die Bosonen so angeordnet, dass keine besetzten nächsten Nachbarn vorkommen, was zu einem zweifach entarteten Grundzustand führt. Der Unterraum wird durch zwei Zustände aufgespannt, die durch Verschiebung um einen Gitterplatz ineinander übergehen, d.h. die Translationssymmetrie des Systems ist spontan gebrochen. Dies gilt auch für endliche V/U und V/t , wo es Fluktuationen der lokalen Teilchenzahl gibt. Wenn man die Entartung durch eine infinitesimale Störung aufhebt, ist die Dichte an geraden und ungeraden Gitterplätzen verschieden. Entsprechend lässt sich der Ordnungsparameter

$$\mathcal{O}_{\text{CDW}} = \frac{1}{2} \langle \psi_0 | \hat{n}_i - \hat{n}_{i+1} | \psi_0 \rangle \quad (4.10)$$

definieren.

Zwischen der Ladungsdichtewelle und dem Mott-Isolator gibt es einen Haldane-Isolator (HI). Um dessen Existenz anschaulich zu begründen, wird die Anzahl der Bosonen pro Gitterplatz auf maximal $n_b = 2$ beschränkt, sodass Gl. (4.9) durch die Ersetzungen

$$S_i^z = n_i - 1 \quad (4.11)$$

auf ein Spin-1-Modell abgebildet werden kann. Der Hamilton-Operator lautet dann

$$\hat{H} = \frac{U}{2} \sum_i (\hat{S}_i^z)^2 + V \sum_i \hat{S}_i^z \hat{S}_{i+1}^z - t \sum_i (\hat{S}_i^+ \hat{S}_{i+1}^- + \hat{S}_i^- \hat{S}_{i+1}^+) \quad (4.12)$$

$$-t \sum_i \left[(\sqrt{2} - 1)^2 \hat{S}_{i+1}^z \hat{S}_{i+1}^- \hat{S}_i^+ \hat{S}_i^z - (\sqrt{2} - 1) \left(\hat{S}_{i+1}^z \hat{S}_{i+1}^- \hat{S}_i^+ + \hat{S}_{i+1}^- \hat{S}_i^+ \hat{S}_i^z \right) + \text{H.c.} \right],$$

wobei ein konstanter, zur Gesamtteilchenzahl proportionaler Term $V\hat{N}$ weggelassen wurde. Wenn man die zweite Zeile in Gl. (4.12) vernachlässigt ergibt sich das XXZ -Modell mit einer lokalen Anisotropie. Dieses besitzt bekanntermaßen eine symmetriegeschützte Haldane-Phase [15].

Das Vorzeichen der $\hat{S}^+\hat{S}^-$ -Terme ist hier allerdings umgekehrt. Wie in Ref. [15] angemerkt, wird dieser Unterschied durch die unitäre Transformation $e^{i\frac{\pi}{2}\sum_j(-1)^j\hat{S}_j^z}$, also einer Rotation der Spins um die z -Achse, aufgehoben. Dementsprechend ist die HI-Phase des erweiterten Bose-Hubbard-Modells durch die Inversionssymmetrie nach der Spinrotation geschützt, was auf die Symmetrie unter

$$\mathcal{I}' = e^{i\pi\sum_j\hat{S}_j^z}\mathcal{I} \quad (4.13)$$

führt. Durch Hinzunahme der übrigen Terme in Gl. (4.12) wird \mathcal{I}' nicht gebrochen. Im Bosonen-Modell gilt die Symmetrie, wenn die Gesamtteilchenzahl modulo 2 konstant ist. Da $N = L$ festgelegt wird, ist der Grundzustand invariant unter \mathcal{I}' . Zeitumkehr- und D_2 -Symmetrie sind hingegen gebrochen, sodass sie die HI-Phase nicht schützen können.

Bis jetzt wurden maximal $n_b = 2$ Bosonen pro Gitterplatz angenommen, was nur für starke Wechselwirkung gerechtfertigt ist. Um auch Zustände mit $n > 2$ über Gl. (4.11) auf ein Spinmodell abbilden zu können, muss der Betrag der lokalen Spins erhöht werden. In dem effektiven Modell entspricht $\rho = 1$ dann einer endlichen Magnetisierung. Numerische Untersuchungen haben gezeigt, dass der HI auch nach Erhöhen von n_b vorhanden ist [34].

4.2 Numerische Ergebnisse [1]

Prinzipiell können sich an einem Gitterplatz unendlich viele Bosonen befinden. In der numerischen Behandlung muss man die lokalen Hilbert-Räume jedoch auf endliche Dimensionen einschränken, was mit einer Begrenzung der Besetzungszahlen auf maximal n_b Bosonen erreicht wird. Gerechtfertigt wird dies durch die lokale abstoßende Wechselwirkung, die dazu führt, dass die Energie an einem Gitterplatz quadratisch mit der Besetzungszahl zunimmt und somit Zustände mit großen n unwahrscheinlich werden. Je geringer n_b , desto weniger aufwendig sind die Rechnungen. Welcher Wert für eine genaue Beschreibung des Systems ausreicht, hängt von den Parametern des Hamilton-Operators ab. Im Folgenden wird, wenn nicht anders angegeben, $n_b = 2$ gesetzt, da der Schwerpunkt auf den isolierenden Phasen liegt.

4.2.1 Phasendiagramm

Da in dem erweiterten Bose-Hubbard-Modell nur der verallgemeinerte Haldane-Isolator topologisch nichttrivial ist, kann er von dem Mott-Isolator und der La-

dungsdichtewelle anhand des Verschränkungsspektrums unterschieden werden. Am einfachsten ist dabei die Berechnung mittels iDMRG, d.h. man betrachtet die reduzierte Dichtematrix für einen Schnitt durch das translationsinvariante System im thermodynamischen Limes. Alternativ kann das Verschränkungsspektrum ϵ zwischen den zwei Hälften eines endlichen Systems verwendet werden, wobei es dann allerdings eine gewisse Abhängigkeit von der Systemgröße gibt. Bei periodischen Randbedingungen wird die Entartung vierfach, da es in diesem Fall zwei Berührungspunkte zwischen den beiden Untersystemen gibt [38].

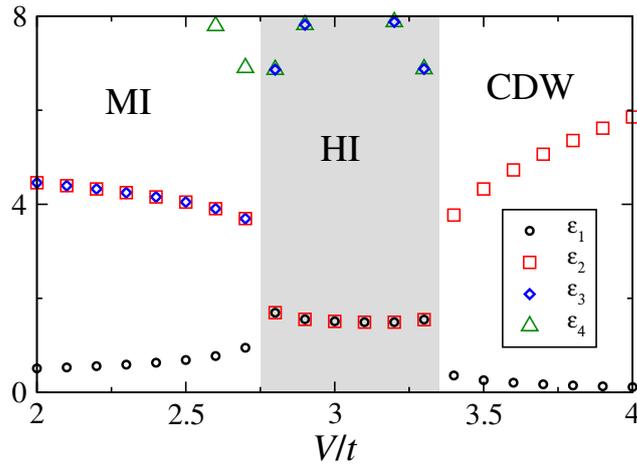


Abb. 4.1: Verschränkungsspektrum ϵ für $U/t = 5$. In der HI-Phase sind alle Eigenwerte entartet, weshalb $\epsilon_1 = \epsilon_2$ und $\epsilon_3 = \epsilon_4$ ist. Hingegen ist in der Ladungsdichtewelle und dem Mott-Isolator z.B. $\epsilon_1 \neq \epsilon_2$.

In Abb. 4.1 ist ϵ für $U/t = 5$ angegeben. Bei Abwesenheit von Nächsten-Nachbar-Wechselwirkungen $V/t = 0$ befindet sich das System in der MI-Phase und ϵ ist nicht entartet. Wenn man V/t weit genug erhöht, findet ein Wechsel zu einer Phase mit zweifach entartetem Spektrum statt, die als HI identifiziert wird. Noch größere V/t führen zu einem Übergang in die CDW-Phase, in der ϵ wieder trivial ist.

Mit dieser Methode können die isolierenden Phasen leicht voneinander abgegrenzt werden. Da die suprafluide Phase keine Energielücke besitzt, fällt sie außerhalb der obigen Klassifikation mittels des Verschränkungsspektrums. Sie kann jedoch z.B. anhand der zentralen Ladung erkannt werden, sodass sich insgesamt das Phasendiagramm in Abb. 4.2 ergibt. Oberhalb vom Kosterlitz-Thouless-Übergang $U/t \approx 1.5$ des Standard-Bose-Hubbard-Modells gibt es keine SF-Phase, sodass das System für alle $V/t \geq 0$ isolierend ist. Die HI-Phase wird mit zunehmender Stärke der Wechselwirkung immer schmaler, bleibt aber innerhalb des hier betrachteten Intervalls $0 \leq U/t \leq 8$ endlich. Höhere maximale Bosonenzahlen $n_b > 2$ verschieben den Kosterlitz-Thouless-Übergang zu größeren U/t und führen zu einer deutlich ausgeprägteren SF-Phase [35].

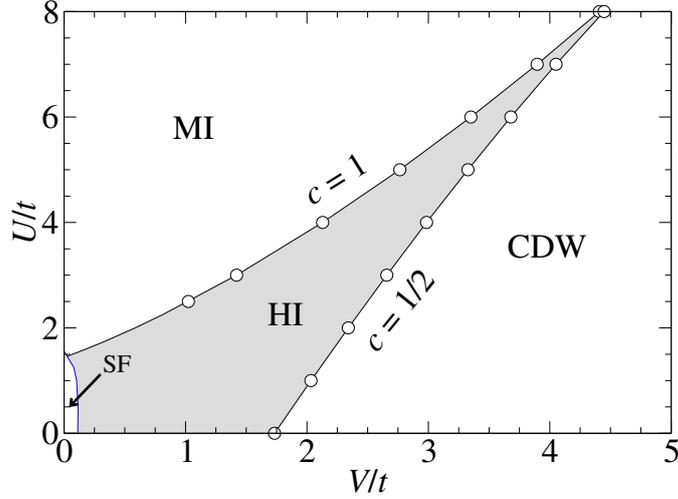


Abb. 4.2: Phasendiagramm des erweiterten Bose-Hubbard-Modells für Dichte $\rho = 1$ und $n_b = 2$. An den MI-HI- und MI-CDW-Übergängen ist die zentrale Ladung $c = 1$ bzw. $c = 0.5$ (siehe Abschnitt 4.2.3).

4.2.2 Topologischer Ordnungsparameter

Da der Haldane-Isolator durch eine modifizierte Inversionssymmetrie geschützt wird, muss der topologische Ordnungsparameter entsprechend angepasst werden. Die Rotation der Pseudospins um die z -Achse wird berücksichtigt, indem man in Gl. (3.28)

$$\Sigma_{\sigma\sigma'} = (-\delta_{\sigma\sigma'})^{n_\sigma+1}, \quad \hat{n}|\sigma\rangle = n_\sigma|\sigma\rangle \quad (4.14)$$

anstelle der Identitätsmatrix I setzt. Wegen $\Sigma^2 = I$ gilt der Rest der Herleitung in Abschnitt 3.1.4 auch für diese abgewandelte Symmetrie. Die Berechnung erfolgt aus der iMPS-Näherung des Grundzustands, indem mit einem iterativen Verfahren der dominante Eigenvektor der verallgemeinerten Transfermatrix T bestimmt wird.

Im MI und HI ist der modifizierte Ordnungsparameter $\mathcal{O}_{\mathcal{I}'} = 1$ bzw. -1 , d.h. die Symmetrie ist zwar in beiden Fällen erhalten, die Phasenfaktoren in Gl. (3.30) sind aber verschieden, sodass es einen scharfen Übergang zwischen den beiden Zuständen geben muss. Im Gegensatz dazu sind beide Zustände trivial bezüglich der gewöhnlichen Inversionssymmetrie, d.h. $\mathcal{O}_{\mathcal{I}} = 1$. Wegen der spontanen Brechung beider Symmetrien ist in der CDW-Phase der große Eigenwert von T kleiner als 1 und daher per Definition $\mathcal{O}_{\mathcal{I}'} = \mathcal{O}_{\mathcal{I}} = 0$. Demnach lassen sich alle isolierenden Phasen mit dem Ordnungsparameter $\mathcal{O}_{\mathcal{I}'}$ unterscheiden, wobei sich dieselben Phasengrenzen, wie aus dem Verschränkungsspektrum ergeben. Ein gewöhnlicher lokaler Ordnungsparameter wie der der CDW-Phase (4.10) kann die topologische Ordnung des HI-Zustands hingegen nicht messen.

Für $n_b > 2$ erhält man, von den genauen Übergangspunkten abgesehen, dieselben Ergebnisse. Demnach wird die Phase auch durch \mathcal{I}' geschützt, wenn das Modell nicht mehr als Spin-1-Kette verstanden werden kann.

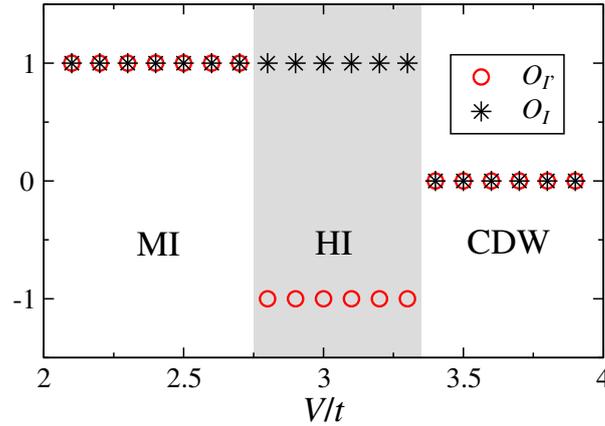


Abb. 4.3: Topologische Ordnungsparameter für $U/t = 5$. \mathcal{O}_I und \mathcal{O}_T konvergieren bereits für kleine Matrixdimensionen $\chi < 100$.

4.2.3 Zentrale Ladung

An den kontinuierlichen Phasenübergängen und im SF ist das System kritisch, so dass für die Verschränkungsentropie Gl. (3.63) und (3.64) gelten. Die jeweilige zentrale Ladung ist aus theoretischen Untersuchungen bekannt: auf der MI-HI- und HI-CDW-Grenze gilt $c = 1$ bzw. 0.5 [34], im SF $c = 1$ [36]. An den Phasengrenzen stimmen die Werte also mit denen im verwandten XXZ -Modell überein. $c = 0.5$ entspricht der Universalitätsklasse des zweidimensionalen Ising-Modells.

In der iDMRG wird die zentrale Ladung aus dem Zusammenhang (3.67) zwischen Verschränkungsentropie S_χ und künstlicher Korrelationslänge ξ_χ des Grundzustands

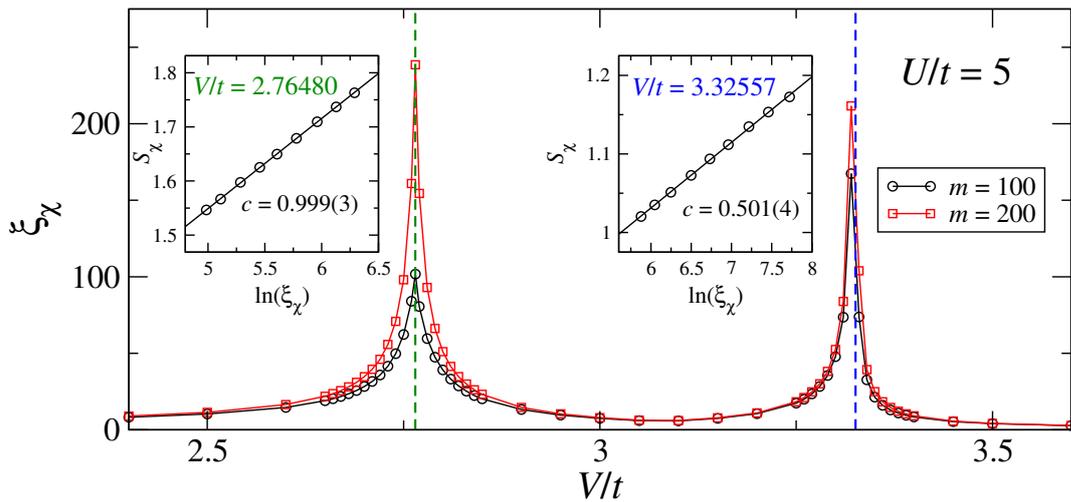


Abb. 4.4: Korrelationslänge und Finite-Entanglement-Scaling an der HI-MI- und HI-CDW-Grenze. Die zentrale Ladung wird durch lineare Regression berechnet. In Klammern ist der Standardfehler angegeben.

bestimmt. Abb. 4.4 zeigt die Korrelationslänge für feste Matrixdimensionen $\chi = 100$ und 200. Dort, wo eine Änderung der topologischen Invarianten und damit der Entartung des Verschränkungsspektrums stattfindet, besitzt ξ_χ ein starkes Maximum, das mit der verwendeten Matrixdimension χ zunimmt. Dies signalisiert eine divergierende physikalische Korrelationslänge und damit einen kontinuierlichen Phasenübergang. Wie erwartet ist die sich aus dem Finite-Entanglement-Scaling ergebende zentrale Ladung näherungsweise $c = 1$ an der HI-MI- und $c = 0.5$ an der HI-CDW-Grenze. Man muss die Rechnungen dabei sehr nahe am kritischen Punkt durchführen, um die lineare Abhängigkeit zwischen $\ln(\xi_\chi)$ und S_χ zu erhalten. Umgekehrt bietet dies ein genaues Verfahren zur Bestimmung der Übergangspunkte. Eine andere Möglichkeit, die Vorhersagen zu überprüfen, ist die Anwendung der Gl. (3.65) für ein System bei periodischen Randbedingungen. Auf diese Weise erhält man Funktionen $c_L^*(U, V, t)$, die Maxima an den Grenzen zwischen den isolierenden Zuständen und ein Plateau in der SF-Phase besitzen. Die gesuchten zentralen Ladungen können schon bei relativ geringen Systemgrößen L abgelesen werden, wobei sich wieder eine gute Übereinstimmung mit den Werten aus der Feldtheorie ergibt. Auch die Positionen der Maxima sind kaum von L abhängig, sodass sich, alternativ zur iDMRG-Methode, die Phasengrenzen aus $c_L^*(U, V, t)$ bestimmen lassen. Mit wachsendem L treten die Übergänge lediglich schärfer hervor, sodass für $L \rightarrow \infty$

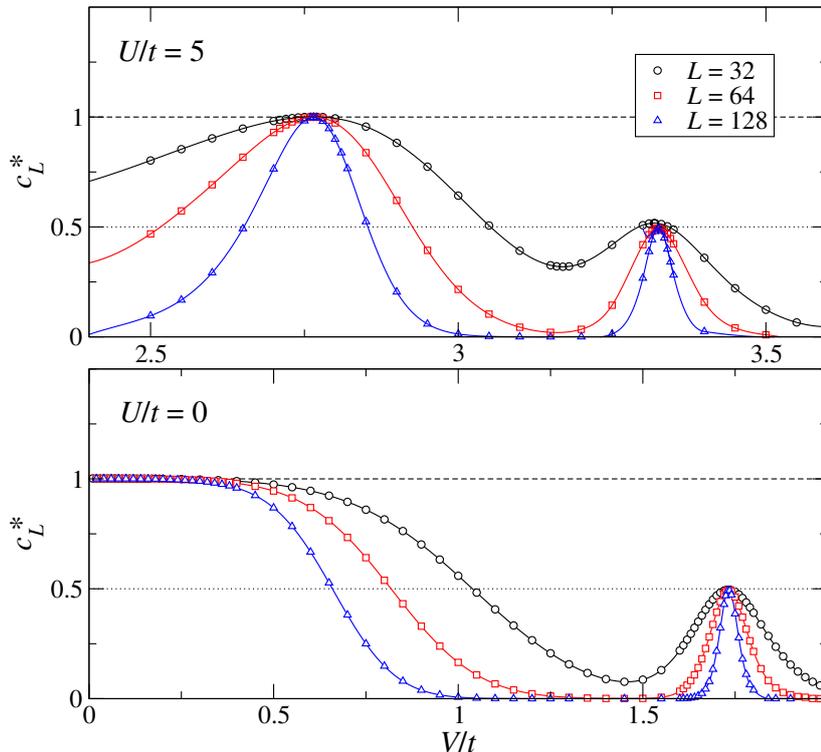


Abb. 4.5: Zentrale Ladung aus endlicher DMRG mit periodischen Randbedingungen.

nur an den kritischen Punkten $c_L^*(U, V, t) \neq 0$ wird. Die Übergänge zur suprafluiden Phase sind schwieriger zu lokalisieren, weil es dort kein markantes Maximum in $c_L^*(U, V, t)$ gibt und sich die Systemgrößenabhängigkeit daher stärker auswirkt.

4.2.4 Anregungsenergien

An den kontinuierlichen Phasenübergängen zwischen HI und CDW oder MI muss sich die Energielücke zu den angeregten Zuständen schließen. Man unterscheidet zwischen Einteilchen- und neutraler Lücke:

$$\Delta E_c = \lim_{L \rightarrow \infty} [E_0^L(L+1) + E_0^L(L-1) - 2E_0^L(L)], \quad (4.15)$$

$$\Delta E_n = \lim_{L \rightarrow \infty} [E_1^L(L) - E_0^L(L)], \quad (4.16)$$

wobei $E_n^L(N)$ die Energie des n -ten angeregten Zustands eines Systems aus L Gitterplätzen bei fester Teilchenzahl N ist. Es ist zu erwarten, dass die Einteilchenanregungen in der neutralen Lücke inbegriffen sind, wodurch $\Delta E_n < \Delta E_c$ gilt.

In Ref. [35] und [34] wurden ΔE_c und ΔE_n bereits für andere Begrenzungen n_b der Besetzungszahlen berechnet. Dabei stellte sich heraus, dass die neutrale Lücke an beiden Übergängen verschwindet, die Einteilchenlücke hingegen nur zwischen HI und MI. Um dies zu bestätigen verwendet wird die endliche DMRG und berechnen die Energiedifferenzen in Gl. (4.15) und 4.16) zunächst für feste L . Aus der Extrapolation $L \rightarrow \infty$ ergeben sich die gesuchten Anregungslücken. Es werden periodische Randbedingungen verwendet, wodurch sich Randzustände in der HI-Phase vermeiden lassen, die hier nicht zu den Anregungen gezählt werden.

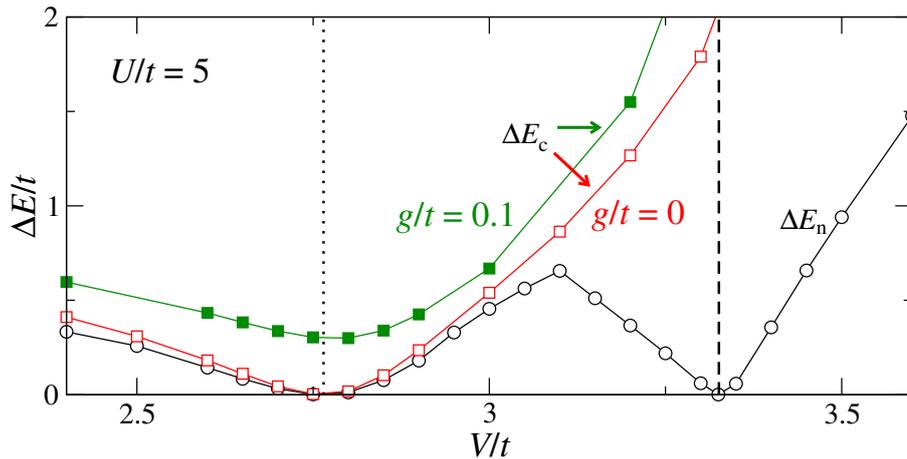


Abb. 4.6: Neutrale Lücke und Ladungslücke im thermodynamischen Limes extrapoliert für Systeme mit periodischen Randbedingungen. Durch eine symmetriebrechende Störung kann der scharfe Phasenübergang aufgehoben werden.

Da es in der CDW-Phase zwei entartete Grundzustände mit der derselben Teilchenzahl gibt, muss dort für die neutrale Lücke der Zustand mit der drittniedrigsten Energie berechnet werden.

Wie in Abb. 4.6 zu sehen, zeigen ΔE_c und ΔE_n qualitativ dasselbe Verhalten, wie für größere n_b , wobei sich die neutrale Lücke an dem HI-CDW-Übergang linear schließt. Der Haldane-Isolator ist nur dann notwendigerweise durch einen Phasenübergang vom Mott-Isolator getrennt, wenn die modifizierte Inversionssymmetrie im Hamilton-Operator erhalten bleibt. Eine symmetriebrechende Störung, z.B.

$$\delta\hat{H} = g \sum_j \left[(\hat{n}_j - \rho) \hat{b}_j^\dagger \hat{b}_{j+1} + \text{H.c.} \right], \quad (4.17)$$

führt im Allgemeinen dazu, dass die Haldane-Phase aufgehoben wird. Tatsächlich genügt ein kleiner Parameter $g/t = 0.1$, um dort, wo ansonsten der MI-HI-Übergang stattfindet, eine deutliche Anregungslücke zu öffnen.

4.2.5 Dynamischer Dichtestrukturfaktor

Das Bose-Hubbard-Modell wird u.a. durch ultrakalte bosonische Atome in optischen Gittern realisiert. Solche Systeme können mittels impuls aufgelöster Bragg-Spektroskopie untersucht werden, welche den dynamischen Strukturfaktor $S(k, \omega)$ liefert. Auf diese Weise wurde bereits der Übergang zwischen SF- und MI-Phase experimentell beobachtet [39]. Es stellt sich daher die Frage, inwiefern anhand von $S(k, \omega)$ auch zwischen den Phasen des erweiterten Modells, unterschieden werden kann.

Hier wird $S(k, \omega)$ unter der Annahme berechnet, dass sich das System in seinen Grundzustand befindet, d.h. die Temperatur sei $T = 0$. Die Definition des dynamischen Strukturfaktors lautet:

$$S(k, \omega) = \sum_{n \neq 0} |\langle \psi_n | \tilde{n}_k | \psi_0 \rangle|^2 \delta(E_0 - E_n + \omega), \quad (4.18)$$

$$\tilde{n}_k = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_j e^{ijk} \hat{n}_j, \quad (4.19)$$

wobei $|\psi_0\rangle$ und $|\psi_n\rangle$ den Grund- bzw. n -ten angeregten Zustand bezeichnen. Wenn die entsprechenden Matrixelemente endlich sind, zeigen sich also die Anregungsenergien des Systems in $S(k, \omega)$, wobei nur Zustände beitragen, deren Teilchenzahl mit der von $|\psi_0\rangle$ übereinstimmt. Der Beitrag des Grundzustands wurde in Gl. (4.18) weggelassen. Er würde wegen der endlichen Teilchendichte zu einem Term $L\delta(\omega)$ bei $k = 0$ führen. In der CDW-Phase wäre außerdem ein Delta-Peak bei $k = \pi$ vorhanden, da dort die Dichte an geraden und ungeraden Gitterplätzen verschieden ist. Um die Rechnung direkt im thermodynamischen Limes durchführen zu können, wird die in Abschnitt 3.4 beschriebene Methode angewendet. Es muss dabei folgende zeitabhängige Korrelationsfunktion bestimmt werden:

$$C_{ij}(\tau) = \langle \psi_0 | \hat{n}_j(\tau) \hat{n}_i(0) | \psi_0 \rangle. \quad (4.20)$$

Der Index i wird in die Mitte des Fensters gelegt und bleibt während der Rechnung fest. Aufgrund der Translationsinvarianz ist in den MI- und HI-Phasen nur ein Durchlauf erforderlich. In der CDW-Phase werden hingegen zwei Durchläufe benötigt, um sowohl die Korrelationen zwischen stark als auch die zwischen schwach besetzten Gitterplätzen zu erhalten.

Die Matrixdimensionen der iMPS-Näherung des Grundzustands sind zunächst auf $\chi = 400$ festgesetzt. Im Lauf der Zeitentwicklung werden sie auf maximal $\chi = 1000$ erhöht, sodass der Trunkierungsfehler ϵ_{trunk} pro Zeitschritt 10^{-6} nicht übersteigt. Für den Zeitentwicklungsoperator wird die in Gl. (3.75) angegebene Suzuki-Trotter-Zerlegung 4. Ordnung mit Schrittweiten $\delta\tau \leq 0.05/t$ verwendet. Die simulierte Zeit ist für alle Parameter $\tau_{\text{max}} = 15/t$.

Um die Genauigkeit der Methode in diesem Modell zu überprüfen, bietet sich ein Vergleich mit Ergebnissen der dynamischen DMRG an. Diese liefert zwangsläufig Spektren, die mit einer Lorentz-Funktion gefaltet sind. Dementsprechend wird als Fenster die Funktion

$$w_{\text{exp}}(\tau) = e^{-\eta|\tau|}w_{\text{r}}(\tau) = \begin{cases} e^{-\eta|\tau|}, & |\tau| \leq \tau_{\text{max}} \\ 0, & \text{sonst} \end{cases} \quad (4.21)$$

verwendet, deren Fourier-Transformation der Faltung einer Lorentz-Kurve mit

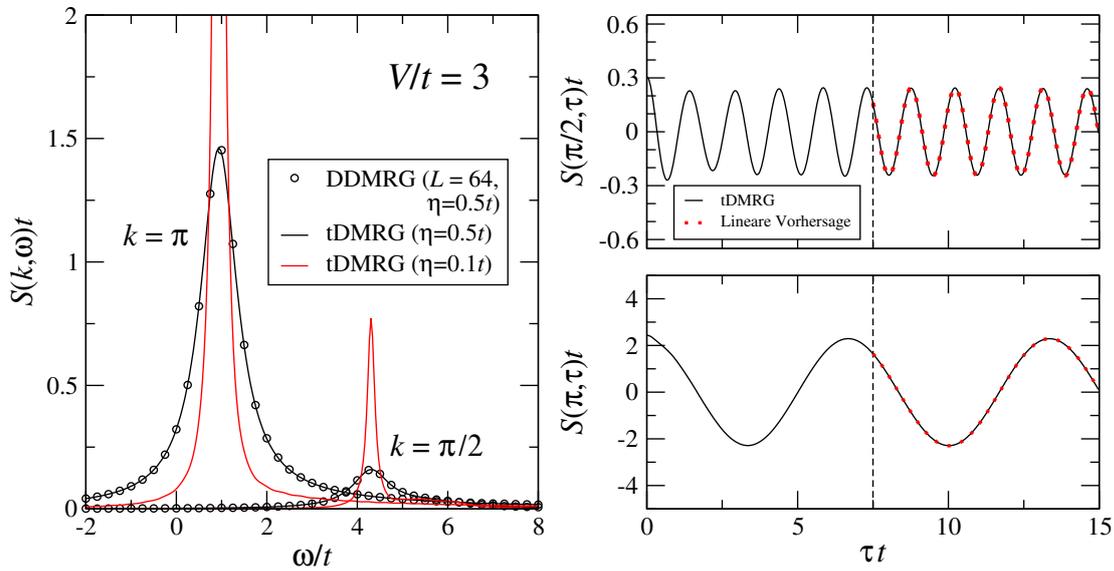


Abb. 4.7: Vergleich zwischen DDMRG und tDMRG (links) und Überprüfung der linearen Vorhersage (rechts) in der HI-Phase. Für das Spektrum bei $\eta = 0.1$ müssen die extrapolierten Werte hinzugenommen werden, da in $S(k, \omega)$ ansonsten falsche Oszillationen auftreten.

$\mathcal{F}[w_r](\omega)$ entspricht:

$$\mathcal{F}[w_{\text{exp}}](\omega) = (\mathcal{F}[e^{-\eta|\tau|}] * \mathcal{F}[w_r])(\omega), \quad (4.22)$$

$$= \left(\frac{\eta}{\pi(\omega^2 + \eta^2)} \right) * \left(\frac{\sin(\omega\tau_{\text{max}})}{\pi\omega} \right). \quad (4.23)$$

Für ausreichend große η bzw. τ_{max} ähnelt $\mathcal{F}[w_{\text{exp}}](\omega)$ der Lorentz-Funktion. Die zeitabhängigen Korrelationsfunktionen werden zusätzlich mit Nullen aufgefüllt um ein glatteres Spektrum zu erhalten (*zero padding*). Wie in Abb. 4.7 zu sehen, gibt es eine exzellente Übereinstimmung zwischen den beiden Methoden. Das tDMRG-Verfahren bietet hier jedoch eine größere Flexibilität, da der Parameter η nach der Rechnung angepasst werden kann. Zudem ist es möglich mit linearer Vorhersage eine Extrapolation für $\tau \rightarrow \infty$ zu versuchen, nachdem die Fourier-Transformation in den Impulsraum durchgeführt wurde. Die vorhergesagten und direkt berechneten Werte stimmen in den betrachteten Fällen gut überein. Demnach kann ein kleineres

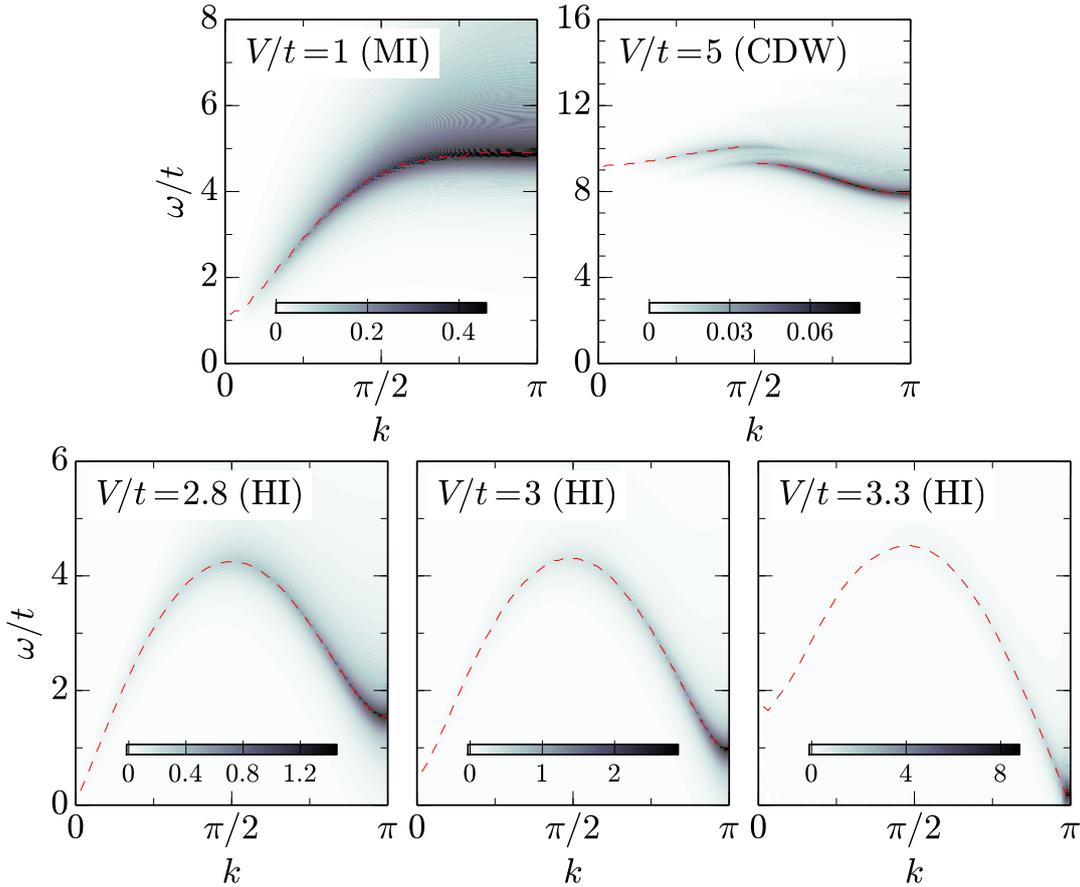


Abb. 4.8: Dynamischer Strukturfaktor im erweiterten Bose-Hubbard-Modell für $U/t = 5$ mit einer Verbreiterung $\eta/t = 0.25$. Die gestrichelten Linien zeigen die Maxima bei festem Quasiimpuls k .

η gewählt und so die Auflösung verbessert werden.

Der dynamische Strukturfaktor zeigt in den drei isolierenden Phasen sehr unterschiedliches Verhalten. Für festen Quasiimpuls k ist das spektrale Gewicht, von der CDW-Phase abgesehen, jeweils in einem Maximum konzentriert. Die dazugehörigen Dispersionen $\omega(k)$ sind zusammen mit den Dichteplots in Abb. 4.8 angegeben. Im MI nimmt $\omega(k)$ im Bereich $0 \leq k \leq \pi$ monoton zu, wobei die Kurve ab $k \approx \pi/2$ abflacht und näherungsweise den Wert U annimmt. Dies entspricht der Energie einer Einteilchenanregung für $t = 0$, ähnlich wie im gewöhnlichen Bose-Hubbard-Modell [40]. Oberhalb von dem Hauptmaximum besitzt $S(k, \omega)$ für $k \gtrsim \pi/2$ zusätzlich einen kontinuierlicher Anteil.

Im HI fällt die Dispersion für große Quasiimpulse ab, sodass ihr Maximum bei $k = \pi/2$ liegt. An den kritischen Punkten spiegelt sich die verschwindende Energielücke in einem Minimum $\omega(k_{\min}) \approx 0$ wieder. Interessanterweise schließt sich die Lücke an den HI-MI- und HI-CDW-Übergängen bei unterschiedlichen Quasiimpulsen $k_{\min} = 0$ und $k_{\min} = \pi$.

Anders als im MI und HI, sind in der CDW-Phase zwei Maxima erkennbar. Für $k < \pi/2$ und $k > \pi/2$ ist das spektrale Gewicht jeweils in einem dieser beiden Zweige konzentriert. Dass die Kurve flacher als in den anderen Phasen verläuft, dürfte auf die insgesamt stärkere Wechselwirkung zurückzuführen sein.

Zusammenfassend lässt sich sagen, dass $S(k, \omega)$ dem longitudinalen Spin-Strukturfaktor des XXZ -Modells für $S = 1$ ähnelt. Insbesondere das Schließen der Anregungslücke bei $k = 0$ und $k = \pi$ wird in den Haldane-Phasen beider Modelle beobachtet [41].

5 Erweitertes Hubbard-Modell

In diesem Kapitel wird ein weiteres verallgemeinertes Hubbard-Modell untersucht, wobei die Teilchen Spin-1/2-Fermionen anstelle von Bosonen sind. Die fermionische Variante von (4.9) besitzt ein grundsätzlich anderes Phasendiagramm, ohne symmetriegeschützte topologische Phase. Hier wird daher eine weitere, spinabhängige Nächste-Nachbar-Wechselwirkung hinzugefügt, die nur an jeder zweiten Bindung wirkt und somit die Einheitszelle auf zwei Gitterplätze vergrößert. Durch diesen Term wird schon bei kleinen Kopplungskonstanten ein Großteil des Phasendiagramms durch einen Haldane-Isolator ersetzt. Im Grenzfall starker Spinwechselwirkung ist ein Verständnis in Analogie zur Haldane-Phase von Spin-1-Ketten möglich. Die Teilchenzahlfluktuationen werden im Allgemeinen jedoch zu abweichenden Eigenschaften führen.

5.1 Diskussion des Modells

Das einfachste Modell für Elektronen in einem periodischen Potential, das die gegenseitige Coulomb-Wechselwirkung explizit berücksichtigt, ist das Hubbard-Modell mit dem Hamilton-Operator

$$\hat{H}_{tU} = -t \sum_{i=1}^L \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} (\hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{i+1,\sigma} + \hat{c}_{i+1,\sigma}^\dagger \hat{c}_{i\sigma}) + U \sum_{i=1}^L \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow}, \quad (5.1)$$

$$\hat{c}_{L+1}^{(\dagger)} = \hat{c}_1^{(\dagger)} \quad (\text{PBC}). \quad (5.2)$$

wobei die Erzeugungs- und Vernichtungsoperatoren die fermionischen Vertauschungsrelationen

$$[\hat{c}_{i\sigma}^\dagger, \hat{c}_{j'\sigma'}]_+ = \delta_{ij} \delta_{\sigma\sigma'} \quad (5.3)$$

$$[\hat{c}_{i\sigma}, \hat{c}_{j'\sigma'}]_+ = [\hat{c}_{i\sigma}^\dagger, \hat{c}_{j'\sigma'}^\dagger]_+ = 0 \quad (5.4)$$

erfüllen und der Besetzungszahloperator durch $\hat{n}_{i\sigma} = \hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{i\sigma}$ definiert ist. Gl. (5.1) wird analog zum Bose-Hubbard-Modell (4.5) hergeleitet, indem man die entsprechenden Ausdrücke für Fermionen benutzt. Bei den Spin-1/2-Teilchen kann es sich auch um Atome in einem optischen Gitter handeln.

\hat{H} wird in der Wannier-Basis angegeben, d.h. der zu $\hat{c}_{i\sigma}^{(\dagger)}$ gehörende Zustand ist an einem Gitterplatz i lokalisiert. Der Hilbert-Raum wurde auf ein einziges Energieband in der Bloch-Basis beschränkt, was zwei Zuständen pro Gitterplatz mit den Spinausrichtungen \uparrow und \downarrow entspricht. Zudem sind nur Hüpfmatrixelemente zwischen nächsten Nachbarn und lokale Wechselwirkungen berücksichtigt.

Ohne Wechselwirkung geht der Hamilton-Operator (5.1) in das Tight-Binding-Modell über und die Elektronen füllen die niedrigsten Quasiimpulszustände auf. In einer Dimension ist die exakte Lösung auch für endliches U bekannt [42]. Bei Halbfüllung ($\sum_i (\hat{n}_{i\uparrow} + \hat{n}_{i\downarrow})|\psi\rangle = L|\psi\rangle$) führt ein $U > 0$ dazu, dass das System isolierend wird, was sich in einer Lücke zu Ladungsanregungen zeigt. Spinanregungen sind hingegen für beliebig kleine Energien möglich. Den quasi langreichweitig antiferromagnetisch geordneten Grundzustand bezeichnet man als Spindichtewelle (SDW).

5.1.1 Nächste-Nachbar-Wechselwirkung

Fügt man eine Nächste-Nachbar-Wechselwirkung hinzu, so lautet der Hamilton-Operator für ein System der Länge L :

$$\hat{H}_{tUV} = \hat{H}_{tU} + V \sum_{i=1}^L \hat{n}_{i+1} \hat{n}_i, \quad (5.5)$$

$$\hat{n}_i = \hat{n}_{i\uparrow} + \hat{n}_{i\downarrow}. \quad (5.6)$$

Dieses Modell kann nicht mehr exakt gelöst werden, das Phasendiagramm ist jedoch aus mehreren numerischen Untersuchungen durch Quanten-Monte-Carlo [43] und DMRG [44] bekannt. Für positive V/t und U/t und bei Halbfüllung gibt es im thermodynamischen Limes drei verschiedene Phasen. Im Bereich $V/U \lesssim 1/2$ ist der Grundzustand, ähnlich wie im Hubbard-Modell, eine Spindichtewelle. Bei ausreichend großer Nächster-Nachbar-Wechselwirkung liegt hingegen eine Ladungsdichtewelle vor, in der die Teilchenzahldichte an geraden und ungeraden Gitterplätzen verschieden ist. Demnach ist die Translationssymmetrie spontan gebrochen und der Grundzustand zweifach entartet. Zwischen SDW und HI existiert eine schmale Region, in der der Grundzustand eine *bond order wave* (BOW) ist. Auch hier wird die Translationssymmetrie gebrochen, allerdings zeigt sich dies an der kinetischen Energiedichte der Bindungen:

$$\mathcal{O}_{\text{BOW}} = |\langle \hat{c}_{i+1,\sigma}^\dagger \hat{c}_{i\sigma} + \hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{i+1,\sigma} - (\hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{i-1,\sigma} + \hat{c}_{i-1,\sigma}^\dagger \hat{c}_{i\sigma}) \rangle| > 0. \quad (5.7)$$

Sowohl in der CDW- als auch in der BOW-Phase gibt es eine Energielücke für alle Anregungen.

Zwei Punkte des Phasendiagramms sind von besonderer Bedeutung. Der trikritische Punkt $(U/t, V/t)_t$ teilt die CDW-BOW-Grenze in einen Bereich, auf dem der Phasenübergang kontinuierlich, und einen Abschnitt, auf dem er erster Ordnung ist. Am kritischen Endpunkt $(U/t, V/t)_e$ laufen die CDW-BOW- und SDW-BOW-Grenzen zusammen, sodass oberhalb von ihm keine BOW-Phase existiert. Es gibt unterschiedliche Ergebnisse für die Positionen der beiden Punkte, nach Ref. [44] ist $(U/t, V/t)_e = (9.25, 4.76)$ und $(U/t, V/t)_t = (5.89, 3.10)$.

5.1.2 Spinwechselwirkung

Um eine topologische Phase zu erzeugen, wird das Modell noch um eine künstliche Spin-Spinwechselwirkung an jeder zweiten Bindung erweitert:

$$\hat{H}_{tUVJ} = \hat{H}_{tUV} + J \sum_{i=1}^{L/2} \hat{\mathbf{S}}_{2i-1} \hat{\mathbf{S}}_{2i}. \quad (5.8)$$

Dabei ist der Spinoperator definiert durch

$$\hat{\mathbf{S}}_i = \frac{1}{2} \sum_{\sigma\sigma'} \hat{c}_{i\sigma}^\dagger \boldsymbol{\sigma}_{\sigma\sigma'} \hat{c}_{i\sigma'}, \quad (5.9)$$

$$\boldsymbol{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)^T, \quad (5.10)$$

mit den Pauli-Matrizen $\sigma_{x,y,z}$. Zur Unterscheidung der beiden erweiterten Hamilton-Operatoren, werden die Bezeichnungen tUV - und $tUVJ$ -Modell verwendet. Die in der BOW-Phase spontan gebrochene Symmetrie wird durch die zusätzliche Wechselwirkung explizit aufgehoben.

Um den Effekt des neuen Terms zu verstehen bietet es sich an, zunächst den Grenzfall $U \gg t, V$ zu betrachten, in dem Gl. (5.8) durch ein Spin- $\frac{1}{2}$ -Modell angenähert werden kann:

$$\hat{H}_{\text{eff}} = J_{\text{eff}} \sum_{i=1}^L \hat{\mathbf{S}}_{i+1} \hat{\mathbf{S}}_i + J \sum_{i=1}^{L/2} \hat{\mathbf{S}}_{2i-1} \hat{\mathbf{S}}_{2i}, \quad (5.11)$$

$$J_{\text{eff}} = \frac{4t^2}{U - V}. \quad (5.12)$$

Wenn man $|J_{\text{eff}}/J| \ll 1$ annimmt und den effektiven Spinterm vernachlässigt, geht das System in eine Reihe entkoppelter Zweigitterplatzprobleme über, deren Grundzustand für positive J der Singulett-Zustand, für negative ein Triplett-Zustand ist. Im Fall $J < 0$ führt ein positives J_{eff} in erster Ordnung der Störungstheorie zu einer antiferromagnetischen Wechselwirkung $J_{\text{eff}}/4$ zwischen effektiven Spin-1-Teilchen, weshalb man in Analogie zu dem Spin-1-Heisenberg-Modell eine Haldane-Phase erwartet. Tatsächlich wurde durch Berechnung topologischer Invarianten gezeigt, dass das Modell zumindest für $V = 0$ die charakteristischen Randzustände aufweist [45]. Des Weiteren wurde in Ref. [46] das Peierls-Hubbard-Modell unter dem Gesichtspunkt symmetriegeschützter topologischer Phasen untersucht und die Existenz eines Haldane-Isolators bei Inversionssymmetrie \mathcal{I} nachgewiesen. Diese lässt sich, wenn \mathcal{I} gebrochen wird, adiabatisch in einen topologisch trivialen Bandisolator überführen ohne Zeitumkehr- und D_2 -Symmetrie aufzuheben. Randzustände und Stringordnung sind daher nicht mehr notwendigerweise vorhanden. Man kann den alternierenden Hüpfparameter dieses Modells schreiben als

$$t_i = \begin{cases} t, & i \text{ gerade} \\ t + \delta t, & i \text{ ungerade} \end{cases}. \quad (5.13)$$

Da der zusätzliche Term $\sum_i \delta t \hat{c}_{2i-1}^\dagger \hat{c}_{2i} + \text{H.c.}$ bei großem U/t mit der Spinwechselwirkung in Gl. (5.8) vergleichbar ist, sind im $tUVJ$ -Modell ähnliche Ergebnisse zu erwarten.

5.2 Numerische Ergebnisse [2]

5.2.1 Phasendiagramm

Um das erweiterte Hubbard-Modell mit Spinterm (5.8) auf eine symmetriegeschützte HI-Phase zu untersuchen wird mit der iDMRG das Verschränkungsspektrum berechnet. Der iMPS-Grundzustand besteht aus sich periodisch wiederholenden Tensoren $\Gamma^{[1]}, \Lambda^{[1]}, \Gamma^{[2]}$ und $\Lambda^{[2]}$. Da die Einheitszelle aus zwei Gitterplätzen besteht sind auch zwei Schnitte durch das System möglich, die zu verschiedenen Spektren $\epsilon_\alpha^1 = -2 \ln(\Lambda_{\alpha\alpha}^{[1]})$ und $\epsilon_\alpha^2 = -2 \ln(\Lambda_{\alpha\alpha}^{[2]})$ führen. Für hinreichend kleine V/t ergibt sich im gesamten untersuchten Parameterbereich $0 \leq U/t \leq 12$ eine zweifache Entartung entweder in ϵ^1 oder ϵ^2 , je nachdem ob J positive oder negativ ist. Falls $J \ll -4t^2/(U - V)$ ist kann das Modell, wie in Abschnitt 5.1.2 argumentiert, näherungsweise als Spin-1-Kette beschrieben werden. Die Entartung taucht in diesem Fall an den Bindungen ohne Spinwechselwirkung auf, passend zu der HI-Phase des effektiven Modells.

Erhöht man V/t , so findet ein Phasenübergang zu einer topologisch trivialen Phase statt, in der sowohl ϵ^1 als auch ϵ^2 nicht mehr durchgehend entartet sind. Dass es dabei sich um die Ladungsdichtewelle handelt, erkennt man z.B. an der lokalen

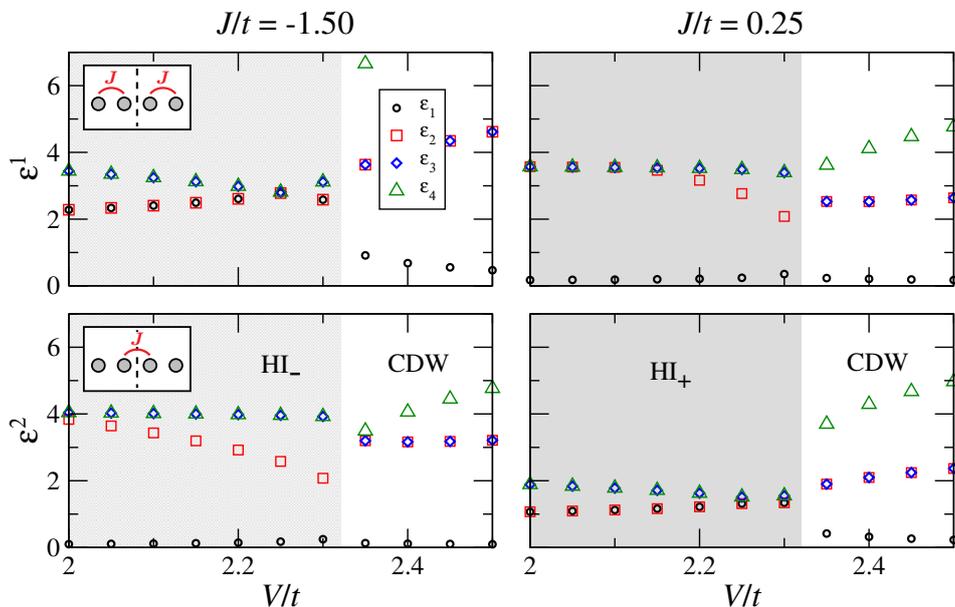


Abb. 5.1: Verschränkungsspektren in CDW und HI für $U/t = 4$. In den HI-Phasen (schattierte Bereiche) ist jeweils ein Spektrum entartet.

Teilchenzahldichte $\langle \hat{n}_i - \hat{n}_{i+1} \rangle \neq 0$, da die DMRG üblicherweise gegen einen der symmetriebrochenen Zustände konvergiert. Falls es sich doch um eine Linearkombination beider Zustände handelt, zeigt sich dies an einer Entartung des größten Eigenwerts der Transfermatrix.

Die Phasengrenzen zwischen HI und CDW ergeben sich, indem für unterschiedliche Parameter jeweils die Verschränkungsspektren des Grundzustands untersucht werden. Nahe an einem Phasenübergang konvergieren die Rechnungen, abhängig von der Startumgebung, zum Teil gegen verschiedene Zustände. In diesem Fall erkennt man den Grundzustand anhand der niedrigeren Energie pro Gitterplatz. Die resultierenden Phasendiagramme für $J/t = -0.5$ und -1.5 sind in Abb. 5.2 angegeben. Bei starker lokaler Wechselwirkung belegt der HI näherungsweise denselben Parameterbereich wie die BOW- und SDW-Phasen für $J/t = 0$. Mit abnehmender Wechselwirkung verschiebt sich der Übergang jedoch zu höherem V/t , sodass die HI-Phase selbst bei $U/t = 0$ eine endliche Ausdehnung besitzt. Wie in Abb. 5.1 zu sehen, führt ein positives J/t zu einer größeren Änderung der Phasengrenzen.

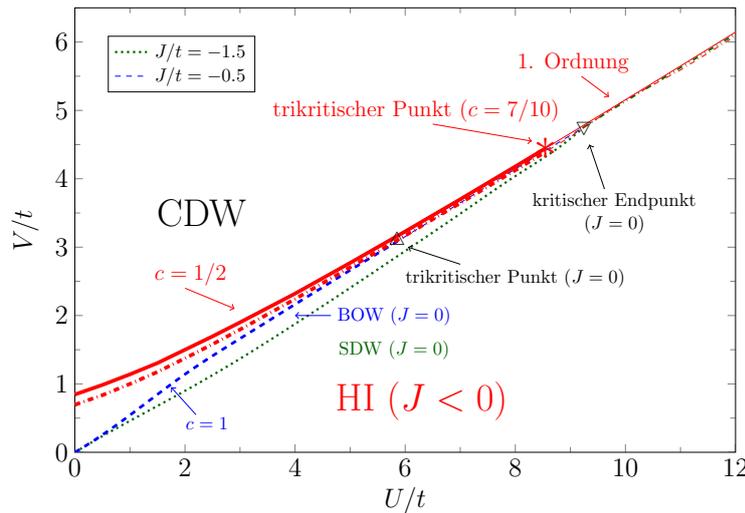


Abb. 5.2: Phasendiagramm des erweiterten Hubbard-Modells. Die Daten für $J/t = 0$ stammen aus Ref. [44].

5.2.2 Topologischer Ordnungsparameter

Um zu zeigen, dass die HI-Phase durch die Inversionssymmetrie geschützt ist, kann die topologische Invariante (3.34) betrachtet werden. Da diese für translationsinvariante Matrixproduktzustände definiert wurde, müssen die Tensoren des iMPS entsprechend zusammengefasst werden, was durch

$$\begin{aligned} \Gamma &= \Gamma^{[2]} \Lambda^{[2]} \Gamma^{[1]}, & \text{oder} & & \Gamma &= \Gamma^{[1]} \Lambda^{[1]} \Gamma^{[2]}, \\ \Lambda &= \Lambda^{[1]}, & & & \Lambda &= \Lambda^{[2]}, \end{aligned} \quad (5.14)$$

möglich ist. Es gibt daher zwei topologische Invarianten \mathcal{O}_T^1 und \mathcal{O}_T^2 , die mit jeweils einem der Verschränkungsspektren zusammenhängen. \mathcal{O}_T^1 und \mathcal{O}_T^2 verschwinden in der CDW-Phase, da die Inversionssymmetrie dort spontan gebrochen ist. In den SPT-Phasen wird die zum nichttrivialen Spektrum gehörende Invariante -1 , die andere $+1$. Demnach wechseln in der Nähe von $J/t = 0$, wo das System durch das tUV -Modell beschrieben wird, die Vorzeichen und es findet ein topologischer Phasenübergang statt. Wenn dieser exakt bei $J/t = 0$ liegt und die HI-CDW- für $J/t \rightarrow 0$ in die HI-SDW/CDW-Grenze übergeht, sind zwei Arten von Phasenübergängen zu erwarten: kontinuierlich im SDW- und diskontinuierlich im BOW-Bereich.

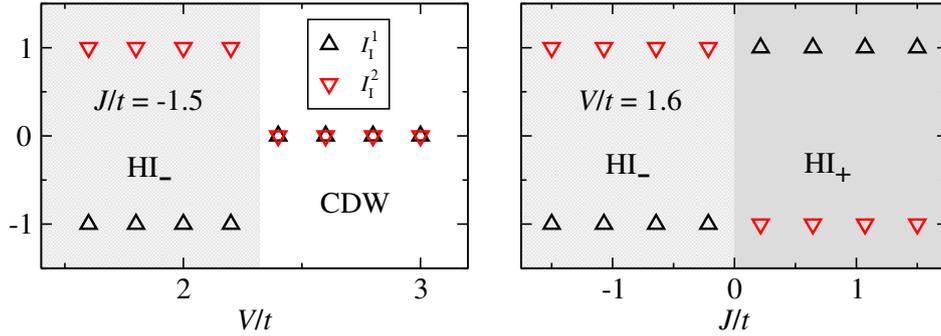


Abb. 5.3: Topologische Invarianten zur Inversionssymmetrie für $U/t = 4$. HI_- und HI_+ stehen für die symmetriegeschützten Haldane-Phasen für $J/t < 0$ bzw. $J/t > 0$.

5.2.3 Ladungsdichtewelle-Haldane-Isolator-Übergang

Wenn das Vorzeichen der Spinwechselwirkung J fest bleibt, setzt sich das Phasendiagramm für positive U/t und V/t aus einem HI- und einem CDW-Bereich zusammen. Zu klären bleiben die Eigenschaften des Phasenübergangs, wobei im folgenden nur der ferromagnetische Fall $J < 0$ behandelt wird. Aus dem effektiven Spinmodell lässt sich diesbezüglich nichts ableiten, da es nur einfach besetzte Gitterplätze erlaubt und somit keine CDW-Phase beschreiben kann. Dies ist anders als im erweiterten Bose-Hubbard-Modell, für das die Ladungsdichtewelle auf einen Antiferromagneten abgebildet wird.

Um festzustellen, ob das System am HI-CDW-Übergang kritisch wird, kann die künstliche Korrelationslänge ξ_χ herangezogen werden, die dem Grundzustand in der iDMRG-Rechnung aufgezwungen wird. Der obere Teil von Abb. 5.4 zeigt ξ_χ an unterschiedlichen Punkten der HI-CDW-Grenze jeweils für $\chi = 100$ und 200 . Bei schwacher bzw. mittlerer Wechselwirkung $U/t = 1$ und 4 sind deutliche Maxima erkennbar, deren Höhen mit χ zunehmen, worin sich eine Divergenz der physikalischen Korrelationslänge andeutet. Im Gegensatz dazu ist bei starker Wechselwirkung $U/t = 10$ nur ein vergleichsweise niedriges Maximum vorhanden, das für $\chi = 100$ bereits konvergiert ist. Dies legt nahe, dass der Phasenübergang für kleine U/t kon-

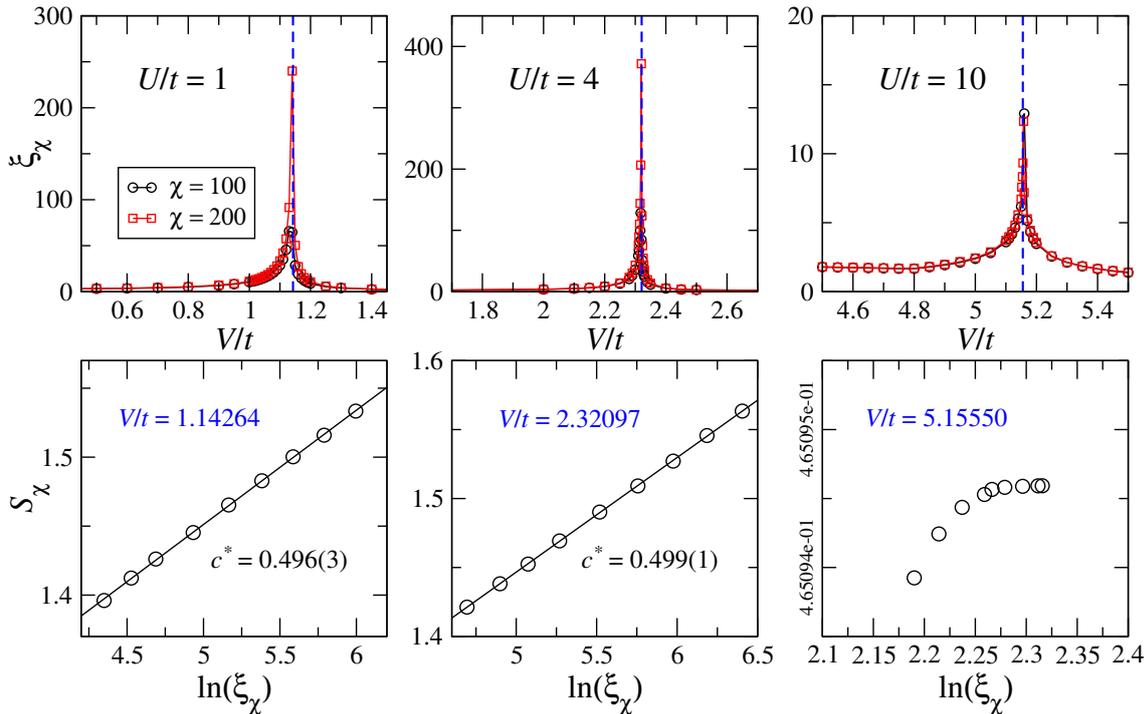


Abb. 5.4: Größte Korrelationslänge in der iMPS-Näherung des Grundzustands für $J/t = -1.50$ (oben) und Finite-Entanglement Scaling am Übergangspunkt (unten).

tinuierlich ist, bei zunehmender Wechselwirkungsstärke jedoch in einen Übergang erster Ordnung übergeht.

An kontinuierlichen Übergängen kann ein Finite-Entanglement-Scaling gemäß Gl. (3.67) Aufschluss über die zentrale Ladung und damit die Universalitätsklasse geben. Da die Korrelationslänge schnell abfällt, wenn man sich von der Phasengrenze wegbewegt, muss der jeweilige kritische Wert $V_c(t, U, J)$ zunächst mit hoher Genauigkeit bestimmt werden. Andernfalls ist $\xi_\chi \ll \xi_{\text{phys}}$ nicht mehr erfüllt und es gibt keine lineare Abhängigkeit zwischen $\ln(\xi_\chi)$ und der Verschränkungsentropie S_ξ . In unmittelbarer Nähe des Phasenübergangs wird es allerdings schwierig, zwischen HI- und CDW-Bereich zu unterscheiden, weil die Energiedichten der beiden Zustände sehr dicht beieinander liegen und eine unterschiedliche Abhängigkeit von der Matrixdimension χ besitzen. Für $U/t = 4$ und $V/t = 2.32097$ wurde überprüft, dass beide Ansätze dieselbe zentrale Ladung liefern. In Abb. 5.4 sind die Ergebnisse aus den CDW-Zuständen angegeben.

Für $U/t = 1, 4$ und $J/t = -1.5$ ergibt sich eine gute Übereinstimmung mit dem nach Gl. (3.67) erwarteten Verhalten, was bestätigt, dass es sich um kontinuierliche Übergänge handelt. Die zentrale Ladung ist an den vier untersuchten Punkten $c = 0.5$, d.h. der Phasenübergang gehört, im Gegensatz zum BOW-CDW-Übergang mit $c = 1$, zur Universalitätsklasse des zweidimensionalen Ising-Modells. An dieser

Stelle ist anzumerken, dass dasselbe Ergebnis für ein verwandtes erweitertes Peierls-Hubbard-Modell durch eine feldtheoretische Untersuchung in Kombination mit der numerischen Bestimmung kritischer Exponenten abgeleitet wurde [47].

Mittels Gl. (3.65) kann die zentrale Ladung auch aus endlichen Systemen berechnet werden. Ein Vorteil ist, wie bereits im erweiterten Bose-Hubbard-Modell zu sehen war, dass in der Nähe eines kritischen Punkts die Abhängigkeit von den Parametern deutlich geringer ist als in einer iDMRG-Rechnung. Aus diesem Grund kann die Funktion $c_L^*(t, U, J, V)$ entlang der HI-CDW-Grenze berechnet werden, ohne dass leichte Abweichungen von den genauen Übergangspunkten die Ergebnisse merklich verfälschen. Gl. (3.65) wird dabei an die vergrößerte Einheitszelle angepasst:

$$c_L^* = \frac{S(L/2 - 2, L) - S(L/2, L)}{\ln \left[\cos \left(\frac{\pi}{L/2} \right) \right]}. \quad (5.15)$$

In Abb. 5.5 sind die resultierenden Kurven $c_L^*(t, U, J, V)$ für $J/t = -1.5$ und $L = 30, 70$ und 90 zu sehen. Die Phasengrenze wurde dabei durch Interpolation der mit iDMRG für $U/t = 0, 1, \dots, 12$ ermittelten Punkte angenähert. Für schwache Wechselwirkung ergibt sich wieder $c = 0.5$, allerdings taucht bei $U/t \approx 8.5$ ein deutliches Maximum $c = 0.7$ auf, hinter dem c auf Null abfällt. Dabei zeigen Lage und Höhe des Maximums nur geringe Systemgrößenabhängigkeit. Anscheinend wird der Wechsel in der Ordnung des Phasenübergangs also durch eine Änderung der zentralen Ladung signalisiert. Die Universalitätsklasse mit $c = 0.7$ ist die des trikritischen Ising-Modells [48].

Auch im erweiterten Hubbard-Modell ohne Spinwechselwirkung taucht ein trikritischer Punkt auf, nämlich an der CDW-BOW-Grenze bei $(U/t, V/t) = (5.89, 3.10)$

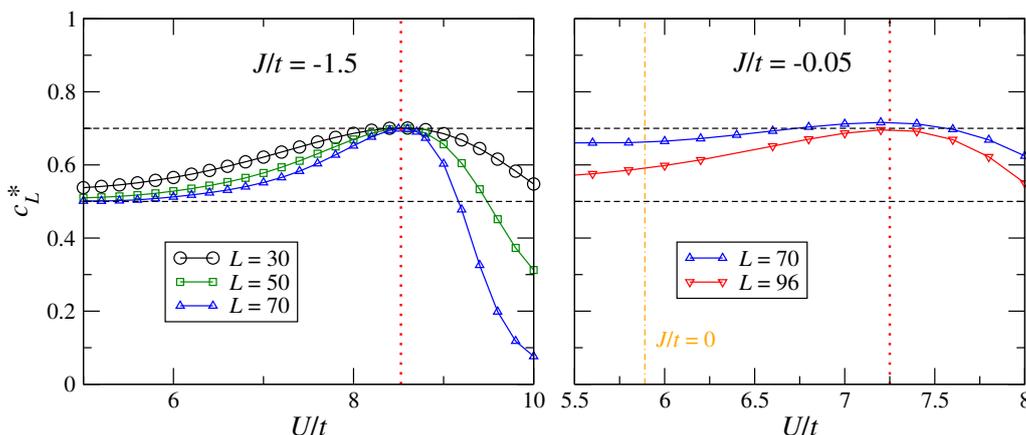


Abb. 5.5: Zentrale Ladung aus endlichen DMRG-Rechnungen mit periodischen Randbedingungen für $J/t = -1.5$ und $J/t = -0.05$. Der Parameter V/t wurde in Abhängigkeit von U/t so gewählt, das sich das System an der Phasengrenze für $L \rightarrow \infty$ befindet. In der rechten Abbildung ist auch der trikritische Punkt des tUV -Modells angegeben.

[1]. Es liegt daher die Vermutung nahe, dass die Position des trikritischen Punkts für $J \rightarrow 0$ gegen diesen Wert konvergiert. Um dies zu überprüfen, wird c_L^* auch für schwächere Spinwechselwirkungen an den Phasengrenzen bestimmt, wobei die Rechnungen durch eine deutlich größere Abhängigkeit von der Systemlänge L und den verwendeten Matrixdimensionen χ erschwert werden. Der trikritische Punkt verschiebt sich für kleinere $|J/t|$ zu niedrigeren U/t und V/t . Für $J/t = -0.05$ ist in ausreichend großen Systemen noch ein klares Maximum bei $U/t \approx 7.25$ erkennbar, das sich mit wachsendem χ dem erwarteten Wert $c^* = 0.7$ annähert. Es hat daher den Anschein, als würde sich der trikritische Punkt mit sinkendem $|J/t|$ tatsächlich in Richtung von dem des tUV -Modells verschieben. Um eine sichere Aussage machen zu können, müssten jedoch noch niedrigere $|J/t|$ betrachtet werden.

5.2.4 Anregungsenergien

Sowohl die CDW- als auch die HI-Phase besitzen eine Energielücke zu den angeregten Zuständen. An den Phasenübergängen, zumindest den kontinuierlichen, wird sie sich schließen.

Je nachdem, mit welcher Änderung der Quantenzahlen die Anregung einhergeht, können unterschiedliche Energielücken definiert werden. Wir betrachten Ladungs-, Spin- und neutrale Lücke:

$$\Delta E_c = \lim_{L \rightarrow \infty} [E_0^L(L+2, 0) + E_0^L(L-2, 0) - 2E_0^L(L, 0)]/2, \quad (5.16)$$

$$\Delta E_s = \lim_{L \rightarrow \infty} [E_0^L(L, \pm 1) - E_0^L(L, 0)], \quad (5.17)$$

$$\Delta E_n = \lim_{L \rightarrow \infty} [E_1^L(L, 0) - E_0^L(L, 0)], \quad (5.18)$$

wobei $E_n^L(N, M)$ die Energie des n -ten angeregten Zustands mit Teilchenzahl N und z -Komponente des Gesamtspins M eines Systems aus L Gitterplätzen ist.

Alle dafür nötigen Energiedifferenzen werden zunächst mit der endlichen DMRG für unterschiedliche Systemlängen berechnet, um schließlich die Werte im thermodynamischen Limes mit einer polynomialen Extrapolation zu schätzen. Neben den üblichen offenen und periodischen Randbedingungen benutzen wir auch die in Abschnitt 3.2.3 diskutierten unendlichen Randbedingungen.

Abhängig von der Phase des Systems und der Art der Randbedingungen ergeben sich unterschiedliche Entartungen des Grundzustands, welche in der Bestimmung der Lücken zu berücksichtigen sind. Im Haldane-Isolator tauchen Randzustände nur dann auf, wenn man es in Analogie zu Spin-1-Ketten, wie dem AKLT-Modell, erwarten würde [45]. Für negative J und offene Randbedingungen also, falls die äußeren Gitterplätze von der Spinwechselwirkung betroffen sind. Die Entartung wird durch Hinzufügen je eines Gitterplatzes an beiden Rändern aufgehoben, was Spin-1/2-Teilchen im AKLT-Zustand entsprechen würde, die Singulets mit den freien Randspins bilden können. Bei der Berechnung der Energielücke ist es sinnvoll, solch ein System mit eindeutigem Grundzustand zu wählen.

In der CDW-Phase ist der Grundzustand aufgrund der gebrochenen Inversionssymmetrie zweifach entartet. Da beide Zustände dieselben Quantenzahlen besitzen, muss für die Berechnung der neutralen Lücke der drittniedrigste Energieeigenwert benutzt werden. Bei offenen Randbedingungen bietet es sich an, Felder an den Rändern hinzuzufügen

$$\hat{H}' = \hat{H} + F_1 \hat{n}_1 + F_L \hat{n}_L, \quad (5.19)$$

um die Situation im thermodynamischen Limes besser zu approximieren. Hierdurch wird zudem die Entartung aufgehoben, und einer der Grundzustände über den niedrigsten angeregten Zustand angehoben. Ähnlich verhält es sich mit unendlichen Randbedingungen. Die Umgebung wird durch einen der symmetriegebrochenen Zustände mit alternierender Teilchendichte gebildet, was vergleichbar mit dem Anlegen von Feldern $F_1 = \langle \hat{n}_0 \rangle V$ und $F_2 = \langle \hat{n}_{L+1} \rangle V$ ist.

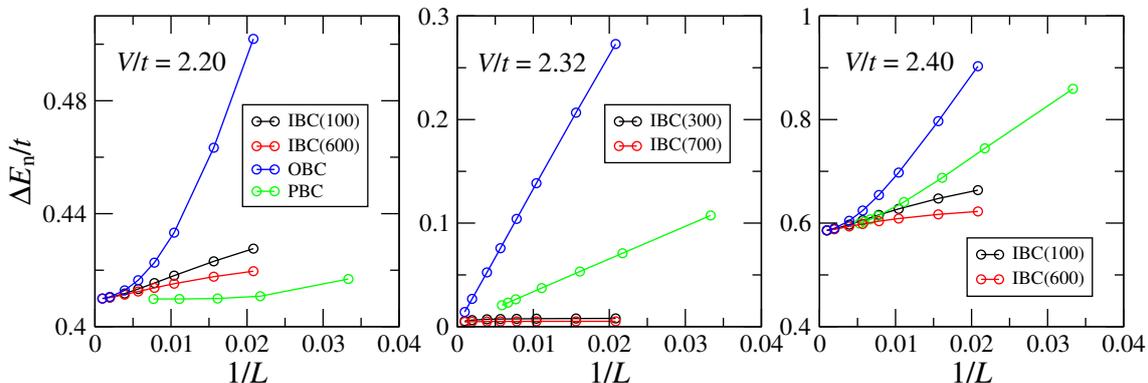


Abb. 5.6: Neutrale Lücke für $U/t = 4$ und $J/t = -1.5$ in HI- und CDW-Phase sowie am kritischen Punkt. Die eingeklammerten Zahlen geben die Matrixdimensionen $\chi_{0,L}$ an den Rändern an.

In Abb. 5.6 sind die unterschiedlichen Methoden für die neutrale Lücke verglichen. Die extrapolierten Ergebnisse stimmen in allen Fällen näherungsweise überein. Offene Randbedingungen sind mit dem geringsten Rechenaufwand verbunden, führen aber zur stärksten Systemgrößenabhängigkeit. Bei periodischen Randbedingungen konvergiert die Lücke, insbesondere in der HI-Phase, schneller. Dafür sind jedoch für die gleiche Genauigkeit erheblich größere Matrixdimensionen in Kauf zu nehmen, weshalb nur kleine Systeme berechnet werden können. Bei unendlichen Randbedingungen bleibt die Anzahl $\chi_{0,L+1}$ der Basiszustände an den Rändern des Systems während der Rechnung konstant. Je nachdem welche $\chi_{0,L+1}$ benutzt werden, ergibt sich eine unterschiedliche Abhängigkeit der Lücken von der Fenstergröße. Schon kleine $\chi_{0,L+1} \approx 100$ genügen dabei, um eine deutlich schnellere Konvergenz als bei offenen Randbedingungen zu erreichen. Aus diesem Grund werden die Energielücken im Folgenden, wenn nicht anders angegeben, mit unendlichen Randbedingungen bestimmt.

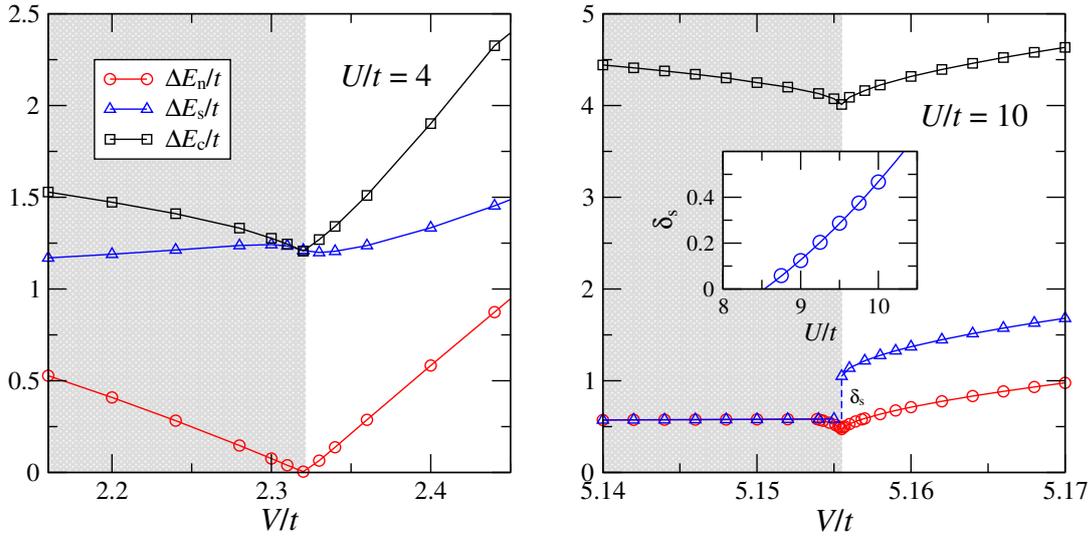


Abb. 5.7: Anregungsenergien an kontinuierlichen und diskontinuierlichen Phasenübergängen für $J/t = -1.5$. Die Einfügung in der rechten Abbildung zeigt die Abhängigkeit des Sprungs δ_s in der Spinlücke von U/t .

Im erweiterten Hubbard-Modell mit $J/t = 0$ verschwindet die Spinlücke, und damit auch die neutrale Lücke, in der SDW-Phase, während sich die Ladungslücke an der CDW-BOW-Grenze schließt. Im Gegensatz dazu sieht man in Abb. 5.7, dass die Ladungs- und Spinlücken am kontinuierlichen HI-CDW-Übergang für $(U/t, J/t) = (4, -1.5)$ zwar ein Minimum besitzen, aber endlich bleiben. Stattdessen schließt sich nur die neutrale Lücke, wobei in der Nähe des Phasenübergangs eine lineare Abhängigkeit von V besteht. Offensichtlich gilt $\Delta E_n < \Delta E_s$, d.h. der niedrigste angeregte Zustand ist ein Singulett.

An der HI-CDW-Grenze für $(U/t, J/t) = (10, -1.5)$ gibt es wieder ein Minimum der Ladungslücke, Spin- und neutrale Lücke verhalten sich hingegen anders als für $(U/t, J/t) = (4, -1.5)$. In der HI-Phase sind ΔE_n und ΔE_s im Wesentlichen identisch, was impliziert, dass die niedrigste Anregung einen von null verschiedenen Gesamtspin besitzt. Man kann, z.B. durch Berechnung der Spin-2-Lücke, zeigen, dass der Gesamtspin wie im Heisenberg-Modell den Betrag $S = 1$ hat. Nahe am Übergangspunkt werden die beiden Lücken verschieden: während ΔE_n abfällt und ein endliches Minimum am Übergang annimmt, bleibt die Spinlücke ΔE_s zunächst unverändert, bis sie beim Wechsel zur CDW-Phase einen Sprung δ_s zeigt. Im CDW-Bereich nimmt ΔE_s rasch zu und nähert sich asymptotisch der Geraden $2V - U - J/4$. Die endliche Anregungslücke und die Diskontinuität in ΔE_s machen deutlich, dass es sich, in Übereinstimmung mit den Ergebnissen zur zentralen Ladung, um einen Phasenübergang erster Ordnung handelt. Wenn man U/t verringert, wird der Sprung am Phasenübergang kleiner, bis er bei $U/t \approx 8.5$, also am trikritischen Punkt mit $c = 0.7$, verschwindet.

In endlichen Systemen ändert sich das Eigenwertspektrum des Hamilton-Operators

kontinuierlich mit den Parametern t, U, J und V , sodass der Sprung δ_s erst im Limes $L \rightarrow \infty$ entstehen kann. Daher eignen sich die unendlichen Randbedingungen mit einem iMPS als Ausgangspunkt besser, um die diskontinuierliche Änderung der Wellenfunktion zu erfassen.

Die Rechnung mit periodischen Randbedingungen liefert für die neutrale Lücke zunächst abweichende Ergebnisse (Abb. 5.8). ΔE_n besitzt für feste Systemgröße L einen Knick, von dem aus sich die Lücke linear zu schließen scheint. Allerdings verschiebt sich die Position des Knicks mit zunehmendem L in Richtung des HI-CDW-Übergangs, sodass ΔE_n im thermodynamischen Limes möglicherweise endlich bleibt. Um dies zu überprüfen, werden die ersten drei Anregungsenergien für $V/t = 5.155$ betrachtet. Die beiden niedrigsten Energien liegen deutlich unter dem Wert aus der Rechnung mit unendlichen Randbedingungen, nehmen für ausreichend große L aber wieder zu. Es besteht dabei ein linearer Zusammenhang $\Delta E_n \propto L$, d.h. der angeregte Zustand hat eine andere Energie pro Gitterplatz als der Grundzustand und die Energiedifferenz divergiert für $L \rightarrow \infty$. Die Proportionalitätskonstante entspricht näherungsweise der Differenz der Energiedichten, die sich aus iDMRG-Rechnungen für die HI- und CDW-Zustände ergeben. Demnach handelt es sich bei dem Phasenübergang um ein Level-Crossing zwischen den beiden Zuständen und die scheinbar verschwindende Energielücke ist eine Folge der endlichen Systemgröße.

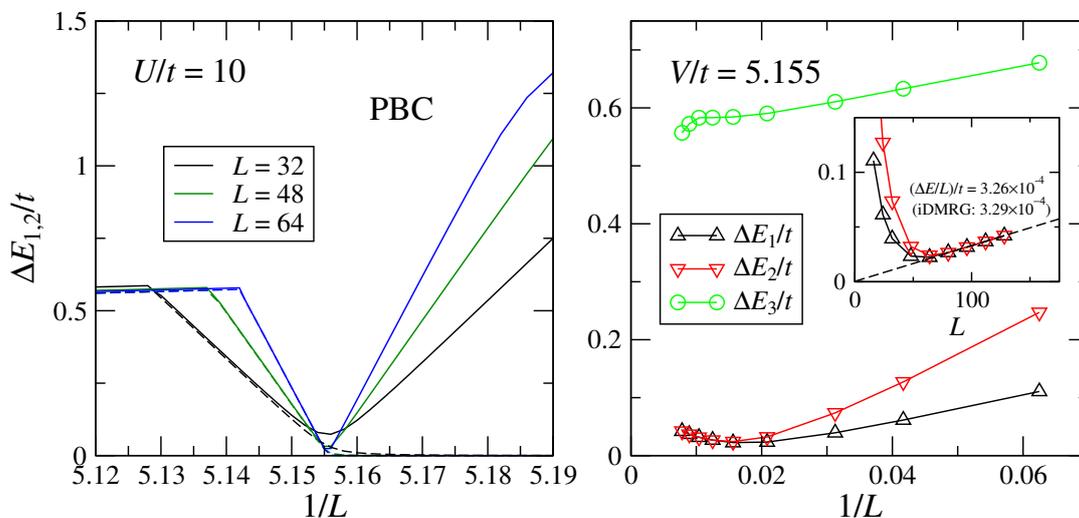


Abb. 5.8: Die ersten beiden Anregungsenergien für feste Systemlänge L und periodische Randbedingungen (links) sowie die Abhängigkeit der ersten drei Energien von L in der Nähe des Phasenübergangs (rechts). Bei kleinen L entspricht ΔE_3 der Spinlücke aus der Rechnung mit IBC. Für ausreichend große Systeme findet ein Wechsel zu einem niedrigeren Zustand statt, der auch in der neutralen Lücke bei IBC beobachtet wird.

5.2.5 Dynamische Strukturfaktoren

Wie für das Bose-Hubbard-Modell, lassen sich durch tDMRG dynamische Größen berechnen. Neben dem Dichtestrukturfaktor (4.18) soll auch der Spinstrukturfaktor

$$S^{zz}(k, \omega) = \sum_n |\langle \psi_n | \tilde{S}_k^z | \psi_0 \rangle|^2 \delta(E_0 - E_n + \omega), \quad (5.20)$$

$$\tilde{S}_k^z = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_j e^{ijk} \hat{S}_j^z, \quad (5.21)$$

betrachtet werden. Im Gegensatz zu $S(k, \omega)$ tragen hier lediglich angeregte Zustände mit endlichem Gesamtspin bei, weshalb nur oberhalb der Spinlücke $S^{zz}(k, \omega) \neq 0$ ist.

Um die dynamischen Strukturfaktoren zu berechnen, werden die zeitabhängigen Dichte-Dichte- und Spin-Spin-Korrelationsfunktionen C_{ij} des Grundzustands $|\psi_0\rangle$ benötigt. In allen Rechnungen gilt $\chi = 400$ für $|\psi_0\rangle$ und $400 \leq \chi \leq 1000$ für den gestörten zeitabhängigen Zustand. Zur Approximation des Zeitentwicklungsoperators dient wieder eine Suzuki-Trotter-Zerlegung 4. Ordnung. Schrittweite und simulierte Zeit sind $\delta\tau = 0.05/t$ bzw. $\tau_{\max} \geq 30/t$.

Da die Einheitszelle aus zwei Gitterplätzen besteht ist $C_{j+r+1, j+1} \neq C_{j+r, j}$. Durch Ausnutzung der Inversionssymmetrie um eine Bindung können im Haldane-Isolator über $C_{j+r+1, j+1} = C_{j-r, j}$ trotzdem alle nötigen Daten aus einer einzigen Simulation mit festem j gewonnen werden. In der CDW-Phase sind hingegen wieder zwei Durchläufe nötig. Bei der Berechnung des Strukturfaktors wird angenommen, dass der Abstand zwischen benachbarten Gitterplätzen an geraden und ungeraden Bindungen gleich groß ist.

Es wird der Fall mittlerer Wechselwirkung $U/t = 4$ und $J/t = -1.5$ untersucht (Abb. 5.9). Die Nächste-Nachbar-Wechselwirkung wird nacheinander auf $V/t = 2, 2.32$ und 3 gesetzt, um die Änderung der dynamischen Strukturfaktoren beim Übergang von HI zu CDW beobachten. In der HI-Phase ergibt sowohl für $S(k, \omega)$ als auch $S^{zz}(k, \omega)$ ein Dispersionszweig, der nahezu symmetrisch um $k = \pi/2$ ist. Oberhalb davon gibt es einen kontinuierlichen Anteil, der sich beim Dichtestrukturfaktor auf den Bereich $k > \pi/2$ beschränkt. Das spektrale Gewicht von $S(k, \omega)$ liegt größtenteils in der Nähe von $k = \pi$, während das von $S^{zz}(k, \omega)$ relativ gleichmäßig über die Brillouin-Zone verteilt ist. Wenn man sich dem Phasenübergang annähert, wächst das Maximum des Dichtestrukturfaktors bei $k = \pi$ stark an und verschiebt sich auf $\omega \approx 0$, worin sich das Schließen der neutralen Lücke widerspiegelt.

In der CDW-Phase ist die Situation grundlegend verschieden. Neben einem Anteil, der ähnlich verläuft wie im HI, besitzt $S(k, \omega)$ nun weitere Dispersionszweige. Insbesondere ist bei Energien $\omega \approx 6$ und $\pi/2 < k < 3\pi/4$ ein zusätzliches Maximum vorhanden. $S^{zz}(k, \omega)$ wird in der CDW-Phase asymmetrisch, mit einer größeren Anregungslücke bei $k = \pi$.

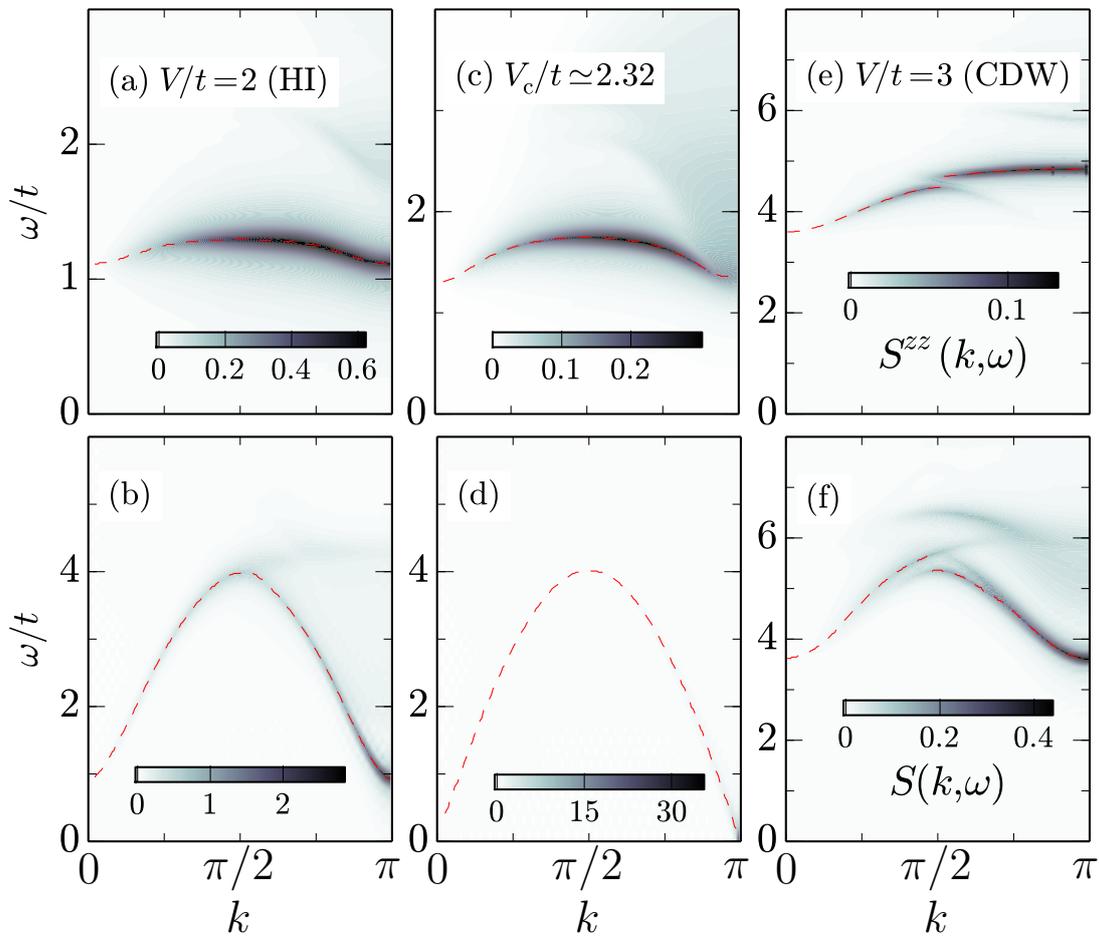


Abb. 5.9: Dynamische Spin- und Dichtestrukturfaktoren für $J/t = -1.5$ und exponentielles Fenster (4.21) mit $\eta/t = 0.1$. Es wurde keine lineare Vorhersage verwendet.

6 Zusammenfassung

Es wurden zwei erweiterte Hubbard-Modelle für Bosonen bzw. Fermionen untersucht, in denen Nächste-Nachbar-Wechselwirkungen zu symmetriegeschützten topologischen Phasen führen. In beiden Modellen lassen sich die SPT-Zustände teilweise in Analogie zur Haldane-Phase von Spin-1-Ketten erklären, entweder indem die Bosonen-Dichten auf Spins abgebildet oder zwei Spin-1/2-Fermionen als unbewegliche Spins mit Betrag $S = 1$ aufgefasst werden. Die effektiven Modelle sind jedoch Näherungen und nur in bestimmten Parameterbereichen sinnvoll. So sind im Bosonen-Modell genau genommen beliebig viele Teilchen pro Gitterplatz erlaubt, was nicht mit endlichen lokalen Spins vereinbar ist. Im Fermionen-Modell ist aufgrund der Teilchenzahlfuktuationen ebenfalls kein fester Spin pro Gitterplatz oder Gitterplatzpaar definierbar. Um die Modelle zu verstehen ist also eine genauere Behandlung notwendig.

Hierfür wurden mit DMRG-Programmen der ITensor-Bibliothek MPS- und iMPS-Repräsentationen der Grundzustände berechnet. Anhand der Verschränkungseigenschaften wurden die SPT-Zustände erkannt und die zentrale Ladung der kritischen Punkte bestimmt. Die Verwendung des MPS-Formalismus ermöglichte es, mit topologischen Ordnungsparametern die schützende Symmetrie zu identifizieren. Zusätzlich zu den Grundzustandseigenschaften wurden Anregungsenergien und dynamische Strukturfaktoren berechnet. Für die Strukturfaktoren ist ein lokal gestörter iMPS mittels tDMRG näherungsweise in der Zeit entwickelt worden, was durch die Verwendung sogenannter unendlicher Randbedingungen ermöglicht wird. Diese Randbedingungen konnten, wie in Ref. [10] vorgeschlagen, auch erfolgreich bei der Bestimmung von Anregungslücken eingesetzt werden.

Im erweiterten Bose-Hubbard-Modell wurden im Wesentlichen bekannte Ergebnisse bestätigt. Wie in Ref. [15] hergeleitet, wird die Haldane-Phase durch eine modifizierte Inversionssymmetrie geschützt. D_2 - und Zeitumkehrsymmetrie sind hingegen explizit gebrochen. Die zentrale Ladung der HI-MI- und HI-CDW-Übergänge ist $c = 1$ bzw. 0.5 , in Übereinstimmung mit den Ergebnissen der Bosonisierung in [34] und wie an den entsprechenden Punkten des effektiven Spin-1-Modells. Auch der dynamische Strukturfaktor ähnelt dem der Spinkette. So wird z.B. das Schließen der Energielücke an den HI-MI- und HI-CDW-Grenzen durch Anregungen mit unterschiedlichen Quasiimpulsen $k = 0$ bzw. π verursacht.

Für das verallgemeinerte fermionische Hubbard-Modell war die Existenz einer symmetriegeschützten Haldane-Phase in Abwesenheit der Nächste-Nachbar-Coulomb-Wechselwirkung ($V/t = 0$) bekannt. Die Berechnung topologischer Ordnungsparameter bestätigte, dass diese Phase durch Inversionssymmetrie geschützt wird. Es wurde zudem gezeigt, dass das Phasendiagramm für endliches V/t um eine Ladungs-

dichtewelle erweitert wird, die nahezu denselben Parameterbereich wie im Modell ohne Spinwechselwirkung ($J/t = 0$) bedeckt. Durch iDMRG-Verfahren konnte die Position der HI-CDW-Übergänge mit hoher Genauigkeit bestimmt werden. Eine genauere Analyse ergab, dass die Phasengrenze sich in Bereiche eines kontinuierlichen Phasenübergangs und Phasenübergänge erster Ordnung aufteilt, die durch einen trikritischen Punkt getrennt werden. Am trikritischen Punkt ist die zentrale Ladung $c = 0.7$, womit es sich um die Universalitätsklasse des trikritischen Ising-Modells handelt. Der übrige Teil des kontinuierlichen Übergangs hat $c = 0.5$, was der gewöhnlichen Ising-Universalitätsklasse entspricht. Die unterschiedliche Ordnung der Übergänge zeigt sich auch an den Anregungslücken. Im kontinuierlichen Bereich schließt sich die neutrale Lücke, während sie im diskontinuierlichen Bereich offen bleibt und es zudem einen Sprung in der Spinlücke gibt. Wenn man die Wechselwirkung verringert, wird dieser Sprung kleiner bis er schließlich an dem bereits aus der zentralen Ladung abgeleiteten trikritischen Punkt verschwindet.

Der HI-CDW-Übergang ist grundlegend verschieden von dem Übergang zwischen CDW und BOW im erweiterten Hubbard-Modell ohne Spinwechselwirkung, an dem sich die Ladungslücke schließt und die zentrale Ladung den Wert $c = 1$ annimmt. Allerdings gibt es auch an der CDW-BOW-Grenze einen trikritischen Punkt, an dem der Phasenübergang von kontinuierlich zu erster Ordnung übergeht. Für kleinere Spinwechselwirkungen J/t bewegt sich der Punkt mit $c = 0.7$ in dessen Richtung, sodass beide Punkte für $J/t \rightarrow 0$ möglicherweise zusammenfallen.

Berechnet wurden weiterhin die dynamischen Spin- und Dichtestrukturfaktoren für unterschiedliche Parameter des Modells, wobei deutliche Unterschiede zwischen den Phasen hervortraten. An dem kritischen Punkt wurde im Dichtestrukturfaktor bei $k = \pi$ zudem das Schließen der neutralen Lücke beobachtet.

Mit einer Kombination unterschiedlicher DMRG-Verfahren können, wie in dieser Arbeit demonstriert, sowohl Grundzustands- als auch spektrale Eigenschaften eindimensionaler Gittermodelle bestimmt werden. Ungewünschte Einflüsse von Rändern oder endliche Systemgrößen lassen sich weitestgehend vermeiden, indem man mit iMPS-Darstellungen direkt im thermodynamischen Limes rechnet. Für die verallgemeinerten Hubbard-Modelle wurden damit trotz der relativ komplizierten Hamilton-Operatoren sehr genaue Ergebnisse erzielt.

Das erweiterte Bose-Hubbard-Modell beschreibt z.B. ultrakalte dipolare Gase in optischen Gittern. In diesen Systemen kann das Verhältnis U/V im effektiven Hamilton-Operator kontrolliert werden [7], sodass sich die Haldane-Phase möglicherweise experimentell beobachten lässt. Die Spinwechselwirkung im fermionischen Modell wurde hingegen hinzugefügt, um gezielt eine SPT-Phase zu erzeugen, und ist daher in erster Linie theoretisch motiviert. Allerdings dürften die qualitativen Resultate auch auf verwandte, eventuell eher realisierbare Modelle wie erweiterte Peierls-Hubbard-Ketten übertragbar sein. Von A. Klümper wurde zudem darauf aufmerksam gemacht, dass das Phasendiagramm dem eines klassischen zweidimensionalen Hard-Squares-Modells [49] ähnelt. In diesem gibt es zwei Phasen, die von Übergängen 1. und 2. Ordnung getrennt werden. Der Punkt an den die Ordnung wechselt besitzt

ebenfalls eine zentrale Ladung $c = 0.7$. Es wäre interessant zu sehen, inwiefern eine Analogie zwischen den beiden Modellen hergestellt werden kann.

A MPO-Darstellung der Hamilton-Operatoren

Im Folgenden sind explizite MPO-Darstellungen für die Hamilton-Operatoren der Modelle (4.9) und (5.8) angegeben. Für periodische und offene Randbedingungen werden unterschiedliche Sätze von Tensoren verwendet.

A.1 Erweitertes Fermi-Hubbard-Modell

Offene Randbedingungen:

$$\hat{W}_{\text{OBC}}^{[2i-1]} = \begin{pmatrix} \hat{I} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ V \hat{n} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ t \hat{a}_{\uparrow}^{\dagger} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -t \hat{a}_{\uparrow} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ t \hat{F} \hat{a}_{\downarrow}^{\dagger} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -t \hat{F} \hat{a}_{\downarrow} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ U \hat{n}_{\uparrow} \hat{n}_{\downarrow} & \hat{n} & \hat{a}_{\uparrow} \hat{F} & \hat{a}_{\uparrow}^{\dagger} \hat{F} & \hat{a}_{\downarrow} & \hat{a}_{\downarrow}^{\dagger} & \hat{S}^z & \hat{S}^- & \hat{S}^+ & \hat{I} \end{pmatrix},$$

$$\hat{W}_{\text{OBC}}^{[2i]} = \begin{pmatrix} \hat{I} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ V \hat{n} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ t \hat{a}_{\uparrow}^{\dagger} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -t \hat{a}_{\uparrow} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ t \hat{F} \hat{a}_{\downarrow}^{\dagger} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -t \hat{F} \hat{a}_{\downarrow} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ J \hat{S}^z & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ (J/2) \hat{S}^+ & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ (J/2) \hat{S}^- & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ U \hat{n}_{\uparrow} \hat{n}_{\downarrow} & \hat{n} & \hat{a}_{\uparrow} \hat{F} & \hat{a}_{\uparrow}^{\dagger} \hat{F} & \hat{a}_{\downarrow} & \hat{a}_{\downarrow}^{\dagger} & \hat{I} \end{pmatrix}, \quad i = 1, \dots, L/2 - 1,$$

$$\hat{W}_{\text{OBC}}^{[1]} = \begin{pmatrix} U \hat{n}_{\uparrow} \hat{n}_{\downarrow} & \hat{n} & \hat{a}_{\uparrow} \hat{F} & \hat{a}_{\uparrow}^{\dagger} \hat{F} & \hat{a}_{\downarrow} & \hat{a}_{\downarrow}^{\dagger} & \hat{S}^z & \hat{S}^- & \hat{S}^+ & \hat{I} \end{pmatrix},$$

$$\hat{W}_{\text{OBC}}^{[L]} = \begin{pmatrix} \hat{I} \\ V \hat{n} \\ t \hat{a}_{\uparrow}^{\dagger} \\ -t \hat{a}_{\uparrow} \\ t \hat{F} \hat{a}_{\downarrow}^{\dagger} \\ -t \hat{F} \hat{a}_{\downarrow} \\ J \hat{S}^z \\ (J/2) \hat{S}^+ \\ (J/2) \hat{S}^- \\ U \hat{n}_{\uparrow} \hat{n}_{\downarrow} \end{pmatrix}. \quad (\text{A.1})$$

Periodische Randbedingungen:

$$\begin{aligned} \hat{W}_{\text{PBC}}^{[i]} &= \hat{W}_{\text{OBC}}^{[i]} \oplus \begin{pmatrix} \hat{I} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \hat{F} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \hat{F} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \hat{F} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \hat{F} \end{pmatrix}, \quad i = 2, \dots, L-1, \\ \hat{W}_{\text{PBC}}^{[1]} &= \hat{W}_{\text{OBC}}^{[1]} \oplus \left(\hat{n} \quad \hat{a}_{\uparrow} \hat{F} \quad \hat{a}_{\uparrow}^{\dagger} \hat{F} \quad \hat{a}_{\downarrow} \quad \hat{a}_{\downarrow}^{\dagger} \right), \\ \hat{W}_{\text{PBC}}^{[L]} &= \hat{W}_{\text{OBC}}^{[L]} \oplus \begin{pmatrix} V \hat{n} \\ t \hat{a}_{\uparrow}^{\dagger} \\ -t \hat{a}_{\uparrow} \\ t \hat{F} \hat{a}_{\downarrow}^{\dagger} \\ -t \hat{F} \hat{a}_{\downarrow} \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

A.2 Erweitertes Bose-Hubbard-Modell

Offene Randbedingungen:

$$\begin{aligned} \hat{W}_{\text{OBC}}^{[i]} &= \begin{pmatrix} \hat{I} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ V \hat{n} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -t \hat{b}^{\dagger} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -t \hat{b} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ (U/2) \hat{n}(\hat{n}-1) & \hat{n} & \hat{b} & \hat{b}^{\dagger} & \hat{I} \end{pmatrix}, \quad i = 2, \dots, L-1, \\ \hat{W}_{\text{OBC}}^{[1]} &= \left((U/2) \hat{n}(\hat{n}-1) \quad \hat{n} \quad \hat{b} \quad \hat{b}^{\dagger} \quad \hat{I} \right), \end{aligned}$$

$$\hat{W}_{\text{OBC}}^{[L]} = \begin{pmatrix} \hat{I} \\ V \hat{n} \\ -t \hat{b}^\dagger \\ -t \hat{b} \\ (U/2) \hat{n}(\hat{n} - 1) \end{pmatrix}. \quad (\text{A.3})$$

Periodische Randbedingungen:

$$\begin{aligned} \hat{W}_{\text{PBC}}^{[i]} &= \hat{W}_{\text{OBC}}^{[i]} \oplus \begin{pmatrix} \hat{I} & 0 & 0 \\ 0 & \hat{I} & 0 \\ 0 & 0 & \hat{I} \end{pmatrix}, \quad i = 2, \dots, L-1, \\ \hat{W}_{\text{PBC}}^{[1]} &= \hat{W}_{\text{OBC}}^{[1]} \oplus \begin{pmatrix} \hat{n} & \hat{b} & \hat{b}^\dagger \end{pmatrix}, \\ \hat{W}_{\text{PBC}}^{[L]} &= \hat{W}_{\text{OBC}}^{[L]} \oplus \begin{pmatrix} V \hat{n} \\ -t \hat{b}^\dagger \\ -t \hat{b} \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

Literaturverzeichnis

- [1] S. Ejima, F. Lange, and H. Fehske, Phys. Rev. Lett. **113**, 020401 (2014).
- [2] F. Lange, S. Ejima, and H. Fehske, Phys. Rev. B **92**, 041120(R) (2015).
- [3] S. R. White, Phys. Rev. Lett. **69**, 2863 (1992).
- [4] P. E. Dargel, A. Wöllert, A. Honecker, I. P. McCulloch, U. Schollwöck, and T. Pruschke, Phys. Rev. B **85**, 205119 (2012).
- [5] I. P. McCulloch, arXiv:0804.2509 (2008).
- [6] D. Jaksch, C. Bruder, J. I. Cirac, C. W. Gardiner, and P. Zoller, Phys. Rev. Lett. **81**, 3108 (1998).
- [7] O. Dutta, M. Gajda, P. Hauke, M. Lewenstein, D.-S. Lühmann, B. A. Malomed, T. Sowinski, and J. Zakrzewski, Rep. Prog. Phys. **78**, 066001 (2015).
- [8] N. Schuch, D. Perez-Garcia, and I. Cirac, Phys. Rev. B **84**, 165139 (2011).
- [9] F. Pollmann and A. M. Turner, Phys. Rev. B **86**, 125441 (2012).
- [10] <http://itensor.org>.
- [11] X.-G. Wen, Int. J. Mod. Phys. **B4**, 239 (1990).
- [12] X. Chen, Z.-C. Gu, and X.-G. Wen, Int. J. Mod. Phys. **82**, 155138 (2010).
- [13] I. Affleck, T. Kennedy, E. H. Lieb, and H. Tasaki, Phys. Rev. Lett. **59**, 799 (1987).
- [14] T. Kennedy, J. Phys. Condens. Matter **2**, 5737 (1990).
- [15] F. Pollmann, E. Berg, A. M. Turner, and M. Oshikawa, Phys. Rev. B **81**, 064439 (2010).
- [16] U. Schollwöck, Annals of Physics **326**, 96 (2011).
- [17] J. A. Kjäll, M. P. Zaletel, R. S. K. Mong, J. H. Bardarson, and F. Pollmann, Phys. Rev. B **87**, 235106 (2013).
- [18] X. Chen, Z.-C. Gu, and X.-G. Wen, Phys. Rev. B **83**, 035107 (2011).

- [19] R. Haghshenas, A. Langari, and A. T. Rezakhani, *J. Phys. Condens. Matter* **26**, 456001 (2014).
- [20] E. M. Stoudenmire and S. R. White, *Annual Review of Condensed Matter Physics* **3**, 111 (2012).
- [21] H. N. Phien, G. Vidal, and I. P. McCulloch, *Phys. Rev. B* **86**, 245107 (2012).
- [22] L. Michel and I. P. McCulloch, (2010).
- [23] J. Haegeman, T. J. Osborne, and F. Verstraete, *Phys. Rev. B* **88**, 075133 (2013).
- [24] P. Calabrese and J. Cardy, *J. Stat. Mech.* P06002 (2004).
- [25] S. Nishimoto, *Phys. Rev. B* **84**, 195108 (2011).
- [26] F. Pollmann, S. Mukerjee, A. M. Turner, and J. E. Moore, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 255701 (2009).
- [27] E. Jeckelmann, *Phys. Rev. B* **66**, 045114 (2002).
- [28] K. A. Hallberg, *Phys. Rev. B* **52**, R9827(R) (1995).
- [29] N. Hatano and M. Suzuki. *Quantum Annealing and Other Optimization Methods Lecture Notes in Physics* volume 679 pages 37–68. Springer Berlin (2005).
- [30] S. R. White and A. E. Feiguin, *Phys. Rev. Lett.* **93**, 076401 (2004).
- [31] D. Gobert, C. Kollath, U. Schollwöck, and G. Schuetz, *Phys. Rev. E* **71**, 036102 (2005).
- [32] T. Barthel, U. Schollwöck, and S. R. White, *Phys. Rev. B* **79**, 245101 (2009).
- [33] E. G. D. Torre, E. Berg, and E. Altman, *Phys. Rev. Lett.* **97**, 260401 (2006).
- [34] E. Berg, E. G. D. Torre, T. Giamarchi, and E. Altman, *Phys. Rev. B* **77**, 245119 (2008).
- [35] D. Rossini and R. Fazio, *New J. Phys.* **14**, 065012 (2012).
- [36] T. Giamarchi, *Quantum Physics in One Dimension* (Oxford University Press, Oxford, 2004).
- [37] S. Ejima, H. Fehske, F. Gebhard, K. zu Münster, M. Knap, E. Arrigoni, and W. von der Linden, *Phys. Rev. A* **85**, 053644 (2012).
- [38] A. M. Turner, F. Pollmann, and E. Berg, *Phys. Rev. B* **83**, 075102 (2011).
- [39] D. Clément, N. Fabbri, L. Fallani, C. Fort, and M. Inguscio, *Phys. Rev. Lett.* **102**, 155301 (2009).

- [40] S. Ejima, H. Fehske, and F. Gebhard, *Europhys. Lett.* **93**, 30002 (2011).
- [41] S. Ejima and H. Fehske, *Phys. Rev. B* **91**, 045121 (2015).
- [42] F. H. L. Essler, H. Frahm, F. Göhmann, A. Klümper, and V. E. Korepin, *The One-Dimensional Hubbard Model* (Cambridge University Press, Cambridge, 2005).
- [43] A. W. Sandvik, L. Balents, and D. K. Campbell, *Phys. Rev. Lett.* **92**, 236401 (2004).
- [44] S. Ejima and S. Nishimoto, *Phys. Rev. Lett.* **99**, 216403 (2007).
- [45] S. R. Manmana, A. M. Essin, R. M. Noack, and V. Gurarie, *Phys. Rev. B* **86**, 205119 (2012).
- [46] S. Moudgalya and F. Pollmann, *Phys. Rev. B* **91**, 155128 (2015).
- [47] H. Benthien, F. H. L. Essler, and A. Grage, *Phys. Rev. B* **73**, 085105 (2012).
- [48] P. D. Francesco, P. Mathieu, and D. Sénéchal, *Conformal Field Theory* (Springer, Berlin, 1997).
- [49] A. Klümper and P. A. Pearce, *J. Stat. Phys.* **64**, 13 (1991).

Danksagung

Mein großer Dank gilt Herrn Prof. Dr. Holger Fehske für die Möglichkeit, die Arbeit in seiner Arbeitsgruppe zu erstellen, und die hilfreichen Anmerkungen zum Manuskript. Zudem danke ich Herrn Prof. Dr. Ralf Schneider für die Übernahme des Zweitgutachtens.

Ganz besonders möchte ich mich bei Herrn Dr. Satoshi Ejima für die freundliche Betreuung, das Bereitstellen eines schönen Themas und die vielen interessanten Diskussionen bedanken.