

Dieses Blatt wird nicht mehr bewertet!

Falls ein Besprechung gewünscht wird, bitte einen Termin mit mir Abstimmen. Bei

Fragen E-Mail an: thierry@lusi.uni-sb.de

Quellcode, Filme und Bilder bitte in “/home/comphys/comphys_ss17_Abgabe/” im Cip Pool ablegen.

Der schriftliche Teil kann entweder als Pdf beigelegt oder im Postfach von Prof. Rieger abgegeben werden.

Unter “/home/comphys/comphys_ss17/exercises_supplemental/“ finden sie die jeweilig Dateien, die für die Bearbeitung hilfreich sind.

Es werde eine geschlossene Spinkette mit einer geraden Anzahl L an Spins betrachtet, welche durch den Heisenberg-Hamiltonoperator

$$H = J \sum_{i=1}^L \vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+1} = J \sum_{i=1}^L \left[\frac{1}{2} (S_i^+ S_{i+1}^- + S_i^- S_{i+1}^+) + S_i^z S_{i+1}^z \right]$$

beschrieben wird. Aufgrund der periodischen Randbedingungen gilt $\vec{S}_{i+L} = \vec{S}_i$. Für $J > 0$ liegt eine antiferromagnetische Wechselwirkung zwischen den Spins vor.

Als Basisvektoren können die Vektoren

$$|K\rangle = |s_1, s_2, \dots, s_L\rangle$$

gewählt werden, wobei $s_i \in \{-S, -S+1, \dots, S-1, S\}$. S ist hierbei die Spinquantenzahl. Die Dimension des Hilbertraumes ergibt sich somit zu $D = (2S+1)^L$.

Zur Numerierung der Zustände der Kette verschiebt man die Werte der s_i um S , sodass $s_i \in \{0, 1, \dots, 2S\}$. Jedem Zustand $|K\rangle$ kann dann die Nummer

$$K = \sum_{i=1}^L s_i M_S^{i-1}$$

zugeordnet werden, wobei $M_S = 2S+1$.

Die Energielücke zwischen dem Grundzustand und dem ersten angeregtem Zustand verschwindet für unendlich lange Ketten und verringert sich infolgedessen mit wachsender Systemgröße. Diese Verringerung soll im Folgenden untersucht werden.

1. [5 Punkte] Lanczos-Algorithmus

Implementieren Sie in C++ den Lanczos-Algorithmus zur Berechnung der Grundzustandsenergie sowie der Energie des ersten angeregten Zustandes für eine durch den Heisenberg-Hamiltonoperator beschriebene geschlossenen Spinkette der Länge L mit Spinquantenzahl S . Hierbei sei $J = 1.0$.

2. [2.5 Punkte] Spin-1/2-Kette

Berechnen Sie mithilfe des in der vorherigen Aufgabe implementierten Lanczos-Algorithmus die Grundzustandsenergie und die Energie des ersten angeregten Zustandes einer geschlossenen antiferromagnetischen Spin-1/2-Kette der Länge $L \in \{8, 10, 12, 14, 16, 18, 20, 22\}$. Tragen Sie sowohl E_0 , E_1 als auch $\Delta E = E_1 - E_0$ gegen L auf.

Zum Testen Ihres Programmes: Eine geschlossene Kette mit 12 Gitterplätzen besitzt die Grundzustandsenergie $E_0 = -5.38739$.

3. [2.5 Punkte] Spin-1-Kette

Untersuchen Sie nun die Grundzustandsenergie, die Energie des ersten angeregten Zustandes sowie die sich ergebende Energielücke für eine geschlossene antiferromagnetische Spin-1-Kette. Betrachten Sie hierzu Ketten der Länge $L \in \{6, 8, 10, 12, 14, 16\}$. Welchen Unterschied zur Spin-1/2-Kette stellen Sie fest?

Hilfe:

Der Algorithmus zur Berechnung der Tridiagonalmatrix lautet folgendermaßen:

```

Choose initial  $|r\rangle$ 
 $b_0 = |||r\rangle||$ 
 $|q_0\rangle = 0$ 
 $|q_1\rangle = |r\rangle/b_0$ 
FOR  $j=1$  TO  $m$  DO
   $|u\rangle = \mathbf{H}|q_j\rangle$ 
   $|r\rangle = |u\rangle - b_{j-1}|q_{j-1}\rangle$ 
   $a_j = \langle q_j|r\rangle$ 
   $|r\rangle = |r\rangle - a_j|q_j\rangle$ 
  Reorthogonalize(  $|r\rangle$  )
   $b_j = |||r\rangle||$ 
   $|q_{j+1}\rangle = |r\rangle/b_j$ 
END FOR

```

Wichtig für diesen Algorithmus ist die Matrix-Vektor-Multiplikation $H|\psi\rangle$, die folgendermaßen implementiert werden kann:

```

FOR each site  $i$  DO
  FOR  $N1 = 0$  TO  $M_S^{i-1} - 1$  DO
    FOR  $N2 = 0$  TO  $M_S^{L-i-1} - 1$  DO
      FOR  $S1 = 0$  TO  $M_S - 1$  DO
        FOR  $S2 = 0$  TO  $M_S - 1$  DO
          FOR  $S1P = 0$  TO  $M_S - 1$  DO
            FOR  $S2P = 0$  TO  $M_S - 1$  DO
               $K1 = N1 + N2 \cdot M_S^{i+1} + S1 \cdot M_S^{i-1} + S2 \cdot M_S^i$ 
               $K2 = N1 + N2 \cdot M_S^{i+1} + S1P \cdot M_S^{i-1} + S2P \cdot M_S^i$ 
               $HPSI(K2) = HPSI(K1) + H_{MAT}(S1P, S2P, S1, S2) \cdot PSI(K1)$ 
            END FOR
          END FOR
        END FOR
      END FOR
    END FOR
  END FOR
END FOR

```

Die Matrix H_{MAT} bezeichnet den Teil des Hamiltonoperators, der den Spin am Gitterplatz i mit dem Nachbarspin $i + 1$ koppelt. Beachten Sie, dass für i nahe des Randes kleine Modifikationen vorzunehmen sind.