Beispiel (A): Lanczos-Verfahren für das Heisenberg-Modell

Schreiben Sie einen Programm zur Bestimmung der Grundzustandsenergie und des Grundzustandes einer eindimensionalen $S = \frac{1}{2}$ Heisenberg-Kette der Länge L. Der Hamiltonian ist durch

$$H = J^z \sum_{i=0}^{L-1} S_i^z S_{i+1}^z + J^\perp \sum_{i=0}^{L-1} (S_i^x S_{i+1}^x + S_i^y S_{i+1}^y) \tag{1}$$

gegeben. Das Programm soll eine Berechnung für einen beliebigen Wert der z-Komponente des Gesamtspins $S_{tot}^z = \sum_i S_i^z$ und für beliebige J^z und $J^\perp$ mit periodischen Randbedingungen $(\mathbf{S}_L = \mathbf{S}_0)$, erlauben.
Wählen Sie $J^\perp = 1$, und plotten Sie die folgenden Größen für die drei Werte von $J^z = 0, 1, 2$:

a) Die Energiedichte E/L (mit E der Grundzustandsenergie) als Funktion von L für verschiedene L.

b) Der Operator der *antiferromagnetischen Magnetisierung* lautet

$$\hat{M}_z = \frac{1}{L} \sum_{i=0}^{L-1} (-1)^i S_i^z \tag{2}$$

Berechnen Sie den Erwartungswert $\langle 0|\hat{M}_z|0\rangle$, und plotten Sie das Ergebnis als Funktion von L. Was erwarten Sie?

c) Plotten Sie $\langle 0|\hat{M}_z^2|0\rangle$ für verschiedene L.

d) Plotten Sie die statische Korrelationsfunktion $\langle 0|S_0^z S_i^z|0\rangle$ als Funktion von $i = 0 \ldots L-1$.

Hinweise:

- Nutzen Sie die Tatsache, dass S^z mit dem Hamiltonian vertauscht und benutzen Sie die entsprechend reduzierte Basis.
- Schreiben Sie die Komponenten S^x und S^y mit Hilfe der Leiteroperatoren S^+ und S^-.
- Um größere Systeme berechnen zu können, ist es von Vorteil, wenn Sie mit dem Speicher sparsam umgehen. Behalten Sie deshalb nur drei Lanczos-Vektoren im Speicher.
- $|0\rangle$ ist der Grundzustand. Das Lieb-Mattis-Theorem besagt, dass der Grundzustand des antiferromagnetischen Heisenberg Modells ($J^z > 0$) immer im Sektor mit minimalen S_{tot}^z liegt (d.h. im Sektor $S_{tot}^z = 0$ für gerade L und $S_{tot}^z = \frac{1}{2}$ für ungerade L). Bestimmen Sie den Grundzustandssektor für $J^z = 0$ numerisch (scan durch alle S_{tot}^z-Sektoren).