VUMPS-Strukturfaktor mit Einheitszellen

Friday 1st February, 2019

- m, n geht über verschiedene Einheitszellen
- j, j' geht innerhalb der Zelle von 0 bis $L_c - 1$
- L_c ist die Zellengröße

$$
\begin{aligned}
s^{\alpha\beta}(q) &:= \frac{1}{|\mathbb{Z}|} \sum_{m,n\in\mathbb{Z}} \sum_{j,j'\in\text{cell}} e^{-iq(nL_c - mL_c + j - j')} \left\langle O^{\beta\dagger}_{n,j} O^{\alpha}_{m,j'} \right\rangle \\
&= \sum_{n\in\mathbb{Z}} \sum_{j,j'\in\text{cell}} e^{-iq(nL_c + j - j')} \left\langle O^{\beta\dagger}_{n,j} O^{\alpha}_{0,j'} \right\rangle \\
&= \sum_{j,j'\in\text{cell}} e^{-iq(j-j')} \cdot \left(\sum_{n\in\mathbb{Z}} e^{-iqnL_c} \left\langle O^{\beta\dagger}_{n,j} O^{\alpha}_{0,j'} \right\rangle \right) \\
&=: \sum_{j,j'\in\text{cell}} e^{-iq(j-j')} \cdot s^{\alpha\beta}_{jj'}(q)
\end{aligned}
\tag{1}
$$

Strukturfaktor zwischen Einheitszellen:

$$
s^{\alpha\beta}_{jj'}(q) := \sum_{n\in\mathbb{Z}} e^{-iqnL_c} \left\langle O^{\beta\dagger}_{n,j} O^{\alpha}_{0+j'} \right\rangle \tag{2}
$$

Zerfällt in $n = 0$, $n > 0$, $n < 0$:

$$
\begin{aligned}
s^{\alpha\beta}_{jj'}(q) &= \left\langle O^{\beta\dagger}_{0+j} O^{\alpha}_{0,j'} \right\rangle + \sum_{n\in\mathbb{N}} e^{-iqnL_c} \left\langle O^{\beta\dagger}_{n,j} O^{\alpha}_{0,j'} \right\rangle + \sum_{n\in\mathbb{N}} e^{+iqnL_c} \left\langle O^{\beta\dagger}_{-n,j} O^{\alpha}_{0,j'} \right\rangle \\
&= \left\langle O^{\beta\dagger}_{nL_c+j} O^{\alpha}_{0,j'} \right\rangle + \sum_{n\in\mathbb{N}} e^{-iqnL_c} \left\langle O^{\alpha\dagger}_{0,j'} O^{\beta}_{n,j} \right\rangle + \sum_{n\in\mathbb{N}} e^{+iqnL_c} \left\langle O^{\beta\dagger}_{0,j} O^{\alpha}_{n,j'} \right\rangle \\
&= s^{\alpha\beta}_{jj',\text{cell}} + s^{\alpha\beta}_{jj',\text{inter}}(q)
\end{aligned}
\tag{3}
$$

Es wird $s^{\alpha\beta}_{jj',\text{inter}}(q)$ von `intercellSF` (mehrere q-Werte), `intercellSFpoint` (ein q-Wert) berechnet. Die volle Transformation geschieht mit `SF` und `SFpoint`. Der Faktor L_c in der Exponentialfunktion hat vorher gefehlt.

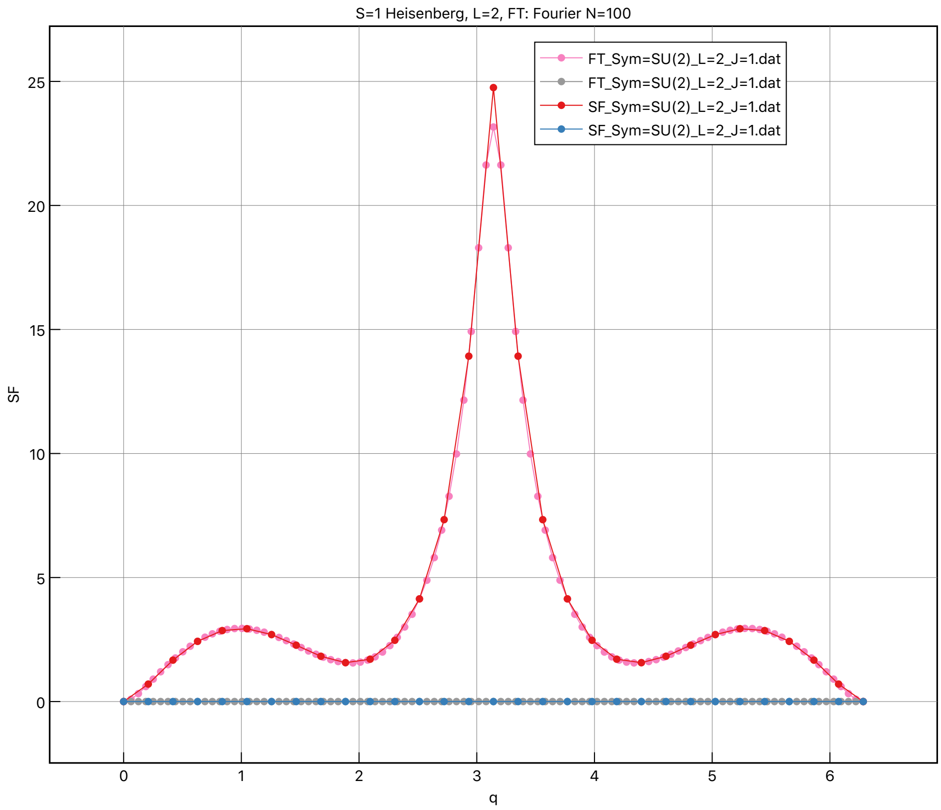
Außerdem scheint die Annahme $\left(O^{\alpha,\beta}\right)^\dagger = O^{\alpha,\beta}$, bzw. $O^{\alpha\dagger}O^{\beta} = O^{\beta\dagger}O^{\alpha}$ getroffen zu werden, da nur das Produkt vorkommt und man die konjugierten Operatoren nicht übergibt. In "Tangent-space methods for uniform matrix product states" (Kap. 2.5) verschwinden dann einfach die Kreuze...

Für $j = j'$ muss eigentlich nur ein Term berechnet werden:

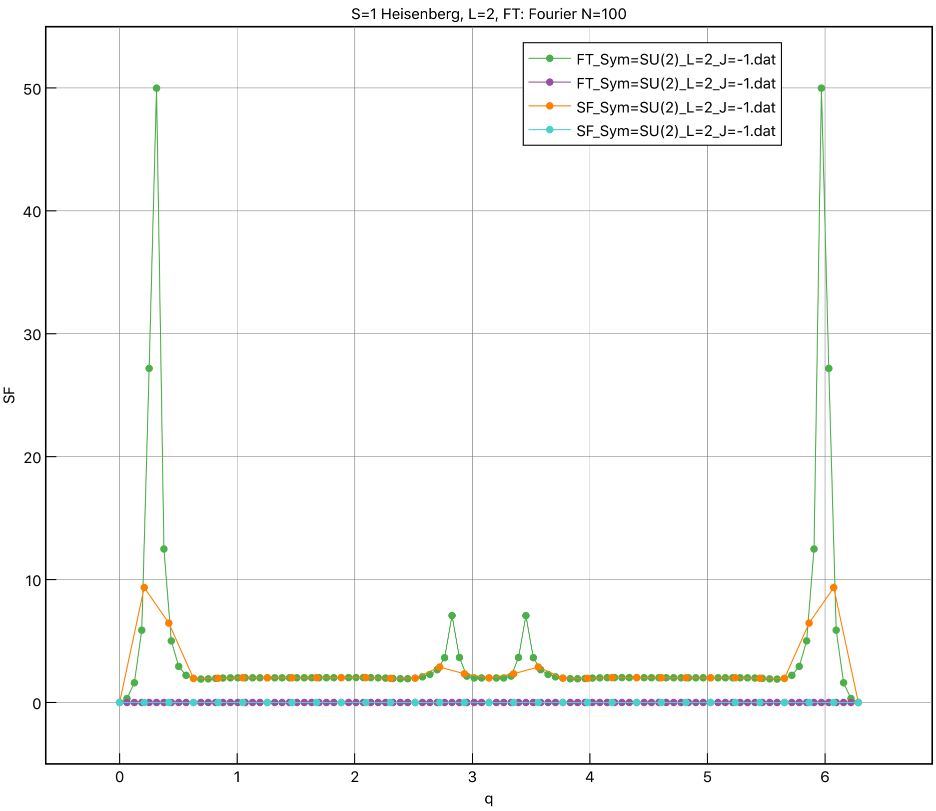
$$s^{\alpha\beta}_{jj,\text{inter}}(q) = \sum_{n\in\mathbb{N}} \left(e^{-iqnL_c} + e^{+iqnL_c}\right) \left\langle O_j^\dagger O_j \right\rangle = 2\text{Re} \sum_{n\in\mathbb{N}} e^{-iqnL_c} \left\langle O_j^\dagger O_j \right\rangle \tag{4}$$

Die Gleichheit der Terme sieht man numerisch, wird aber nicht ausgenutzt.

Für einen AFM sieht das ganze jetzt so aus:



Für einen FM ist das Maximum allerdings nicht ganz bei $q = 0$... Liegt es vielleicht daran, dass der Zustand zu schlecht ist (Ferromagnetismus im $S = 0$-Unterraum)?...


S=1 Heisenberg, L=2, FT: Fourier N=100
FT_Sym=SU(2)_L=2_J=-1.dat
FT_Sym=SU(2)_L=2_J=-1.dat
SF_Sym=SU(2)_L=2_J=-1.dat
SF_Sym=SU(2)_L=2_J=-1.dat
SF
q
0
10
20
30
40
50
0
1
2
3
4
5
6