

Aufgabenblatt 13

123.1 DMRG mit ALPS

In dieser Aufgabe sollen Grundzustandsenergien für große Spinringe mittels ALPS ausgerechnet werden.

- a. Laden Sie das Programmpaket ALPS von der Webseite herunter und installieren Sie es: http://alps.comp-phys.org/mediawiki/index.php/Download_and_install_ALPS_2
Damit es läuft, müssen Sie unter Linux und MAC den Pfad erweitern, am besten in `.profile` oder `.bash_profile`. Die ALPS binaries stehen in `/opt/alps/bin`.
- b. Studieren Sie die Tutoriumsseite
http://alps.comp-phys.org/mediawiki/index.php/ALPS_2_Tutorials:DMRG-01_DMRG.
- c. Laden Sie die Datei `spin_one_half` von der Tutoriumsseite herunter und berechnen Sie wie angegeben die Grundzustandsenergie der Spin-1/2-Heisenberg-Kette für verschiedene Längen. Überprüfen Sie, ob die Grundzustandsenergie pro Spin gegen die Lösung des Bethe-Ansatzes konvergiert.
- d. Laden Sie die Dateien `spin_one` und `my_lattices.xml` von der Tutoriumsseite herunter und beseitigen Sie den Tippfehler in der ersten Zeile von `spin_one`. Berechnen Sie die Grundzustandsenergie des Singletts, d.h. `Sz_total=0`, für unterschiedliche Kettenlängen sowie ebenso des Tripletts, d.h. `Sz_total=1`. Überprüfen Sie, ob die Differenz gegen das Haldane-Gap geht.