

*Universidade de São Paulo*  
*Projeto de mestrado*

# O grupo de renormalização da matriz densidade aplicado à sistemas quânticos abertos

Heitor Casagrande  
Orientador: Gabriel Teixeira Landi

## Resumo

O grupo de renormalização da matriz densidade (DMRG, da sigla em inglês) constitui um dos principais avanços recentes no estudo de sistemas quânticos fortemente correlacionados. Apesar de desafiador do ponto de vista computacional, este método permite extrair diversas propriedades de cadeias unidimensionais com notável eficiência. Recentemente foram propostos algoritmos que estendem esse formalismo para lidar também com sistemas quânticos abertos, algo de importância para o entendimento das propriedades de transporte em sistemas quânticos. Neste projeto propomos a implementação de um código de DMRG para a simulação de cadeias de spin conectadas a reservatórios térmicos nas extremidades, usando esta generalização recente. Tal implementação abrirá a oportunidade para diversos estudos de transporte em cadeias quânticas. Em particular, estudaremos o problema de uma cadeia de spin do tipo XXZ a fim de entender o papel do gap de energia na propagação de magnons no sistema.



**Figura 1:** Exemplo típico de um sistema fortemente correlacionado aberto. Na figura mostramos uma cadeia uni-dimensional conectada a dois reservatórios mantidos à temperaturas distintas. O gradiente de temperatura entre os reservatórios causará uma corrente de calor do reservatório mais quente para o reservatório mais frio, que será fortemente influenciada pelas interações entre os constituintes da cadeia.

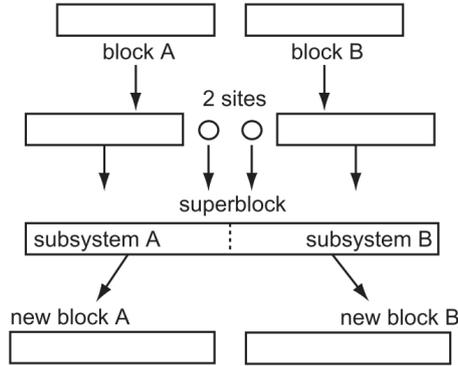
## 1 Introdução

Sistemas quânticos fortemente correlacionados constituem um dos principais tópicos de pesquisa atual em física da matéria condensada. O aspecto mais marcante destes sistemas é a incapacidade de descrevê-los usando técnicas tradicionais, como teoria de perturbação e métodos variacionais *alla* campo médio. Isso é uma consequência da presença de emaranhamento altamente não local, tornando necessário o uso de outras ferramentas. Entre elas, uma que se destaca é o grupo de renormalização da matriz densidade (“*Density Matrix Renormalization Group*”, DMRG) [1,2], que fornece uma receita numérica para truncar o espaço de Hilbert de cadeias unidimensionais de maneira otimizada, permitindo estudar sistemas de tamanho arbitrariamente grandes.

Uma extensão natural deste tipo de problema diz respeito a cadeias unidimensionais na presença de reservatórios externos [3–12]. O exemplo tradicional está ilustrado na Fig. 1: uma cadeia, por exemplo de spins, está conectada a dois reservatórios mantidos à temperaturas distintas. Este gradiente de temperatura gera uma corrente de energia do reservatório mais quente para o reservatório mais frio, que será fortemente influenciada pela interação entre os elementos da cadeia. Entender as propriedades de transporte de sistemas como este constitui um desafio importante, tanto do ponto de vista fundamental, no que diz respeito ao entendimento da física de sistemas de muitos corpos, quanto do ponto de vista aplicado, já que tal *setup* se enquadra diretamente no contexto, por exemplo, da spintrônica e magnônica [13].

Recentemente foi proposto um algoritmo de DMRG otimizado para sistemas quânticos abertos [14]. O objetivo deste projeto é implementar este algoritmo e estudar algumas aplicações simples. A implementação deste código é desafiadora e será parte de um esforço coletivo, em colaboração com o grupo do Prof. Luis Gregório Dias do IFUSP, que também está interessado no problema. Para tal, usaremos a biblioteca iTensor (<http://itensor.org/index.html>) baseada no conceito de *Matrix Product States* (MPS).

A presente proposta versa sobre um tema que está na fronteira do conhecimento na área de sistemas fortemente correlacionados e permitirá, no futuro, estudar uma gama enorme de problemas importantes na física da matéria condensada. O Prof. Landi já possui ampla experiência nas propriedades de cadeias unidimensionais abertas [9–12] e já desenvolveu uma implementação tipo “proof of principle” deste algoritmo (resultados ainda não publicados). Já o Prof. Gregório Dias é especialista no método do grupo de renormalização numérico (NRG), que possui aspectos semelhantes ao DMRG. Acreditamos, portanto, estar numa



**Figura 2:** Exemplo típico da construção do estado fundamental de uma cadeia unidimensional usando o método do DMRG. Retirado de [2].

posição única de investir em algo que poderá render frutos por anos a fio.

Passaremos agora a descrever em mais detalhes a fundamentação teórica (Sec. 2) e os objetivos específicos do projeto (Sec. 3).

## 2 Fundamentação teórica

### Formulação tradicional do DMRG

O DMRG é um método variacional e, portanto, tem como objetivo encontrar o estado fundamental de um certo Hamiltoniano  $H$ . Seja  $|\phi_0\rangle$  a função de onda do estado fundamental. Então

$$H|\phi_0\rangle = E_0|\phi_0\rangle \quad (1)$$

De acordo com o princípio variacional, dada uma função de onda qualquer  $|\psi\rangle$ , teremos então que

$$E_0 \leq \langle \psi | H | \psi \rangle \quad (2)$$

Portanto, quanto melhor for a escolha da função de onda  $|\psi\rangle$ , mais próximo chegaremos do estado fundamental.

A idéia do DMRG é construir a função de onda aproximada do ground-state para uma cadeia unidimensional, crescendo gradativamente a cadeia e truncando o espaço de Hilbert a cada passo baseando-se nos autovalores da matriz densidade. O exemplo básico está ilustrado na Fig. 2. A cada passo adiciona-se dois sítios no meio da cadeia e calcula-se o estado fundamental do “super-bloco”. Em seguida separamos o sistema em duas partes (A e B) e calculamos a matriz densidade reduzida  $\rho_A$  e  $\rho_B$  de cada bloco. Neste passo truncamos então o espaço de Hilbert escolhendo apenas os autoestados de  $\rho_A$  e  $\rho_B$  com maiores autovalores.

### O DMRG para sistemas quânticos abertos

Sistemas quânticos abertos podem ser modelados usando a equação mestra de Lindblad [?]. Para a situação usual descrita na Fig. 1 a equação de Lindblad

teria a forma

$$\frac{d\rho}{dt} = -i[H, \rho] + D_a(\rho) + D_b(\rho) := \mathcal{L}(\rho) \quad (3)$$

onde  $H$  é o Hamiltoniano da cadeia e  $D_i(\rho)$  é o dissipator, que representa o contato do sistema com o reservatório  $i$ . O super-operador  $\mathcal{L}(\rho)$  é chamado de Liouvilliano e engloba todas as contribuições para a dinâmica do sistema.

A Eq. (3) é uma equação linear para a matriz densidade  $\rho$ . Podemos então listar os elementos de  $\rho$  na forma de um vetor, procedimento conhecido como *vetorização* e que nos permite representar a matriz densidade por um vetor  $|\rho\rangle$  que vive em um espaço maior, conhecido como espaço de Liouville. Neste caso a Eq. (3) assume a forma de uma equação linear

$$\frac{d|\rho\rangle}{dt} = \hat{\mathcal{L}}|\rho\rangle \quad (4)$$

onde  $\hat{\mathcal{L}}$  é uma matriz associada ao super-operador  $\mathcal{L}(\rho)$ . Devido à estrutura da equação de Lindblad, essa matriz será uma matriz estocástica. Isso significa que suas colunas somam a 0 e todos os seus autovalores possuem parte real menor ou igual a zero. Estamos interessados no estado estacionário da Eq. (4); ou seja, na situação onde  $d|\rho_{ss}\rangle/dt = 0$ . Neste caso obtemos

$$\hat{\mathcal{L}}|\rho_{ss}\rangle = 0 \quad (5)$$

Vemos, portanto, que o estado estacionário é o autovalor da matriz  $\hat{\mathcal{L}}$  com autovalor zero. Se o estado estacionário for único, como em geral é o caso, esse autovalor será único.

Neste ponto notamos a semelhança entre a Eq. (5) e a Eq. (1): em ambos os casos estamos interessados em calcular um autoestado correspondente a um autovalor específico de um operador. Há, no entanto, uma diferença fundamental: a matriz  $\hat{\mathcal{L}}$  na Eq. (5) não é Hermitiana. Na Ref. [14] foi proposto uma alternativa para este problema que é ao mesmo tempo simples e genial: ao invés de considerarmos a matriz  $\hat{\mathcal{L}}$ , consideraremos os autoestados da matriz  $\hat{\mathcal{L}}^\dagger \hat{\mathcal{L}}$ . Se  $|\rho_{ss}\rangle$  satisfaz a Eq. (5) então também será verdade que

$$\hat{\mathcal{L}}^\dagger \hat{\mathcal{L}}|\rho_{ss}\rangle = 0 \quad (6)$$

Mas, agora, a matriz  $\hat{\mathcal{L}}^\dagger \hat{\mathcal{L}}$  será Hermitiana e o autovalor nulo será exatamente o seu menor autovalor (já que todos os outros serão positivos). Portanto, com essa pequena modificação obtemos *exatamente* o setup considerado no DMRG tradicional, Eq. (1). Com isso podemos alternar entre a implementação tradicional do DMRG e a implementação para sistemas quânticos abertos.

### 3 Objetivos do projeto

Este projeto tem dois objetivos centrais:

1. Implementar o código de DMRG para sistemas quânticos abertos usando a biblioteca iTensor.
2. Simular uma cadeia de spin do tipo XXZ conectada a dois reservatórios a fim de calcular a corrente de magnetização no sistema.

Para realizar estes objetivos, o estudante deverá concluir as seguintes etapas:

### **(a) Familiarização com a biblioteca iTensor e o formalismo de Matrix Product States**

Para isso o aluno irá se basear nas referências tradicionais como por exemplo a Ref. [2]. Além disso, ele deverá investigar a fundo a documentação da biblioteca iTensor, que possui diversos tutoriais interessantes.

### **(b) Familiarização com a simulação numericamente exata e com resultados analíticos**

Com o intuito de comparar os resultados numéricos com a literatura, o aluno deverá se familiarizar com os resultados já existentes na literatura. Em particular a Ref. [11], que possui resultados exatos para a cadeia de Heisenberg, válidos para qualquer tamanho. Estes resultados deverão servir de guia para o desenvolvimento das simulações. O aluno deverá se familiarizar também com a solução numericamente exata para cadeias pequenas, que também servirá como uma importante fonte de comparação.

### **(c) Implementação do código de DMRG**

A implementação do código será feita em conjunto com o grupo do Prof. Luis Gregório Dias. Pretendemos implementar um código que possa simular tanto o DMRG tradicional quanto o DMRG para sistemas quânticos abertos. O Prof. Landi já possui uma implementação do tipo “proof-of-principle” que servirá como guia para o estudante.

### **(d) Simulações da cadeia XXZ**

Como aplicação, o aluno estudará a cadeia XXZ na presença de dois reservatórios. O Hamiltoniano do sistema é dado por

$$H = \sum_i \left\{ \sigma_i^x \sigma_{i+1}^x + \sigma_i^y \sigma_{i+1}^y + \Delta \sigma_i^z \sigma_{i+1}^z \right\} \quad (7)$$

No limite  $\Delta = 1$  recuperamos a cadeia de Heisenberg. Neste caso o aluno poderá comparar as simulações com os resultados analíticos da Ref. [11]. Para  $\Delta > 1$  sabe-se que se abre um gap no espectro de excitação da cadeia, causando um impacto significativo nas propriedades de transporte da cadeia. Entender este efeito será a principal aplicação deste projeto.

Abaixo listamos o cronograma para o desenvolvimento das atividades (a)-(d) descritas acima, divididas semestralmente.

- 2017-2: disciplinas da pós graduação; tópicos (a) e (b).
- 2018-1: disciplinas da pós graduação; término dos tópicos (a) e (b); início do tópico (c)
- 2018-2: tópicos (c) e (d).
- 2019-1: término do tópico (d) e escrita da dissertação.

## 4 Conclusões e perspectivas

O presente projeto propõe a implementação de um algoritmo extremamente útil na simulação de sistemas fortemente correlacionados. Tal implementação constitui uma tarefa complexa, mas que acreditamos ser possível uma vez que representa um esforço conjunto de dois grupos de pesquisa que já possuem ampla experiência em temas correlatos. Além disso, os frutos desta empreitada serão colhidos por anos a fio, uma vez que este código colocará o estudante na fronteira do conhecimento em física da matéria condensada.

## Referências

- [1] S. R. White, “Density matrix formulation for quantum renormalization groups,” *Physical Review Letters*, vol. 69, no. 19, pp. 2863–2866, 1992.
- [2] U. Schollwöck, “The density-matrix renormalization group in the age of matrix product states,” *Annals of Physics*, vol. 326, no. 1, pp. 96–192, 2011.
- [3] J. J. Mendoza-Arenas, S. R. Clark, and D. Jaksch, “Coexistence of energy diffusion and local thermalization in nonequilibrium X X Z spin chains with integrability breaking,” *Physical Review E*, vol. 91, p. 042129, 2015.
- [4] J. J. Mendoza-Arenas, T. Grujic, D. Jaksch, and S. R. Clark, “Dephasing enhanced transport in nonequilibrium strongly correlated quantum systems,” *Physical Review B*, vol. 87, p. 235130, jun 2013.
- [5] D. Karevski, V. Popkov, and G. Schütz, “Exact Matrix Product Solution for the Boundary-Driven Lindblad XXZ Chain,” *Physical Review Letters*, vol. 110, p. 047201, jan 2013.
- [6] D. Karevski and T. Platini, “Quantum Nonequilibrium Steady States Induced by Repeated Interactions,” *Physical Review Letters*, vol. 102, p. 207207, may 2009.
- [7] T. Prosen, “Exact Nonequilibrium Steady State of a Strongly Driven Open XXZ Chain,” *Physical Review Letters*, vol. 107, p. 137201, sep 2011.
- [8] T. Prosen, “Open XXZ Spin Chain: Nonequilibrium Steady State and a Strict Bound on Ballistic Transport,” *Physical Review Letters*, vol. 106, p. 217206, may 2011.
- [9] P. H. Guimarães, M. J. de Oliveira, and G. T. Landi, “Non-equilibrium quantum chains under multi-site Lindblad baths,” *Physical Review E*, vol. 94, p. 032139, 2016.
- [10] J. P. Santos and G. T. Landi, “Microscopic theory of a non-equilibrium open bosonic chain,” *Physical Review E*, vol. 94, p. 062143, 2016.
- [11] G. T. Landi and D. Karevski, “Open Heisenberg chain under boundary fields : A magnonic logic gate,” *Physical Review B*, vol. 91, p. 174422, 2015.
- [12] G. T. Landi, E. Novais, M. J. de Oliveira, and D. Karevski, “Flux rectification in the quantum XXZ chain,” *Physical Review E*, vol. 90, p. 042142, oct 2014.

- [13] A. V. Chumak, A. A. Serga, and B. Hillebrands, “Magnon transistor for all-magnon data processing.,” *Nature communications*, vol. 5, p. 4700, jan 2014.
- [14] J. Cui, J. I. Cirac, and M. C. Bañuls, “Variational Matrix Product Operators for the Steady State of Dissipative Quantum Systems,” *Physical Review Letters*, vol. 114, p. 220601, 2015.