

UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO

INSTITUTO DE FÍSICA

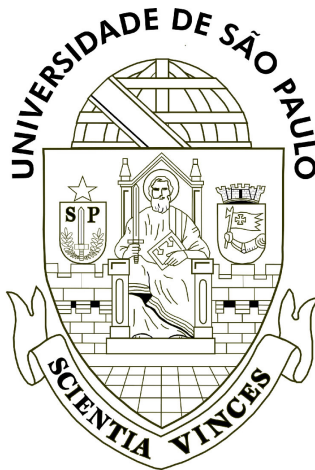
TEORIA QUÂNTICA DE MUITOS CORPOS EM MATÉRIA CONDENSADA

O Método DMRG

Marcos H. L. DE MEDEIROS
Nº USP: 7161250

Professor:
Luis G. G. de V. DIAS DA SILVA

10 de janeiro de 2016



I. RESUMO

Esse trabalho visa apresentar as ideias por trás do método DMRG, suas origens no esquema NRG e, por meio de um exemplo, mostrar como as iterações do método evoluem e quais cuidados devemos ter no processo de medida de observáveis. Apesar desse trabalho focar nos aspectos principais e na formulação original, deve ser dito que, desde sua formulação em 1992, o método tem evoluído e se adaptado a outros contextos como física nuclear e química teórica, sendo uma das opções mais adotadas para a simulação de sistemas fortemente correlacionados.

II. INTRODUÇÃO

De maneira bem simplificada, o método DMRG, sigla para *Density Matrix Renormalization Group*, consiste num método numérico para resolução de problemas de autovalores. Idealizado para simular sistemas quânticos fortemente correlacionados unidimensionais, o método tem sido adaptado também para sistemas bidimensionais [1],[2]. Para sistemas unidimensionais tal método se tornou uma das escolhas mais adotadas dada a precisão sem precedentes alcançada pelo algoritmo.

Métodos variacionais são utilizados em grande parte dos problemas atuais em física teórica. O método DMRG é um método variacional, no entanto, baseado na diagonalização exata do Hamiltoniano do sistema sob estudo e nas ideias de grupo de renormalização numérico (NRG). Desenvolvido por Steve White em 1992 (num artigo com mais 2500 citações) [1] o método DMRG é um desenvolvimento das ideias do NRG de Wilson [3].

A grande dificuldade, que o método DMRG visa superar, é o tamanho do espaço de Hilbert exigido para a descrição dos sistemas de interesse. O uso de métodos aproximativos é mandatário mesmo no tratamento de átomos maiores que o de Hidrogênio e em moléculas pequenas. A estratégia embutida no método DMRG é a de usar uma base na qual o estado fundamental seja representado por apenas alguns estados de base. Ou seja, de modo que possamos desconsiderar a contribuição de boa parte dos estados que compõem essa base, diminuindo assim a dimensão do espaço de Hilbert.

Em muitos casos, as propriedades dos sólidos podem ser bem descritas por meio de modelos de campo efetivo atuando em um único corpo. Tal aproximação pode ser realizada em sistemas onde o efeito de *screening* do campo Coulombiano, devido aos núcleos e elétrons no material, é suficientemente eficiente. Esse esquema pode falhar conforme varios efeitos invalidem a exigência de que as interações efetivas sejam fracas, o que nos leva ao âmbito de sistemas fortemente correlacionados. Para estudar tais sistemas, *Hamiltonianos simplicados* foram construídas no intuito de reter apenas os elementos necessários para a descrição dos fenômenos físicos de interesse.

Devido a "localização" dos sistemas, são usados modelos do tipo *tight-binding*, nos quais os orbitais sobre cada sítio da rede pode assumir $N_{site} = 4$ diferentes estados de até dois elétrons ($|0\rangle, |\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle$). O modelo mais simples, para um único orbital de valência, que contenha o termo de energia cinética (*hopping* do elétron entre os sítios i e j com amplitude t_{ij}) e a repulsão Coulombiana é o conhecido modelo *on-site* de Hubbard ([4], [5]), cuja Hamiltoniana fica dada por

$$\hat{\mathcal{H}}_{Hubbard} = - \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} t_{ij} (c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + H.c.) + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}, \quad (1)$$

onde $\langle \rangle$ representa ligações. No limite em que $U/t \gg 1$, a ocupação dupla $|\uparrow\downarrow\rangle$ pode ser desprezada, resultando no chamado modelo $(t - J)$ ([6]) de $N_{site} = 3$ estados:

$$\hat{\mathcal{H}}_{tJ} = - \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} t_{ij} (c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + H.c.) + \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} \left(\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - \frac{1}{4} n_{i\uparrow} n_{j\downarrow} \right), \quad (2)$$

onde o termo de interação spin-spin $J_{ij} = 4t_{ij}^2/U$ é devido ao processo de *hopping* virtual de segunda ordem, que só é possível para elétrons de spin opostos nos sítios i e j . No caso de "semi-preenchimento" ($n = 1$), quando $n_i \equiv 1$ para todos os sítios, *hopping* se torna impossível e o termo $\frac{1}{4} n_i n_j$ é reduzido a uma constante. Dessa forma o modelo $t - J$ se reduz ao modelo de spin 1/2 de Heisenberg:

$$\hat{\mathcal{H}}_{Heisenberg} = \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j). \quad (3)$$

Nesse trabalho, usaremos sempre que necessário, o modelo de Heisenberg como exemplo. Mas deve se ter em mente que o método DMRG é bem mais abrangente que isso. A quantidade de trabalhos sobre o método DMRG é enorme e propriedades e discussões importantes sobre o método que não entraram nesse trabalho podem ser encontradas em detalhes através das referências [7]-[9] presentes na bibliografia.

III. IDEIA BÁSICA: A DIAGONALIZAÇÃO TRUNCADA

A questão de interesse nessa seção é a seguinte: *Como devemos escolher dentre os estados que formam a base aqueles que manteremos para representar o estado fundamental?* No fundo, o que se deseja é quantificar a informação perdida no processo, que chamaremos aqui de "diagonalização truncada". A título de exemplo, vamos estudar o caso de uma cadeia unidimensional de "spins". Tal sistema será descrito pelo Hamiltoniano de Heisenberg.

I. O problema com dois spins

O espaço de Hilbert para o caso em que há apenas dois spins é dado pelas quatro possíveis combinações

$$\{|\uparrow\uparrow\rangle, |\uparrow\downarrow\rangle, |\downarrow\uparrow\rangle, |\downarrow\downarrow\rangle\}. \quad (4)$$

O Hamiltoniano que descreve tal sistema é dado por

$$\hat{H} = \hat{S}_1^z \hat{S}_2^z + \frac{1}{2}[\hat{S}_1^+ \hat{S}_2^- + \hat{S}_1^- \hat{S}_2^+]. \quad (5)$$

Colocando na forma matricial temos

$$\hat{H} = \hat{S}^z \otimes \hat{S}^z + \frac{1}{2}[\hat{S}^+ \otimes \hat{S}^- + \hat{S}^- \otimes \hat{S}^+]. \quad (6)$$

Tomando $\hbar = 1$ e usando a representação que utilize $\{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\}$ como base para um sítio (ou spin), temos a seguinte representação para o Hamiltoniano:

$$\begin{aligned} H &= \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} + \frac{1}{2} \left[\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \right] \\ &= \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & 0 \\ 0 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (7)$$

Assim, temos uma matriz diagonal por blocos para a qual os autovetores são de fácil obtenção e resultam no estado de singleto $|s\rangle = 1/\sqrt{2} = [|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle]$, com autovalor de energia $E_s = -3/4$ e nos três estados do tripleto $\{|\uparrow\uparrow\rangle, |\downarrow\downarrow\rangle, 1/\sqrt{2}[|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle]\}$, com energia $E_t = 1/4$.

II. O problema com Muitos Spins

O problema de encontrar o estado fundamental e sua correspondente energia foi de fácil solução no exemplo de dois spins. No entanto estamos interessados em sistemas de muitos corpos e é nestes casos que a estratégia de diagonalização truncada se faz necessária. Vamos acrescentar um sítio ao problema anterior. Novamente para esse sítio temos duas possibilidades: $|\uparrow\rangle$ ou $|\downarrow\rangle$. A matriz hamiltoniana para esse caso terá dimensão 8×8 e pode ser obtida por:

$$H_3 = H_2 \otimes \mathbb{1}_2 + \tilde{S}_2^z \otimes S^z + \frac{1}{2}[\tilde{S}_2^+ \otimes S^- + \tilde{S}_2^- \otimes S^+] \quad (8)$$

Onde as matrizes escritas com "til" são definidas por:

$$\tilde{S}_2^z = \mathbb{1}_2 \otimes S^z \quad (9)$$

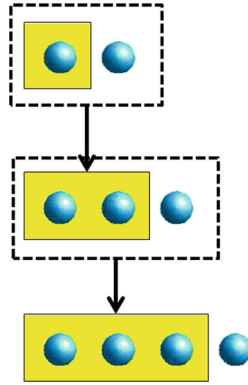


Figura 1: Esquema do processo iterativo de crescimento do sistema pela adição de sítios à direita (imagem retirada de [8]).

e

$$\tilde{S}_2^\pm = \mathbb{1}_2 \otimes S^\pm. \quad (10)$$

Dessa forma podemos elaborar um esquema iterativo para construir uma matriz hamiltoniana de dimensão $2^i \times 2^i$ onde no i -ésimo passo teríamos:

$$H_i = H_{i-1} \otimes \mathbb{1}_2 + \tilde{S}_{i-1}^z \otimes S^z + \frac{1}{2}[\tilde{S}_{i-1}^+ \otimes S^- + \tilde{S}_{i-1}^- \otimes S^+], \quad (11)$$

onde

$$\tilde{S}_{i-1}^z = \mathbb{1}_{2^{i-2}} \otimes S^z \quad (12)$$

e

$$\tilde{S}_{i-1}^\pm = \mathbb{1}_{2^{i-2}} \otimes S^\pm. \quad (13)$$

Podemos pensar no procedimento iterativo descrito acima como uma adição gradual de "sítios" ou spins a direita de um bloco de sítios preexistente, como mostrado na fig.(1). O bloco possui uma Hamiltoniana que é iterativamente construída pela conexão de novos sítios através dos termos de interação adicionados.

A princípio podemos continuar o processo de construção da hamiltoniana até atingirmos o tamanho real do sistema no qual estamos interessados. No entanto, sistemas com N sítios serão descritos por uma base de tamanho 2^N , ou seja, o número de linhas e colunas da matriz Hamiltoniana cresce exponencialmente com o número de sítios. Por mais que possamos aproveitar as simetrias dos sistemas para reduzir a matriz que precisaremos diagonalizar, isso nem sempre é suficiente dado o número realmente grande de sítios envolvidos no cálculo. Uma solução para esse problema remonta ao grupo de renormalização numérico de Wilson.

Suponha que tenhamos diagonalizado a hamiltoniana de Heisenberg para uma cadeia de N spins e obtido o estado fundamental dado por:

$$|\psi\rangle = \sum_{s_1, s_2, \dots, s_N} a_{s_1, s_2, \dots, s_N} |s_1, s_2, \dots, s_N\rangle \quad (14)$$

onde a soma é tomada sobre todas as possíveis configurações de N spins. Se "plotarmos" num gráfico os pesos estatísticos de cada estado $|a_{s_1, s_2, \dots, s_N}|^2$ em ordem decrescente, encontraremos uma estrutura semelhante a apresentada no painel direito da fig.(2): os maiores pesos se concentrarão em alguns poucos estados e restará uma longa "calda" de estados com probabilidades menores de serem medidos.

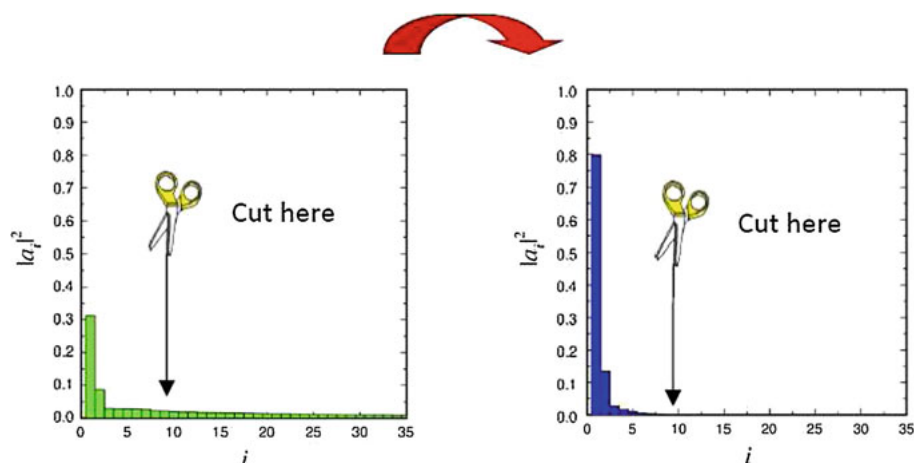


Figura 2: Esquema de um processo ideal de truncagem. Através de uma mudança de base, há uma concentração dos pesos em poucos estados minimizando a perda de informação após a truncagem (imagem retirada de [8]).

Podemos ficar inclinados a "cortar"(ou truncar) a base de modo que fiquemos apenas com alguns estados de maior peso e desprezemos todo o restante. Contudo, desprezar tantos estados de pesos menores pode levar a desprezar uma parte importante da física envolvida. Esse problema, contudo, é dependente da base escolhida para representar os estados. Se escolhermos um base de uma maneira inteligente podemos fazer com que haja uma maior concentração dos pesos estatísticos e diminua, assim, a quantidade de *informação* perdida no processo de truncagem, como mostrado no painel da direita na fig.(2).

Essa é uma ideia muito simples e elegante, mas para que funcione precisamos conhecer um método que nos auxilie a escolher a melhor representação. Isso, todavia, não é em princípio uma tarefa trivial. O se precisa é um meio de quantificar a informação.

III. Método NRG

A ideia do método NRG inspirou a elaboração do método DMRG e colocarei aqui, de forma resumida, a título de fundamentar o restante da discussão. Imagine que determinemos um valor máximo m de estados que vamos manter para descrever o estado fundamental. Seguindo nosso procedimento iterativo, de acrescentar sítios à direita, temos que em cada passo do processo a dimesão do espaço de Hilbert cresce por um fator de 2. Dessa forma, em algum momento do nosso procedimento a dimensão da base se tornará maior que m . Ao atingir esse ponto, execut-se a regra de truncamento: *diagonaliza-se a matriz Hamiltoniana e conserva-se somente os m estados com os menores autovalores.*

Conforme o sistema cresce, mudamos a base que descreve o **bloco de sítios à esquerda** ao "girarmos" para a nova base de autoestados do Hamiltoniano. Isso é feito mediante uma transformação unitária U . A matriz que representa U nada mais é que a matriz formada pelos autovetores ordenados em colunas. Agora temos que executar dois passos ao acrescentarmos um sítio ao bloco: (i) precisamos construir os operadores "til", assim como antes e (ii) aplicar a "rotação" U a matriz Hamiltoniana e aos operadores "til".

Vamos assumir que, antes de adicionarmos um sítio, a base para o bloco antigo seja $\{|\alpha_{i-1}\rangle\}$ com dimensão D_{i-1} e que a base para um sítio seja $\{|s_i\rangle\}$ com dimensão d . O novo bloco, também

chamado de **bloco aumentado**, terá como base $\{|\alpha_{i-1}, s_i\rangle\}$ com dimesão $d \times D_{i-1}$, diagonalizando essa base teremos nossa nova base $\{|\alpha_i\rangle\}$. A matriz de mudança de base U (ou de rotação), cuja dimensão é $D_i \times D_i$ é construída pelo arranjo dos autovetores com os $D_i = m$ menores autovalores em colunas:

$$U_{\alpha_{i-1}s_i, \alpha_i} = \langle \alpha_{i-1}s_i | \alpha_i \rangle. \quad (15)$$

O cuidado de tomarmos somente os m vetores com os menores autovalores só faz sentido a partir do momento que a base necessária para descrever o sistema tenha ultrapassado esse o valor m , caso contrário, devemos tomar todos os autovetores do hamiltoniano, ou todos autovetores do hamiltoniano que satisfaçam alguma simetria desejada.

Antes da rotação, os operadores possuem os seguintes elementos de matriz:

$$\tilde{O}_{\alpha_{i-1}s_i, \alpha'_{i-1}s'_i} = \langle \alpha_{i-1}s_i | \hat{O} | \alpha'_{i-1}s'_i \rangle \quad (16)$$

Podemos, assim rodar todos os operadores "til" para a nova base por meio de

$$\begin{aligned} \tilde{O}_{\alpha_i, \alpha'_i} &= \langle \alpha_i | \hat{O} | \alpha'_i \rangle = \sum_{\alpha_{i-1}s_i} \sum_{\alpha'_{i-1}s'_i} \langle \alpha_i | \alpha_{i-1}s_i \rangle \langle \alpha_{i-1}s_i | \hat{O} | \alpha'_{i-1}s'_i \rangle \langle \alpha'_{i-1}s'_i | \alpha'_i \rangle \\ &= \sum_{\alpha_{i-1}s_i} \sum_{\alpha'_{i-1}s'_i} (U^\dagger)_{\alpha_i, \alpha_{i-1}} \tilde{O}_{\alpha_{i-1}s_i, \alpha'_{i-1}s'_i} U_{\alpha'_{i-1}, \alpha'_i}. \end{aligned} \quad (17)$$

Uma vez alcançada a marca de m estados, podemos continuar aumentando o sistema sítio por sítio sem com isso aumentarmos o número de estados (fixado em m), pois: uma vez que ultrapássemos tal limite, ao adicionar um sítio, após a diagonalização manteremos apenas os m estados de menores autovalores. Assim, podemos continuar esse processo até que o valor da energia por sítio convirja ou então até atingirmos o tamanho real do sistema.

A ideia implícita aqui é que, se mantivermos os estados de baixa energia em detrimento daqueles de energias mais altas, a física de baixas energias estará certa. E é assim que funciona para problemas que envolvem impurezas de Kondo e Anderson ([10]). No entanto, no caso de sistemas de muitos corpos fortemente correlacionados, como cadeias de spins no modelo de Heisenberg, tal esquema não funciona bem. O método DMRG surge justamente nesse contexto e será o objeto de apreciação a seguir.

IV. A MATRIZ DENSIDADE

Para o caso de sistemas fortemente correlacionados, a solução proposta por Steve White, o método DMRG utiliza-se do que ficou conhecido como 'truncagem da matriz densidade'. A diferença, em essência, é que ao invés de simplesmente jogarmos fora estados de 'altas' energias devemos fazer uma redistribuição do 'emaranhamento' e minimizar a perda de informação. No momento em que o método de White foi idealizado, sua formulação não utilizava a ideia de 'emaranhamento', tal conceito apareceu bem mais tarde quando buscava-se entender por que e quando o método DMRG funcionava. Vamos aqui nos ater à formulação original do processo de truncagem da matriz densidade.

Temos agora um esquema diferente do que vimos para o método NRG, ao invés de um único bloco de sítios temos que usar dois blocos: um bloco à direita e outro à esquerda. Temos agora que aumentar ambos os blocos simultaneamente e de maneira idêntica ao que vimos antes: em cada passo adicionamos um sítio à direita do **bloco à esquerda** e um sítio à esquerda do **bloco à direita**, como esquematizado na fig.(3). O estado fundamental de tal sistema pode ser escrito da forma

$$|\Psi\rangle = \sum_{i,j} \Psi_{ij} |i\rangle |j\rangle, \quad (18)$$

onde a soma é feita sobre todos os estados do *bloco à esquerda* $|i\rangle$ e do *bloco à direita* $|j\rangle$ com os correspondentes coeficientes Ψ_{ij} .

A ideia agora é, uma vez que tenhamos alcançado a dimensão máxima m desejada para base, devemos rotacionar o bloco à esquerda para a nova base $|i\rangle \rightarrow |\alpha\rangle$. O que se deseja é que a nova base $\{|\alpha\rangle\}$ seja tal que a "distância" entre o estado fundamental original $|\Psi\rangle$ e o novo estado, truncado e aproximado $|\tilde{\Psi}\rangle$, seja mínima:

$$S = ||\Psi\rangle - |\tilde{\Psi}\rangle|^2 \quad (19)$$

onde

$$|\tilde{\Psi}\rangle = \sum_{\alpha=1}^m \sum_j \Psi_{\alpha j} |\alpha\rangle |j\rangle \quad (20)$$

Para satisfazer tal exigência os vetores $|\alpha\rangle$ deverão ser autovetores da matriz densidade reduzida do bloco à esquerda que possuem os m maiores autovalores. Iremos nas próximas seções justificar tal resultado.

I. A matriz densidade reduzida

O conceito de matriz densidade foi desenvolvido no contexto da mecânica estatística ([11]) e diz respeito a um sistema em contato com um 'banho' térmico, um reservatório térmico, ou seja, em contato com um ambiente fig.(4). O estado fundamental do universo (*system+environment*) é conhecido e, no âmbito do método DMRG, a questão é: quais os estados do sistema mais contribuem para esse estado fundamental?

Vamos pensar nesse esquema de dois blocos como sendo formado por dois subsistemas: A e B . O espaço de Hilbert do sistema $A + B$ será o produto tensorial dos espaços de cada subsistema: $H_{A+B} = H_A \otimes H_B$, cuja dimensão será $D_{A+B} = D_A \times D_B$. Assumindo que o estado fundamental do universo $|\Psi\rangle$ é dado pela expressão (18), define-se a matriz densidade reduzida do subsistema A como

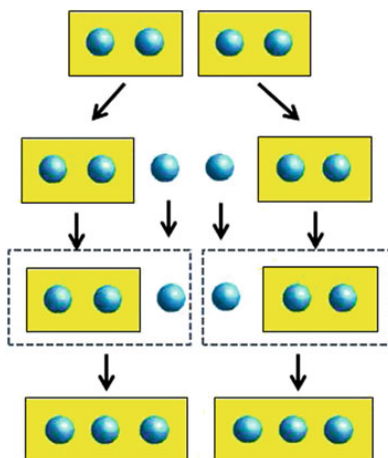


Figura 3: Esquema de um processo de crescimento no método DMRG (imagem retirada de [8]).

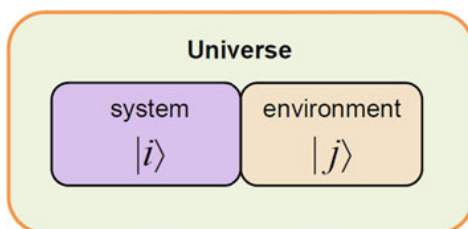


Figura 4: No método DMRG um dos bloco de sítios é o sistema enquanto o outro é o 'ambiente' (imagem retirada de [8]).

$$\hat{\rho}_A = \text{Tr}_B |\Psi\rangle \langle \Psi|, \quad (21)$$

cuja representação matricial é

$$\rho_{A_{i'i'}} = \langle i | \hat{\rho}_A | i' \rangle = \sum_j \langle ij | \Psi \rangle \langle \Psi | i'j \rangle = \sum_j \Psi_{ij} \Psi_{i'j}^* . \quad (22)$$

A matriz densidade reduzida possui as seguintes propriedades de interesse:

- É Hermitiana (ou simétrica, no caso de matrizes reais). O que significa que seus autovalores são reais.
- Seus autovalores são não negativos.
- Seu traço é igual a unidade: $\text{Tr} \rho_A = 1$.
- Seus autovetores $|\alpha\rangle$ formam uma base ortonormal.

Isso significa que podemos reescrever a matriz densidade reduzida na forma

$$\hat{\rho}_A = \sum_{\alpha} \omega_{\alpha} |\alpha\rangle \langle \alpha|, \quad (23)$$

com $\omega_{\alpha} \geq 0$ e $\sum_{\alpha} \omega_{\alpha} = 1$. O mesmo valendo para o bloco B .

II. Decomposição em Valores Singulares

Cosidere uma matriz arbitraria Ψ de dimensões $D_A \times D_B$. Pode-se provar que Ψ pode ser fatorada como

$$\Psi = UDV^\dagger \quad (24)$$

onde U é uma matriz unitária $D_A \times D_A$, V é uma matriz unitária $D_B \times D_B$ e D é uma matriz $D_A \times D_B$ com entradas reais e não negativas ao longo da diagonal e zeros fora da diagonal. Como U e V são matrizes unitárias, então

$$UU^\dagger = \mathbb{1} \quad (25)$$

e

$$VV^\dagger = \mathbb{1}. \quad (26)$$

Os elementos λ_α pertencentes a diagonal de D são conhecidos como "valores singulares" de Ψ . Esse modo de escrever a matriz Ψ é conhecida como *decomposição em valores singulares* (DVS) e será útil para demonstrar a afirmação feita na seção anterior.

III. Decomposição de Schmidt

Aplicando a DVS no nossa função de onda $|\Psi\rangle$ (18) e tomando, a título de listração, $D_B \leq D_A$. Após a DVS os elementos de matriz Ψ_{ij} podem ser escritos como:

$$\Psi_{ij} = \sum_{\alpha}^{D_B} U_{i\alpha} \lambda_{\alpha} (V^\dagger)_{\alpha j} = \sum_{\alpha}^{D_B} U_{i\alpha} \lambda_{\alpha} V_{\alpha j}^* \quad (27)$$

A função de onda ficará, dessa forma, dada por

$$\begin{aligned} |\Psi\rangle &= \sum_i^{D_A} \sum_j^{D_B} \sum_{\alpha}^{D_B} U_{i\alpha} \lambda_{\alpha} V_{\alpha j}^* |i\rangle |j\rangle \\ &= \sum_{\alpha}^{D_B} \left(\sum_i^{D_A} U_{i\alpha} |i\rangle \right) \lambda_{\alpha} \left(\sum_j^{D_B} V_{\alpha j}^* |j\rangle \right) \\ &= \sum_{\alpha}^{D_B} \lambda_{\alpha} |\alpha\rangle_A |\alpha\rangle_B, \end{aligned} \quad (28)$$

onde

$$|\alpha\rangle_A = \sum_i^{D_A} U_{i\alpha} |i\rangle \quad (29)$$

e

$$|\alpha\rangle_B = \sum_j^{D_B} V_{\alpha j}^* |j\rangle. \quad (30)$$

Devido às propriedades de U e V , tais estados definem uma nova base ortogonal e são conhecidos como "bases de Schmidt" enquanto que a expressão final de (28) é chamada de decomposição de Schmidt. No geral temos que um estado Ψ pode ser escrito em uma nova base como:

$$|\Psi\rangle = \sum_{\alpha}^r \lambda_{\alpha} |\alpha\rangle_A |\alpha\rangle_B \quad (31)$$

onde

$$r = \min(D_A, D_B). \quad (32)$$

Usando a base de Schmidt as matrizes densidade reduzidas para os subsistemas A e B ficam

$$\rho_A = \text{Tr}_B |\Psi\rangle \langle\Psi| = \sum_{\alpha} \lambda_{\alpha}^2 |\alpha\rangle_A \langle\alpha| \quad (33)$$

e

$$\rho_B = \text{Tr}_A |\Psi\rangle \langle\Psi| = \sum_{\alpha} \lambda_{\alpha}^2 |\alpha\rangle_B \langle\alpha|. \quad (34)$$

Assim, concluímos que:

- Os autovalores da matriz densidade reduzida $\omega_{\alpha} = \lambda^2$ são iguais aos quadrados dos valores singulares.
- As duas matrizes densidade possuem o mesmo espectro.
- As bases de Schmidt são os autovetores das matrizes densidade.

IV. Função de Onda Truncada

A pergunta que queremos responder, de qual seria a melhor escolha para a base $\{|\alpha\rangle\}$ para construir a função de onda dada pela Eq.(20), pode ser colocada da seguinte forma: Dada uma matriz Ψ qual seria a matriz $\tilde{\Psi}$ com o posto fixo em m que minimiza a distância de Frobenius entre as duas matrizes?

Ordenando os autovalores da matriz densidade reduzida em ordem decrescente $\omega_1, \omega_2, \dots, \omega_m, \dots, \omega_r$ é imediato ver que a distância de Frobenius entre essas duas matrizes é dada por

$$S = |\Psi - \tilde{\Psi}|^2 = \sum_{i=m+1}^r \omega_i. \quad (35)$$

Assim, a base que minimiza tal diferença é aquela formada pelos autovetores da matriz densidade com os m maiores autovalores.

V. O MÉTODO DMRG

Depois das considerações anteriores, sobre diagonalizações truncadas e matrizes densidade reduzidas, podemos partir para a apreciação do método DMRG propriamente. Apresentarei aqui as ideias dos dois algoritmos conhecidos por **DMRG de tamanho infinito** e de **DMRG de tamanho finito**. O objetivo do primeiro esquema é tratar de sistemas em que se está interessado no limite termodinâmico, ou seja, tratar de sistemas muito grandes. O esquema finito, por outro lado, visa prioritariamente sistemas com um número de sítios fixo ' L ', apesar de ser possível o estudo do limite termodinâmico através desse algoritmo também. Começarei a apresentação pelo esquema infinito, tendo em vista que elementos desse método também estão presentes no algoritmo finito.

I. DMRG de tamanho Infinito

Assim como no método NRG, ambos os esquemas adotados pelo método DMRG necessitam de duas estruturas básicas, a saber: **blocos** e **sítios**. Mas, neste novo caso, como descrito na seção sobre a matriz densidade, teremos o surgimento de mais uma estrutura: o **superbloco**. No caso do algoritmo 'infinito', o superbloco é formado por um 'bloco aumentado' (composto de um bloco acrescido de um sítio) e sua 'imagem espelhada' como visto no esquema da fig.(3). Esse esquema segue as seguintes etapas:

1. Aumenta-se a cadeia de sítios até que a dimensão do Espaço de Hilbert tenha ultrapassado o limite m . Este será o primeiro **bloco aumentado**.
2. Foma-se o **superbloco** adicionando um bloco aumentado 'espelhado' à direita do nosso primeiro bloco aumentado.
3. Diagonaliza-se a matriz hamiltonina do superbloco (utilizando rotinas do tipo Lanczos ou Davidson) para se obter o estado fundamental $|\Psi\rangle = \sum_{ij} \Psi_{ij} |i\rangle |j\rangle$.
4. Calcula-se a matriz densidade reduzida referente ao bloco à esquerda (sistema).
5. Executa-se a mudança de base do bloco à esquerda para a base formada pelos m autoestados da matriz densidade com os maiores autovalores. A mudança para a nova base deve ser aplicada à Hamiltoniana e a todos os operadores envolvidos na interação entre os blocos.
6. Adiciona-se um novo sítio, com d estados possíveis, aos blocos à esquerda e à direita para formar blocos de dimensão $d \times m$ e reitara-se os passos de diagonalização e truncagem. O processo pára quando a diferença na energia entre dois passos sucessivos varia dentro de um intervalo ΔE_0 preestabelecido ou quando atingimos o tamanho desejado para o sistema.

Veremos como esse método funciona em um exemplo prático e reduzido a seguir.

II. Exemplo de um único passo do método DMRG

Para exemplificar as etapas do método DMRG vamos, novamente, pensar numa cadeia unidimensional de 'spins', submetida a um Hamiltoniano de Heisenberg. Inicialmente começaremos com um único sítio compondo nosso bloco de modo que para esse sítio tenhamos dois possíveis estados

$$|b_1\rangle = |\uparrow\rangle, \quad |b_2\rangle = |\downarrow\rangle. \quad (36)$$

Seguindo a nomenclatura utilizada em [7], designaremos um bloco contendo p sítios e que é descrito por uma base de dimensão q por $B(p, q)$, assim inicialmente temos um bloco $B(1, 2)$. Para nosso bloco inicial, que é constituído de um spin isolado, o Hamiltoniano é nulo

Para construir nosso 'bloco aumentado' adicionamos mais um sítio a cadeia. Nesse caso, a base do bloco coincide com a base que descreve o sítio adicionado,

$$|d_1\rangle = |\uparrow\rangle, \quad |d_2\rangle = |\downarrow\rangle. \quad (37)$$

Agora, a base para o bloco aumentado pe formada por

$$\begin{aligned} |b_1^e\rangle &= |\uparrow\uparrow\rangle \\ |b_2^e\rangle &= |\uparrow\downarrow\rangle \\ |b_3^e\rangle &= |\downarrow\uparrow\rangle \\ |b_4^e\rangle &= |\downarrow\downarrow\rangle \end{aligned}$$

Agora, o Hamiltoniano H_e para o bloco aumentado $B(2, 4)$ possui termos não nulos e descreve as interações entre os sítios dentro do bloco $B(2, 4)$. O Hamiltoniano H_e será igual ao Hamiltoniano do bloco inicial H_B , que descreveria as interações internas ao bloco, mais os termos de interação entre o sítio mais a direita do bloco e o novo sítio adicionado. Utilizando a base acima temos que o Hamiltoniano de Heisenberg para o bloco aumentado fica

$$H_e = H_B \otimes \mathbb{1}_d + S_b^z \otimes S_d^z + \frac{1}{2}(S_b^+ \otimes S_d^- + S_b^- \otimes S_d^+) \quad (38)$$

Lembrando que

$$H_B = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix},$$

teremos o mesmo resultado obtido na discussão do método NRG, a saber:

$$H = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & 0 \\ 0 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (39)$$

A construção do superbloco é realizada conectando-se ao bloco aumentado (posicionado à esquerda) outro bloco aumentado (à direita) como mostra a fig.(3). No processo dito 'infinito', o bloco aumentado à direita será a cópia espelhada do bloco aumentado à esquerda. O Hamiltoniano do superbloco deverá ter, além dos Hamiltonianos de cada bloco aumentado, operadores que descrevam a interação entre o sítios que unem os dois blocos aumentados. Por exemplo, o operador $(S_r^+)_e$, que representa o operador S^+ para o spin mais a direita do bloco aumentado (*on the rightmost site of the enlarged block*), escrito em termos da base do bloco aumentado fica:

$$(S_r^+)_e = \mathbb{1}_d \otimes S_d^+ \quad (40)$$

As representações para os operadores $(S_r^-)_e$ e $(S_r^z)_e$ seguem de maneira análoga. A base para o superbloco é obtida com o produto tensorial das bases dos dois blocos aumentados:

$$\left(\begin{array}{c} |b_1^e\rangle \\ |b_2^e\rangle \\ |b_3^e\rangle \\ |b_4^e\rangle \end{array} \right) \otimes \left(\begin{array}{c} |b_1^{e'}\rangle \\ |b_2^{e'}\rangle \\ |b_3^{e'}\rangle \\ |b_4^{e'}\rangle \end{array} \right). \quad (41)$$

Escrevendo explicitamente, temos:

$$\left(\begin{array}{c} |\uparrow\uparrow\rangle \\ |\uparrow\downarrow\rangle \\ |\downarrow\uparrow\rangle \\ |\downarrow\downarrow\rangle \end{array} \right) \otimes \left(\begin{array}{c} |\uparrow\uparrow\rangle \\ |\uparrow\downarrow\rangle \\ |\downarrow\uparrow\rangle \\ |\downarrow\downarrow\rangle \end{array} \right) = \left(\begin{array}{c} |\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\rangle \\ |\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle \\ |\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\rangle \\ |\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle \\ |\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle \\ |\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle \\ |\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\rangle \\ |\uparrow\downarrow\downarrow\downarrow\rangle \\ |\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow\rangle \\ |\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle \\ |\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\rangle \\ |\downarrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle \\ |\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle \\ |\downarrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle \\ |\downarrow\downarrow\downarrow\uparrow\rangle \\ |\downarrow\downarrow\downarrow\downarrow\rangle \end{array} \right) = \left(\begin{array}{c} |b_1^s\rangle \\ |b_2^s\rangle \\ |b_3^s\rangle \\ |b_4^s\rangle \\ |b_5^s\rangle \\ |b_6^s\rangle \\ |b_7^s\rangle \\ |b_8^s\rangle \\ |b_9^s\rangle \\ |b_{10}^s\rangle \\ |b_{11}^s\rangle \\ |b_{12}^s\rangle \\ |b_{13}^s\rangle \\ |b_{14}^s\rangle \\ |b_{15}^s\rangle \\ |b_{16}^s\rangle \end{array} \right). \quad (42)$$

Assumindo que se deseja estudar as propriedades do estado fundamental, podemos explorar a conservação de S^z e o fato que o estado fundamental pertence ao subespaço com $S^z = 0$. Assim, vamos nos concentrar nos estados que respeitam a tal simetria, ou seja:

$$\begin{aligned} |b_1^{s(0)}\rangle &\equiv |b_4^s\rangle = |\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle \\ |b_2^{s(0)}\rangle &\equiv |b_6^s\rangle = |\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle \\ |b_3^{s(0)}\rangle &\equiv |b_7^s\rangle = |\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\rangle \\ |b_4^{s(0)}\rangle &\equiv |b_{10}^s\rangle = |\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle \\ |b_5^{s(0)}\rangle &\equiv |b_{11}^s\rangle = |\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\rangle \\ |b_6^{s(0)}\rangle &\equiv |b_{13}^s\rangle = |\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle \end{aligned}$$

O Hamiltononiano do superbloco terá três partes: dois termos que contêm os Hamiltonianos *internos* de cada bloco aumentado ($B(2,4)$ e $B'(2,4)$) e um termo referente a interação dos sítios entre esses dois blocos:

$$H_s = H_e \otimes \mathbb{1}'_e + \mathbb{1}_e \otimes H'_e + (S_r^z)_e \otimes (S_r^z)'_e + \frac{1}{2} [(S_r^+)_e \otimes (S_r^-)'_e + (S_r^-)_e \otimes (S_r^+)'_e], \quad (43)$$

onde os operadores com "linha" são aqueles referentes ao espaço de Hilbert do bloco à direita. Dessa forma, a representação do de H_s na base $\{|b_i^{s(0)}\rangle\}$ (subespaço em que $S^z = 0$) fica dada por:

$$H_s^{(0)} = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & 2 & 0 & 0 \\ 2 & 2 & -3 & 0 & 2 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & -3 & 2 & 2 \\ 0 & 0 & 2 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (44)$$

O menor autovalor dessa matrix, que é a energia do estado fundamental, é igual a $E_0 = (1/4)(3 + 2\sqrt{3})$ cujo autovetor é dado por

$$|\Psi_0\rangle = \frac{1}{2\sqrt{3(2+\sqrt{3})}} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 + \sqrt{3} \\ -2 - \sqrt{3} \\ -2 - \sqrt{3} \\ 1 + \sqrt{3} \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (45)$$

A fim de decidir quais dos estados do bloco $B(2,4)$ são os mais importantes para o estado fundamental do superbloco precisa-se estudar a matriz densidade reduzida dada pelas Eq.(21) e Eq.(22). Combinando a Eq.(46) com a Eq.(43) obtemos

$$\begin{pmatrix} |b_1^{s(0)}\rangle \\ |b_2^{s(0)}\rangle \\ |b_3^{s(0)}\rangle \\ |b_4^{s(0)}\rangle \\ |b_5^{s(0)}\rangle \\ |b_6^{s(0)}\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} |b_1^e\rangle \otimes |b_4^e\rangle \\ |b_2^e\rangle \otimes |b_2^e\rangle \\ |b_2^e\rangle \otimes |b_3^e\rangle \\ |b_3^e\rangle \otimes |b_2^e\rangle \\ |b_3^e\rangle \otimes |b_3^e\rangle \\ |b_4^e\rangle \otimes |b_1^e\rangle \end{pmatrix}. \quad (46)$$

Dessa forma podemos identificar os coeficientes da expansão dada pela Eq.(47) (e pela Eq.(18)) concluindo que somente os coeficientes $\Psi_{14}, \Psi_{22}, \Psi_{23}, \Psi_{32}, \Psi_{33}, \Psi_{41}$ são não nulos. Dessa forma, a matriz densidade reduzida, obtida calculando o traço sobre os estados do bloco $B'(2,4)$, será dada pela Eq.(48).

$$|\Psi_0\rangle = \sum_{i,j} \Psi_{ij} |b_i^e\rangle \otimes |b_j^e\rangle \quad (47)$$

$$\rho = \frac{1}{12(2+\sqrt{3})} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 11+6\sqrt{3} & -2(5+3\sqrt{3}) & 0 \\ 0 & -2(5+3\sqrt{3}) & 11+6\sqrt{3} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (48)$$

Note que a matriz densidade ρ tem a mesma forma, bloco diagonal e simétrica, da matriz Hamiltoniana do bloco aumentado H_e , de modo que teremos os mesmo autovetores, estados de singleto e de tripleto, cujos autovalores são:

$$E_t = \frac{1}{12(2+\sqrt{3})} \approx 0.02 \quad (49)$$

$$E_s = \frac{21+12\sqrt{3}}{12(2+\sqrt{3})} \approx 0.94 \quad (50)$$

Assim, tomando os dois estados com maiores autovalores, um estado de singleto e um dos estados do tripleto, e ordenando de maneira decrescente nas linhas de uma matriz, temos nossa matriz de mudança de base, truncada com $m = 2$ e ordenada:

$$\mathcal{U} = \begin{pmatrix} 0 & 1/\sqrt{2} & -1/\sqrt{2} & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (51)$$

A matriz Hamiltoniana na base truncada fica

$$H_{B(2,2)} = \mathcal{U}H_e\mathcal{U}^\dagger = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} -3 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (52)$$

Note o subscrito $B(2,2)$ utilizado na Eq.(52). A ideia geral dos esquemas NRG e DMRG é aumentar o número de sítios do sistema sem com isso aumentar a dimesão do Espaço de Hilbert para além de um número m máximo. Logicamente essa mudança de base deve ser efetuada sobre todos os operadores relevantes para a formação do superbloco, que no nosso caso são os operadores $(S_r^+)_e$, $(S_r^-)_e$ e $(S_r^z)_e$.

Deve-se ser dito que esse foi um exemplo super reduzido do método DMRG. Com a intenção de apresentar as etapas de construção do Hamoltoniano do superbloco, construção da matriz densidade, truncagem e rotação para a nova base de autoverotes da matriz densidade da maneira mais simples e econômica possível, estipulamos que a dimesão do espaço de Hilbert deveria ser no máximo $m = 2$.

Digamos que tivéssemos escolhido $m = 20$, antes de iniciarmos o processo de diagonalização e truncagem, teríamos que crescer o sistema até atingirmos 5 sítios com $2^5 = 32$ estados, somente a partir desse número ultrapassaríamos a dimensão máxima 20. Assim, a primeira truncagem e mudança de base levaria a formção de um bloco $B(5,20)$ e os próximos passos levaria a blocos com mais sítios mas com o espaço de Hilbert de dimensão fixa em $m = 20$. Esquemáticamente teríamos: $\{B(1,2) \rightarrow B(2,4) \rightarrow B(3,8) \rightarrow B(4,16) \rightarrow B(5,20) \rightarrow B(6,20) \rightarrow B(7,20) \dots\}$.

Frequentemente utiliza-se a soma dos autovalores dos estados descartados $(1 - \sum_{\alpha=1}^m \omega_\alpha)$ como uma medida do erro cometido no processo de truncagem. Esse numero, em alguns casos, apresenta-se grosseiramente proporcional ao erro na energia. No exemplo anterior que elaboramos nessa seção tivemos que jogar fora dois estados do tripleto totalizando um erro de truncagem de 0.04, o que é excessivamente alto. Em cálculos mais realistas, erros de truncagem normalmente não ultrapassam 10^{-4} .

III. DMRG de tamanho finito

No algoritmo DMRG finito o objetivo é estudar um sistema que tenha um tamanho L fixo e não o limite termodinâmico do sistema. Inicialmente, o algoritmo segue todas as etapas do método infinito, com blocos à esquerda e à direita crescendo simultaneamente. A partir do momento em que o superbloco atinge o tamanho L do sistema de interesse, o bloco à esquerda continua a crescer um sítio por vez enquanto que o bloco à direita deve diminuir para manter o superbloco com L sítios.

O processo segue até termos apenas um sítio no bloco à direita, chamamos esse processo, onde o bloco à esquerda é calculado para todos os tamanhos possíveis, $L - 3$ sítios no máximo, de *sweep*. Em seguida, aumenta-se o bloco à direita e diminui-se o bloco à esquerda, para esse processo já teremos os blocos à esquerda 'renormalizados' com as bases obtidas no primeiro *sweep*. Quando a base é otimizada para um bloco de tamanho específico por meio do processo de renormalização, o resultado deve ser armazenado na memória para que possa ser utilizado como bloco *environment* no próximo *sweep*.

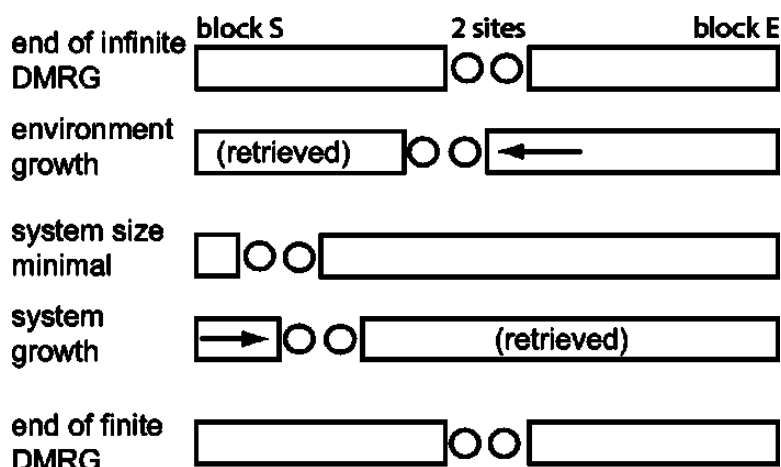


Figura 5: Esquema de um processo de *varredura* no método DMRG finito (imagem retirada de [9]).

1. Aumenta-se a cadeia de sítios, aplicando o processo DMRG infinito, até que o tamanho do superbloco tenha o tamanho L desejado. Depois de cada mudança de base os operadores devem ser 'salvos' na memória.
2. Aumenta-se o bloco a esquerda para $l + 1$.
3. Recupera-se o bloco de tamanho $L - l - 2$ da memória.
4. Aumenta-se o bloco à direita para $L - l - 1$ sítios.
5. Forma-se o superbloco de tamanho fixo L .
6. Diagonaliza-se a Hamiltoniana do superbloco, cacula-se a matriz densidade reduzida do bloco à esquerda..
7. Muda-se a base do bloco aumetado à esquerda e guarda-se na memória.
8. Continua-se o processo de crescimento do bloco à esquerda à partir da etapa 2 até que o bloco à direita tenha um único sítio.
9. Inicie um novo *sweep*, agora da direita para esquerda e utilizando os blocos à esquerda obtidos no *sweep* anterior.
10. Reitera-se os processos de varredura até que a diferença na Energia esteja dentro de uma tolerância predefinida. É comum que o processo seja encerrado quando ambos os blocos tenham o mesmo tamanho, a chamada "configuração simétrica".

O esquema da fig(5) mostra o processo de varredura (*sweep*) do método DMRG finito. Esse processo funciona como *loops* autoconsistentes de métodos variacionais. Assim, método DMRG finito pode ser formulado como um método variacional no qual se deseja minimizar o funcional de Energia.

VI. MEDINDO OSERVÁVEIS

O cálculo da energia está embutido no algoritmo DMRG, a cada passo do algoritmo a matriz Hamiltoniana é diagonalizada e o estado fundamental é tomado para a construção da matriz densidade. Pode-se verificar que, no método finito, o menor valor de energia se obtém na configuração simétrica. De maneira que é comum usar a configuração simétrica para a obtenção de outros observáveis de interesse.

No geral, estamos interessados em valores esperados de correlações locais de n -sítios $\hat{O}_{i_1, \dots, i_n}^{(n)} = \hat{O}_{i_1}^{(1)} \dots \hat{O}_{i_n}^{(1)}$ com relação a algum autoestado do Hamiltoniano. Os mais relevantes são os casos em que $n = 1$, para densidade e magnetização local, e $n = 2$, para correlações de densidade, spin e de criação-aniquilação de dois sítios da cadeia. Primeiramente, vamos considerar a estratégia para lidar com o caso em que $n = 1$. O processo de crescimento do método DMRG impõe a necessidade de três passos para o cálculo de correlações desse tipo: *Inicialização*, *Atualização* e *Cálculo final*.

Inicialização Seja \hat{O}_p um operador que atua no sítio p . Quando esse sítio p é adicionado ao bloco de tamanho $(i-1)$, $\langle s_i | \hat{O}_p | s'_i \rangle$ é calculado. Seja $\{|\alpha_i\rangle\}$ a base reduzida que descreve o novo bloco, que inclui o sítio p , e $\{|\alpha_{i-1}\rangle\}$ a base do bloco antigo, teremos então

$$\langle \alpha_i | \hat{O}_p | \alpha'_i \rangle = \sum_{\alpha_{i-1} s_i s'_i} \langle \alpha_i | \alpha_{i-1} s_i \rangle \langle s_i | \hat{O}_p | s'_i \rangle \langle \alpha_{i-1} s'_i | \alpha'_i \rangle. \quad (53)$$

Atualização A cada passo do algoritmo DMRG, ocorre uma mudança de base de $\{|\alpha_i\rangle\}$ para $\{|\alpha_{i+1}\rangle\}$. Como \hat{O}_p não atua no novo sítio o operador se transforma da forma

$$\langle \alpha_{i+1} | \hat{O}_p | \alpha'_{i+1} \rangle = \sum_{\alpha_i \alpha'_i s_i} \langle \alpha_{i+1} | \alpha_i s_i \rangle \langle \alpha_i | \hat{O}_p | \alpha'_i \rangle \langle \alpha'_i s_i | \alpha'_{i+1} \rangle. \quad (54)$$

Cálculo final Depois do último passo do algoritmo, teremos o bloco à esquerda (sistema) descrito pela base $\{|\alpha\rangle\}$ e o bloco à direita (ambiente) descrito por $\{|\beta\rangle\}$. Dessa forma, saberemos calcular $\langle \alpha\beta | \psi \rangle$ e, assumindo que \hat{O}_p atua num sítio pertencente ao bloco à esquerda, $\langle \hat{O}_p \rangle$ fica

$$\langle \psi | \hat{O}_p | \psi \rangle = \sum_{\alpha\beta} \langle \psi | \alpha\beta \rangle \langle \alpha | \hat{O}_p | \alpha' \rangle \langle \alpha'\beta | \psi \rangle. \quad (55)$$

Para tratar de correlações entre observáveis que atuam em diferentes sítios da cadeia, \hat{O}_p e \hat{O}'_q , devemos levar em consideração dois casos distintos: (i) ambos os sítios pertencentes a diferentes blocos ou (ii) os dois sítios pertencem ao mesmo bloco. Ao utilizarmos o esquema de sistema finito para o método DMRG, podemos, para um mesmo par de sítios p e q , estar em uma situação ou em outra, dependendo de qual etapa de um processo de varredura (*sweep*) estivermos. Veremos que a configuração (i) é mais vantajosa para medirmos os observáveis.

I. Operadores em Blocos Separados

Vamos assumir, primeiramente, a situação genérica em que, em um dado momento de uma varredura, tenhamos os dois operadores em blocos separados. Seja $\{|\alpha\rangle\}$ a base que descreve o bloco à esquerda e $\{|\beta\rangle\}$ a base utilizada para representar o bloco à direita, o estado fundamental será dado por

$$|\psi\rangle = \sum_{\alpha\beta} \langle\alpha\beta|\psi\rangle |\alpha\beta\rangle = \sum_{\alpha\beta} \psi_{\alpha\beta} |\alpha\beta\rangle. \quad (56)$$

Dessa forma, a correlação entre os observáveis fica dada por

$$\begin{aligned} \langle\hat{O}_p\hat{O}'_q\rangle &= \langle\psi|\hat{O}_p\hat{O}'_q|\psi\rangle \\ &= \sum_{\alpha\beta,\alpha'\beta'} \psi_{\alpha'\beta'}^* \psi_{\alpha\beta} \langle\alpha'\beta'|\hat{O}_p\hat{O}'_q|\alpha\beta\rangle \\ &= \sum_{\alpha\beta,\alpha'\beta'} \psi_{\alpha'\beta'}^* \psi_{\alpha\beta} \langle\alpha'|\hat{O}_p|\alpha\rangle \langle\beta'|\hat{O}'_q|\beta\rangle \\ &= \sum_{\alpha\beta,\alpha'\beta'} \psi_{\alpha'\beta'}^* \psi_{\alpha\beta} (\tilde{O}_p)_{\alpha'\alpha} (\tilde{O}'_q)_{\beta'\beta}. \end{aligned} \quad (57)$$

II. Operadores em um Mesmo Bloco

A maneira correta de se tratar o caso em que ambos os operadores atuam no mesmo bloco é por meio da definição do operador $\hat{O}_{pq} = \hat{O}_p\hat{O}'_q$. Dessa maneira, temos seguinte expressão para a correlação:

$$\begin{aligned} \langle\hat{O}_p\hat{O}'_q\rangle &= \langle\psi|\hat{O}_p\hat{O}'_q|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{O}_{pq}|\psi\rangle \\ &= \sum_{\alpha\beta,\alpha'\beta'} \psi_{\alpha'\beta'}^* \psi_{\alpha\beta} \langle\alpha'|\hat{O}_{pq}|\alpha\rangle \langle\beta'|\beta\rangle \\ &= \sum_{\alpha\beta,\alpha'} \psi_{\alpha'\beta'}^* \psi_{\alpha\beta} (\tilde{O}_{pq})_{\alpha'\alpha}. \end{aligned} \quad (58)$$

Vemos que seria necessário armazenar o operador composto, juntamente com os operadores individuais a cada passo do método. Precisamos representar esse operador composto com a mesma base (que passou pelos processos de rotação e truncagem) que utilizamos para o operador Hamiltoniano. Calcular esse operador como produto de dois operadores individuais, representados por uma base atualizada, é uma deve ser evitado. Pois, imagine que \hat{O}_p atue dentro bloco de tamanho $(i-1)$ e \hat{O}_q atue num sítio que acaba de ser conectado ao bloco, dessa forma teríamos os valores de $\langle\alpha_{i-1}|\hat{O}_p\hat{O}'_q|\alpha'_{i-1}\rangle$ e $\langle s_i|\hat{O}_q|s'_i\rangle$ e em termos da nova base $\{|\alpha_i\rangle\} \equiv \{|\alpha_{i-1}\rangle \otimes |s_i\rangle\}$ para o bloco aumentado o operador composto ficaria

$$\langle\alpha_i|\hat{O}_p\hat{O}'_q|\alpha'_i\rangle = \sum_{\alpha_{i-1} s_i \alpha'_{i-1} s'_i} \langle\alpha_i|\alpha_{i-1}\rangle \langle\alpha_{i-1}|\hat{O}_p|\alpha'_{i-1}\rangle \langle s_i|\hat{O}'_q|s'_i\rangle \langle\alpha'_{i-1}|\alpha'_i\rangle \quad (59)$$

de modo que esse operador deve ser atualizado até que se atinja o passo final para o cálculo definitivo. Assim, fica evidente que armazenar e atualizar todos os "operadores duplos" seria impraticável. A melhor opção, portanto, é calcular os operadores individuais e calcular a correlação apenas quando os sítios estiverem em blocos distintos, usando o procedimento descrito na seção anterior.

VII. CONCLUSÕES

O atual estágio da tecnologia em conjunto com o trabalho criativo de pesquisadores tem nos permitido avançar cada vez em entendimento das propriedades físicas de sistemas de muitas partículas. Os métodos DMRG são exemplos de tais conquistas criativas que se tornaram ferramentas valiosas para o trabalho científico. O trabalho realizado mais recentemente, acerca de temas relacionados a informação quântica, tem permitido a adaptação dos métodos DMRG a outros contextos e, também, à melhora dos resultados em situações já tradicionais.

Esse trabalho buscou enfatizar a estrutura e as ideias básicas para a elaboração do método DMRG, assim, foi dada atenção em alguns aspectos técnicos que considerei importante para uma primeira abordagem do tema. Apesar de importantes discussões, sobre convergência e validade do método, tenham sido omitidas pontuo que não se pode determinar a utilização de um método numérico sem que esses pontos sejam verificados com cuidado. A intensa atividade relacionada a entender as limitações dos algoritmos DMRG, bem como a de ampliar sua atuação e melhorar sua precisão, mostra o tamanho do impacto do trabalho de Steve White e exemplifica o trabalho colaborativo da ciência.

REFERÊNCIAS

- [1] S.R. White, Phys. Rev. Lett. 69, 2863 (1992);
- [2] S.R. White, Phys. Rev. B 48, 10345 (1993);
- [3] K.G. Wilson, Rev. Mod. Phys. 47, 773 (1975);
- [4] J. Hubbard, Proc. Roy. Soc. A276, 238 (1963); A277, 237 (1964); A281, 401 (1964).
- [5] P. W. Anderson, Phys. Rev. 115, 2 (1959).
- [6] P. W. Anderson, Science 235, 1196 (1987); for the derivation of the $t - J$ model from the Hubbard model see, e.g., P. Fulde, *Electron Correlations in Molecules and Solids*, Vol. 100 of *Solid-State Sciences* (Springer, 1991).
- [7] A. L. Malvezzi, Braz. J. Phys. vol. 33, n.1 (2003).
- [8] A. E. Feiguin, in *Strongly Correlated Systems* - Springer Series in Solid-State Sciences (Edited by A. Avella and F. Mancini), 176 (2013).
- [9] U. Schollwock, Rev. Mod. Phys., 77, 259 (2005)
- [10] A.C. Hewson, *The Kondo Problem to Heavy Fermions* (Cambridge University Press, Cambridge, 1997)
- [11] R. P. Feynman, *Statistical Physics: A Set of Lectures* (Ben-jamim, Reading, MA, 1972).