

UNIVERSIDADE FEDERAL DE MINAS GERAIS
Programa de Pós-graduação em Física

Isaac Martins Carvalho

***QUENCHES* EM SISTEMAS INTERAGENTES**
UNIDIMENSIONAIS:
formação de ordenamentos de carga e spin

Belo Horizonte
2022

Isaac Martins Carvalho

***QUENCHES* EM SISTEMAS INTERAGENTES
UNIDIMENSIONAIS: formação de ordenamentos de carga
e spin**

Tese apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Física do Instituto de Ciências Exatas da Universidade Federal de Minas Gerais como requisito parcial para obtenção do título de Doutor em Ciências.

Orientador: Maria Carolina de Oliveira Aguiar
Coorientador: Helena de Souza Bragança Rocha

Belo Horizonte

2022

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação (CIP)

C331q Carvalho, Isaac Martins.
Quenches em sistemas interagentes unidimensionais: formação de ordenamentos de carga e spin / Isaac Martins Carvalho. – 2022.
94 f. : il.

Orientadora: Maria Carolina de Oliveira Aguiar.
Coorientadora: Helena de Souza Bragança Rocha.
Tese (doutorado) – Universidade Federal de Minas Gerais,
Departamento de Física.
Bibliografia: f. 78-89.

1. Sistemas em não-equilíbrio. 2. Emaranhamento. 3. Ondas de densidade de carga. I. Título. II. Aguiar, Maria Carolina de Oliveira. III. Rocha, Helena de Souza Bragança. IV. Universidade Federal de Minas Gerais, Departamento de Física.

CDU – 531.2 (043)



UNIVERSIDADE FEDERAL DE MINAS GERAIS
INSTITUTO DE CIÊNCIAS EXATAS
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM FÍSICA

FOLHA DE APROVAÇÃO

A presente tese, intitulada "**Quenches em sistemas interagentes unidimensionais: formação de ordenamentos de carga e spin**" de autoria de **ISAAC MARTINS CARVALHO** submetida à Comissão Examinadora, abaixo-assinada, foi aprovada para obtenção do grau de **DOUTOR EM CIÊNCIAS**, em vinte e um de dezembro de 2022.

Belo Horizonte, 21 de dezembro de 2022.

Prof. Maria Carolina de Oliveira Aguiar
Orientadora do estudante
Departamento de Física/UFMG

Prof. Luís Gregório Dias da Silva
Instituto de Física/USP

Prof. Helena de Souza Bragança Rocha
Coorientadora do estudante
Instituto de Física/UnB

Prof. Pierre Louis de Assis
Instituto de Física Gleb Wataghin/UNICAMP

Prof. Lucas Álvares da Silva Mol
Departamento de Física/UFMG

Prof. Rodrigo Gonçalves Pereira
Departamento de Física Teórica Experimental/UFRN



Documento assinado eletronicamente por **Helena de Souza Bragança Rocha, Usuária Externa**, em 21/12/2022, às 15:27, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 5º do [Decreto nº 10.543, de 13 de novembro de 2020](#).



Documento assinado eletronicamente por **Maria Carolina de Oliveira Aguiar, Professora do Magistério Superior**, em 21/12/2022, às 17:48, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 5º do [Decreto nº 10.543, de 13 de novembro de 2020](#).



Documento assinado eletronicamente por **Rodrigo Gonçalves Pereira, Usuário Externo**, em 21/12/2022, às 18:03, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 5º do [Decreto nº 10.543, de 13 de novembro de 2020](#).



Documento assinado eletronicamente por **Pierre Louis de Assis, Usuário Externo**, em 21/12/2022, às 21:23, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 5º do [Decreto nº 10.543, de 13 de novembro de 2020](#).



Documento assinado eletronicamente por **Lucas Alvares da Silva Mol, Professor do Magistério Superior**, em 23/12/2022, às 12:17, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 5º do [Decreto nº 10.543, de 13 de novembro de 2020](#).



Documento assinado eletronicamente por **Luís Gregório Godoy de V. Dias da Silva, Usuário Externo**, em 09/01/2023, às 13:31, conforme horário oficial de Brasília, com fundamento no art. 5º do [Decreto nº 10.543, de 13 de novembro de 2020](#).



A autenticidade deste documento pode ser conferida no site https://sei.ufmg.br/sei/controlador_externo.php?acao=documento_conferir&id_orgao_acesso_externo=0, informando o código verificador **1983172** e o código CRC **FB243360**.

Agradecimentos

Agradeço a Carol pela orientação, resiliência, honestidade e confiança. Lembro de quando voltamos para as atividades presenciais, após a pandemia, estava me sentindo desolado, fui a sua sala e perguntei se meu doutorado estava indo bem. Nesta conversa, em especial, você me ensinou que o mais importante não é o que se tem, mas como manter-se em constante evolução. Obrigado pela dedicação e envolvimento no crescimento profissional (no estilo de *The War of Art* de Steven Pressfield) de pessoas através da Física.

Agradeço a Helena pela coorientação, a qual foi fundamental para o desenvolvimento deste projeto. Obrigado pelas ideias criativas, conselhos sobre o doutorado e por todas as perguntas, que sempre me levaram à reflexão e ao amadurecimento na área de pesquisa.

Agradeço ao Walber pelo exemplo de profissionalismo. Sua colaboração neste projeto foi essencial para o entendimento da física e obtenção dos resultados numéricos, otimizando o código e dando conselhos sobre o uso do cluster. Obrigado por partilhar as vozes das “Musas de Homero”, as quais foram imprescindíveis para o desenvolvimento do nosso grupo de pesquisa.

Agradeço aos companheiros e companheiras de grupo: Flávio, Natan, Vitão, Moa, Nay, Jessé, Henrique, Júlia, Gu, Bianca e França, os quais tornaram meus dias mais leves e felizes. Obrigado por fazerem parte desta história.

Agradeço também ao companheiro Heitor Casagrande pela disposição em auxiliar com a implementação numérica utilizada nesta tese. Em nossas conversas, sempre surgiam boas ideias de implementações, que possibilitaram explorar uma física nova.

Agradeço aos meus pais, Tânia e Nicolau, aos meus irmãos, Sara e Davi, a minha tia, Alba, e a minha avó, Terezinha (em memória), por me apoiarem neste processo e pelo amor incondicional. Agradeço a minha companheira e amiga Carla por ser um porto seguro nessa jornada. Agradeço a minha segunda família, Anneth, Lid e Alector, por todo suporte emocional. Agradeço aos professores Antônio Marcelo, Iraziet Charret, Onofre Rojas, Tatiana Cardoso e Rodrigo Búfalo por continuar me inspirando com seus ensinamentos.

Agradeço a Universidade Federal de Minas Gerais pela oportunidade. Agradeço a secretaria do Departamento de Física pelo excelente trabalho. Agradeço a todas pessoas que dedicam a sua energia para manutenção e desenvolvimento da Ciência brasileira.

Finalmente, agradeço ao CENAPAD-SP e ao LNCC-RJ, onde parte dos resultados numéricos foram obtidos, e a FAPEMIG, CAPES e CNPq pelo apoio financeiro.

Resumo

Nesta tese, estudamos sistemas fortemente interagentes fora do equilíbrio. Mais especificamente, focamos na investigação da formação de não-equilíbrio dos ordenamentos de carga e de spin em uma dimensão, partindo de um estado não-interagente desordenado e deixando-o evoluir no tempo segundo um Hamiltoniano interagente. Analisamos a formação dos ordenamentos no contexto do modelo de Hubbard estendido unidimensional em semi-preenchimento e interações positivas, que apresenta as fases *charge density wave* (CDW) e *spin density wave* (SDW). Realizamos *quenches* controlados no tempo para simular a evolução do estado inicial sob ação de um Hamiltoniano em que as interações eletrônicas aumentam linearmente no tempo até valores finais correspondentes à fase CDW ou SDW. Para descrever a dinâmica de não-equilíbrio, utilizamos a extensão temporal do método numérico *density matrix renormalization group* (DMRG).

Para descrever a formação dos ordenamentos CDW e SDW, ligamos linearmente no tempo os termos do Hamiltoniano da evolução associados às interações de elétrons em sítios vizinhos e no mesmo sítio, respectivamente. Baseamos nossa análise no comportamento, ao longo do *quench*, dos parâmetros de ordem CDW e SDW, da entropia de emaranhamento e da fidelidade entre o estado evoluído e o correspondente estado fundamental de equilíbrio. Classificamos o comportamento do sistema de acordo com a escala de tempo na qual o *quench* é realizado (ou seja, em que as interações são ligadas): identificamos a existência dos regimes de impulso, intermediário e adiabático. Durante o *quench*, no regime de impulso, observamos que o estado evoluído permanece na mesma configuração do estado inicial, enquanto no regime adiabático ele segue o comportamento previsto para o estado fundamental do Hamiltoniano instantâneo. Para os *quenches* analisados, nossos resultados indicam que a escala de tempo associada ao comportamento adiabático depende do tipo de ordenamento do estado final. Observamos que o regime adiabático é atingido mais lentamente quando o estado final apresenta ordenamento CDW, em comparação com o caso em que o estado final tem ordenamento de spin. Precedendo o comportamento adiabático, no regime intermediário, vemos no primeiro caso um aumento da entropia de emaranhamento além do seu valor inicial o que não é observado no *quench* para a SDW. Concluímos assim que o regime adiabático para o caso de ordenamento CDW requer um tempo maior para se evitar que estados excitados emaranhados sejam acessados durante a dinâmica. Além disso, comparamos os casos nos quais apenas uma das interações (local ou entre primeiros vizinhos) é ligada durante o *quench* com casos nos quais ligamos ambas as interações simultaneamente. Nossos resultados mostram que a quebra da integrabilidade do modelo na presença de interações entre primeiros vizinhos não implica mudanças significativas no comportamento de não-equilíbrio no contexto da aproximação adiabática.

Palavras-chave: Interação eletrônica, não-equilíbrio, emaranhamento, ondas de densidade de carga, ondas de densidade de spin.

Abstract

In this thesis, we study non-equilibrium phenomena in strongly interacting systems. We focus on the out-of-equilibrium formation of charge and spin ordering in one dimension, starting from a disordered non-interacting state and that we let evolve in time according to an interacting Hamiltonian. We analyze the formation of charge and spin ordering within the half-filled one-dimensional extended Hubbard model with repulsive interactions, which presents the charge density wave (CDW) and spin density wave (SDW) phases. We perform finite time quenches to simulate the evolution of the initial state under a Hamiltonian in which electronic interactions increase linearly in time up to final values corresponding to the CDW or SDW phase. The non-equilibrium dynamics is described by the time extension of the density matrix renormalization group (DMRG) method.

By linearly turning on the nearest-neighbor or the onsite interaction, we describe the formation of the CDW and SDW ordering, respectively. Our analysis is based on the behavior, along the quench, of the CDW and SDW order parameters, the entanglement entropy, and the fidelity between the evolved state and the corresponding equilibrium ground state. We classify the system behaviour according to the timescale in which the quench is performed: we find the existence of impulse, intermediate, and adiabatic regimes. During the quench, in the impulse regime, we observe that the evolved state remains in the same configuration as the initial state, while in the adiabatic regime it follows the predicted behavior for the ground state of the instantaneous Hamiltonian. For the quenches we analyze, our results indicate that the timescale associated with adiabatic behavior depends on the final state ordering. We observe that the adiabatic regime is reached more slowly when the final state has CDW ordering, compared to the case in which the final state has spin ordering. In the intermediate regime, preceding the adiabatic one in the first case we see an increase in entanglement entropy beyond its initial value which is not observed in the quench towards SDW. We conclude that the adiabatic regime for the case of CDW ordering requires a longer time to prevent entangled excited states from being accessed during the quench. In our work, we also compare cases in which only one of the interactions (onsite or nearest-neighbor) is turned on during the quench with those in which we turn on both interactions simultaneously. Our findings show that the breaking of the system integrability, by turning on the nearest-neighbor interactions, does not give rise to significant changes in the nonequilibrium behavior within the adiabatic approximation.

Keywords: Electronic interaction, non-equilibrium, entanglement entropy, spin density waves, charge density wave.

Sumário

1	INTRODUÇÃO	9
2	SISTEMAS DE MUITOS CORPOS FORA DO EQUILÍBRIO	17
2.1	Motivações experimentais para sistemas fora do equilíbrio	17
2.2	Protocolo de não-equilíbrio: <i>quenches</i> quânticos	23
2.3	Propriedades do emaranhamento na dinâmica de não-equilíbrio	32
3	METODOLOGIAS	39
3.1	Grupo de renormalização da matriz densidade	41
3.2	Estado de produto de matrizes (MPS): formalismo e operações	44
3.2.1	Decomposição do valor singular e decomposição de Schmidt	44
3.2.2	Decomposição de um estado quântico em MPS	46
3.2.3	Decomposição de operadores em produto de matrizes	50
3.3	DMRG no formalismo MPS	53
3.3.1	DMRG para sistemas finitos	53
3.3.2	DMRG para sistemas infinitos	55
3.4	t-DMRG	56
4	RESULTADOS	59
4.1	Modelo e protocolo de <i>quench</i>	60
4.2	Caso de equilíbrio	63
4.3	Ligando U ou V no <i>quench</i>	64
4.3.1	Distribuições de carga e spin ao longo da cadeia	64
4.3.2	Fidelidade entre o estado evoluído e o estado de equilíbrio	68
4.3.3	Entropia de emaranhamento	70
4.3.4	Função desvio com respeito ao estado fundamental de equilíbrio	71
4.4	Ligando U e V simultaneamente	73
4.5	Dependência dos resultados com o tamanho do sistema	73
5	CONCLUSÕES GERAIS E PERSPECTIVAS FUTURAS	75
	REFERÊNCIAS	78
	APÊNDICE A – DMRG TRADICIONAL	90
A.1	Parte infinita	90
A.2	Parte finita - <i>sweeps</i>	91

A.3	Algoritmo t-DMRG	92
------------	-------------------------	-----------

1 Introdução

O entendimento das propriedades eletrônicas de materiais fortemente interagentes tornou clara a necessidade de tratamentos teóricos que consideram as interações entre um elevado número de partículas (da ordem de 10^{23}). Nesses sistemas, as interações são suficientemente fortes, extrapolando a validade de um tratamento perturbativo no qual os seus efeitos podem ser incorporados a um parâmetro (como a massa) de um sistema auxiliar de partículas livres.¹ Tipicamente, esses sistemas são compostos por elementos de transição, actínídeos e terras raras, que possuem orbitais espacialmente estreitos (d ou f) semi-preenchidos. Nesse caso, os elétrons passam mais tempo próximo aos núcleos atômicos e, assim, sofrem uma forte repulsão coulombiana, que dá origem a uma competição entre o caráter localizado e o caráter itinerante da função de onda eletrônica. Essa competição pode levar a uma transição metal-isolante induzida pelas interações entre elétrons no mesmo orbital [1]. O isolante em questão é conhecido como isolante de Mott.

Uma visão esquemática dos elementos químicos frequentemente observados em materiais fortemente interagentes é apresentada na Fig. 1, conhecida como diagrama de Kmetko-Smith, em que as linhas são organizadas de modo que os elementos mais localizados são encontrados acima, à direita, enquanto os mais delocalizados estão posicionados abaixo, à esquerda. Os metais de terras-raras e actínídeos, posicionados no campo superior direito do diagrama da Fig. 1, possuem orbitais f altamente localizados, apresentando momentos magnéticos locais. Quando átomos desses elementos são incorporados à estrutura eletrônica de metais convencionais, observa-se uma forte interação entre os elétrons de condução e os momentos magnéticos locais, podendo resultar em um comportamento anômalo da resistividade em função da temperatura no material, conhecido como efeito Kondo [3]. Por outro lado, entre os elementos considerados na Fig. 1,² os metais com orbital d posicionados no canto inferior esquerdo são mais itinerantes e apresentam supercondutividade convencional.³ Materiais compostos por elementos posicionados em torno da diagonal principal do diagrama de Kmetko-Smith (região esbranquiçada) apresentam propriedades físicas interessantes devido à competição entre o caráter localizado e itinerante dos elétrons. Por exemplo, esse é o caso do óxido de vanádio, V_2O_3 [5], que passa por uma

¹ Essa é a ideia central da teoria de líquidos de Fermi, que oferece uma metodologia para tratar problemas de muitas partículas interagentes em uma aproximação de partícula única.

² Elementos com orbitais do tipo s e p , em geral, apresentam um caráter mais delocalizado para os elétrons de valência quando trata-se de sólidos.

³ Em geral, a supercondutividade convencional está relacionada ao mecanismo de acoplamento dos elétrons com as vibrações da rede como o responsável pela origem de estados supercondutores em certos materiais. Esse mecanismo constitui o objeto central da teoria de Bardeen, Cooper e Schrieffer (conhecida como teoria BCS) [4]. Por outro lado, a supercondutividade não convencional está relacionada a outros tipos de mecanismos responsáveis pela condensação em estados supercondutores, como o acoplamento dos elétrons com as flutuações de spin da rede.

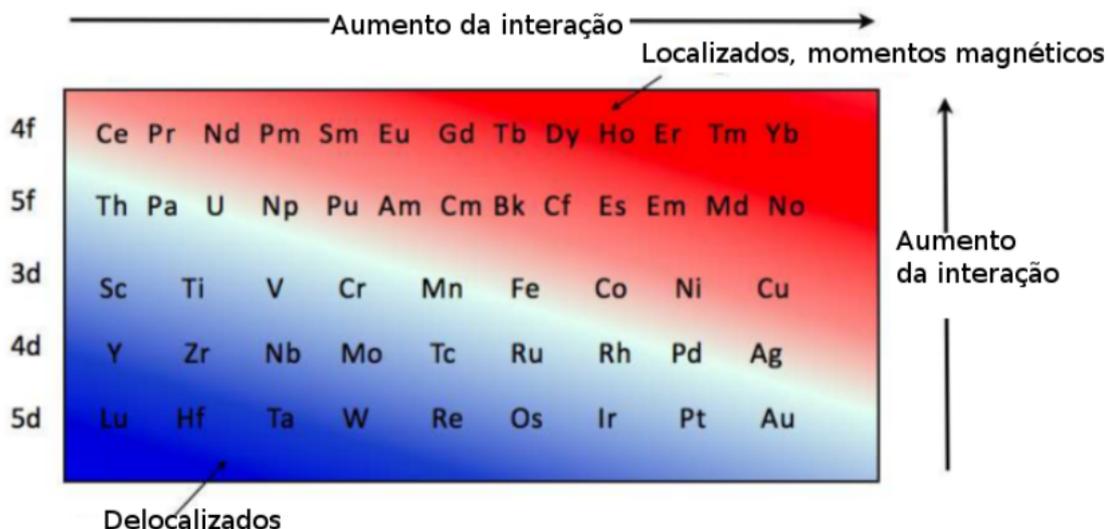


Figura 1 – Diagrama de Kmetko-Smith que apresenta uma tabela periódica rearranjada dos elementos de transição, actinídeos e terras raras (com orbitais d ou f), organizados dos elementos delocalizados (em azul) para os mais localizados (em vermelho). Figura adaptada de [2].

transição metal-isolante, induzida principalmente pela competição entre a energia cinética e a repulsão coulombiana dos elétrons⁴ - caracterizando uma transição de Mott.

Outro fator que torna os efeitos das interações relevantes para a descrição das propriedades que emergem de sistemas de muitos corpos é a dimensionalidade. Sistema de elétrons em uma dimensão (1D) são por natureza fortemente interagentes, extrapolando uma descrição efetiva onde as interações podem ser incorporadas a um parâmetro (como a massa dos elétrons) de um sistema auxiliar de partículas livres ou não interagentes. Esse é o motivo pelo qual as propriedades de sistemas 1D não são descritas via teoria do Líquido de Fermi, a qual prevê para uma classe de sistemas de elétrons interagentes em duas ou três dimensões que as excitações eletrônicas podem ser descritas por quasipartículas não interagentes com massa renormalizada. Essa teoria torna-se impraticável para sistemas 1D devido à coletivização das excitações de uma partícula. Numa visão pictórica, para se propagar em 1D um elétron inevitavelmente “empurra” seu vizinho mais próximo, tornando todo movimento individual em um movimento coletivo. Em outras palavras, todas as excitações individuais tornam-se coletivas em 1D, sendo essa a principal diferença entre a física de sistemas em uma dimensão e aqueles de dimensão maior que um. Essa peculiaridade da física em 1D é tratada pela teoria do Líquido de Luttinger (em contraste com a teoria do Líquido de Fermi), desenvolvida para descrever as propriedades de uma classe de sistemas unidimensionais no setor de baixas energias ou dos estados de mais baixa energia do sistema [6]. Vários sistemas apresentam um caráter unidimensional, como

⁴ Em termos experimentais, a diminuição da pressão está associada a um aumento das interações elétron-elétron ou a uma menor energia cinética dos elétrons.

fios quânticos semicondutores [7], sais orgânicos [8], nanotubos de carbono [9] e cupratos unidimensionais [10]. Em geral, a alta correlação eletrônica devido à resposta coletiva a uma perturbação externa resulta em um rico diagrama de fases para esses sistemas, como visto no exemplo de compostos orgânicos quase unidimensionais apresentado na Fig. 2.

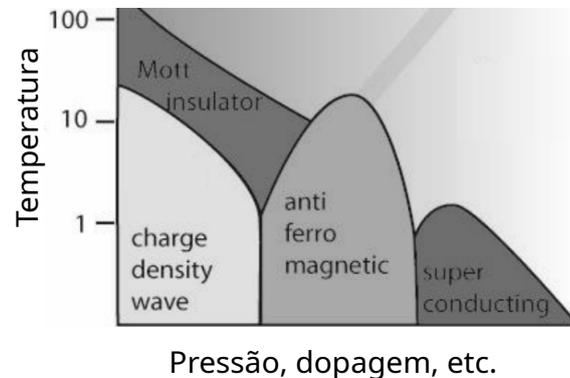


Figura 2 – Diagrama de fases esquemático para condutores orgânicos quase-1D. Figura adaptada de [11].

No diagrama de fases apresentado na Fig. 2, para temperatura próximas de zero, observamos a existência de duas fases isolantes, *charge density wave* (CDW) e antiferromagnética (AF), caracterizadas por uma periodicidade nas distribuições de carga e spin, respectivamente, e uma fase supercondutora não-convencional. Essas fases também são observadas em baixas temperaturas do diagrama de fases de compostos cujas as propriedades são descritas por sistemas com dimensão maior que um, como cupratos [12] e compostos baseados em Ferro [13]. Há uma tendência da comunidade científica em relacionar os mecanismos que dão origem às fases isolantes aos mecanismos que dão origem à fase supercondutora não-convencional, motivada pela frequente proximidade, ou mesmo superposição, entre essas fases no diagrama de fases de vários sistemas. A supercondutividade não-convencional presente nesses materiais não é explicada pela teoria do líquido de Fermi ou pela teoria da supercondutividade de Bardeen-Cooper-Schrieffer, sendo necessário o uso de outras abordagens para identificação dos mecanismos fundamentais que dão origem à fase supercondutora.

O estudo da relação entre os mecanismos que dão origem às fases isolantes (com ordenamento de carga ou de spin) e a fase supercondutora não-convencional é, em especial, estimulado pelo fato dessa última sobreviver até temperaturas elevadas (embora abaixo da temperatura ambiente $\sim 200K$), apresentando altas temperaturas críticas (T_c) para muitos compostos [14,15]. Quanto mais alta a temperatura abaixo da qual a resistividade do sistema tende a zero, maior é o potencial para aplicações tecnológicas. Entre as dificuldades relacionadas ao entendimento da origem da supercondutividade de alta T_c , destacam-se a identificação dos mecanismos de interação entre elétrons com outras entidades, como fônons, flutuações magnéticas e impurezas da rede. Nesse sentido, esforços teóricos são

necessários, em particular no setor de baixas energias desse sistema, visto a coexistência das fases CDW e AF com a fase supercondutora no diagrama de fases do regime de temperatura tendendo a zero, onde os efeitos de correlações puramente quânticas (que ocorrem em temperatura nula) são mais significativos. Entre as abordagens teóricas para o entendimento das fases isolantes, bem como o da fase supercondutora, destaca-se o uso de modelos efetivos, que possibilitam o estudo da relação entre os fenômenos que emergem de sistemas de muitos corpos com os mecanismos fundamentais previamente selecionados, incorporados ao modelo.

Os métodos teóricos que incorporam as interações eletrônicas para a descrição das propriedades de sistemas com um elevado número de partículas, em geral, não possuem soluções fáceis. A ideia central desses métodos consiste em considerar somente os graus de liberdade mais relevantes, estabelecendo um limite em que o problema se torne mais simples e possa ser resolvido de maneira controlada. Os efeitos que não estejam presentes nesse estágio da aproximação podem ser incluídos por meio de expansões em torno desse limite. Apesar dessa simplificação, modelos simples, como o de Hubbard de uma banda, podem ter soluções extremamente complexas e difíceis de serem obtidas. Para sistemas unidimensionais, existem procedimentos teóricos que habilitam um tratamento exato e sistemático para uma classe de modelos nesse contexto, como o ansatz de Bethe [6], bosonização e a matriz de transferência [16]. Essa classe, no entanto, corresponde a uma parcela dos problemas físicos atuais, motivando o uso de outras abordagens para tratar o problema.

Em geral é necessário utilizar ferramentas numéricas, que frequentemente envolvem aproximações, para resolução desses problemas. Em um tratamento numérico, a ideia básica consistiria em obter a diagonalização completa do Hamiltoniano do sistema. Entretanto essa tarefa envolve, via de regra, grandes esforços computacionais, mesmo para sistemas da ordem de dezenas de sítios. Por exemplo, a dimensão do espaço de Hilbert associado ao modelo de Hubbard unidimensional é igual a d^L , sendo $d = 4$ e L o comprimento da cadeia, implicando que as manipulações computacionais em princípio lidam com matrizes $d^L \times d^L$. Por outro lado, essa dificuldade pode ser amenizada por duas razões: muitos problemas físicos são bem atacados por aproximações que consideram somente interações de curto alcance, que por sua vez resultam em matrizes mais esparsas - manter apenas os elementos diferentes de zero pode diminuir o tamanho da matriz; também fazer o uso máximo das simetrias do sistema original pode reduzir ainda mais sua dimensão (os cálculos ficam limitados a um subespaço de interesse). Mesmo com todos esses artifícios, o tamanho da memória para armazenar e manipular os elementos do Hamiltoniano de muitos corpos constitui uma limitação severa. Nesse sentido, para tratar sistemas de tamanho arbitrariamente grande que não possuem solução trivial, são necessárias outras ferramentas que envolvam um certo tipo de aproximação. Nesse contexto surge o grupo de renormalização da matriz Densidade [17, 18] (DMRG, sigla do inglês), capaz de obter com

alta precisão o estado fundamental de sistemas 1D.

O DMRG é um método varacional baseado em truncagens “inteligentes” do espaço de Hilbert, considerado “estado da arte” para a descrição das propriedades no setor de baixas energias de sistemas unidimensionais. A precisão do método é regulada pelo crescimento do emaranhamento com o comprimento do sistema. Para sistemas em 1D com interações de curto alcance, a lei de área⁵ [19] prevê um limite superior para o emaranhamento entre subpartes do sistema que independe do comprimento do sistema, justificando a alta eficiência do DMRG para essa classe de modelos. Em termos computacionais, a presença desse limite viabiliza uma descrição precisa das propriedades eletrônicas que ocorrem no limite termodinâmico.⁶ Nas últimas décadas, a utilização do emaranhamento como ferramenta para classificar transições de fase e caracterizar estados quânticos vem estimulando uma maior interação entre as comunidades de informação quântica e de sistemas de muitos corpos [20–27].

Além de propriedades estáticas, como o rastreamento da função de onda do estado fundamental, o DMRG apresenta uma reformulação para estudar a evolução temporal de sistemas unidimensionais, conhecido como grupo de renormalização da matriz densidade dependente do tempo (t-DMRG, sigla do inglês) [28, 29]. Essa implementação estimulou o estudo da dinâmica de não-equilíbrio de sistemas quânticos, em especial, produzidas por *quenches*. O protocolo de *quench* é baseado na mudança de um parâmetro do sistema (como as interações entre as partículas) em uma dada escala de tempo, em geral sendo esse um processo não perturbativo, visto que a modificação introduz uma quantidade relevante de energia no sistema. Teoricamente, o sistema é inicialmente preparado em um dado estado quântico, $|\psi_0\rangle$ (sendo esse o estado fundamental obtido via DMRG para um Hamiltoniano inicial, H_0), em seguida evolui no tempo via t-DMRG sob influência de outro Hamiltoniano, H , tal que o novo estado terá a forma $|\psi, t\rangle = e^{-iHt} |\psi_0\rangle$. A forma e escala de tempo nas quais o *quench* é realizado dá origem a uma série de investigações que incluem questões ligadas ao estudo de transições de fase, formação de domínios de carga e/ou spin, propagação das correlações, propriedades de transporte e emergência de estados transientes de não-equilíbrio sem contrapartida com o caso estático [30–35].

Entre os avanços experimentais para o estudo da evolução de sistemas quânticos, destacam-se as implementações de átomos frios em rede óticas,⁷ que são capazes de simular Hamiltonianos de sistemas fermiônicos ou bosônicos com parâmetros altamente

⁵ Mais detalhes sobre a lei de área são dados no Capítulo 3.

⁶ O aumento do emaranhamento com o crescimento do sistema está associado a uma maior utilização de recursos computacionais, como a memória RAM, utilizada para armazenar as bases utilizadas para representar a função de onda durante a convergência do cálculo.

⁷ Átomos são armadilhados em potenciais periódicos formados pela superposição de feixes de lasers contra-propagantes. A geometria da rede de confinamento, bem como a profundidade do potencial ótico, podem ser manuseadas com alta precisão, permitindo um alto controle dos parâmetros do sistema simulado.

controlados [36–39]. Essas implementações permitiram sondar a evolução de sistemas quânticos sem o amortecimento da dinâmica por qualquer processo de decoerência. Esses experimentos abriram a possibilidade de investigar a dinâmica de não-equilíbrio produzidas por *quenches*. Um exemplo seminal foi dado ao observar a formação de um cone de luz efetivo que limita a velocidade de propagação da informação em cadeias bosônicas realizadas em redes óticas [40]. Nesse experimento, investigou-se a evolução das funções de correlação após um *quench* em um sistema inicialmente preparado no estado isolante de Mott, mostrando um boa aproximação entre os dados experimentais com resultados de t-DMRG.

Nos últimos anos, esse alinhamento entre os resultados experimentais e teóricos vem estimulando estudos sobre a relação entre a forma do *quench* e o comportamento do emaranhamento entre subpartes do sistema. Esse estudo é especialmente relevante pelo fato do emaranhamento no cenário de não-equilíbrio por enquanto não ser mensurável experimentalmente, exigindo uma análise teórica.⁸ No contexto de matéria condensada, o emaranhamento tem sido frequentemente utilizado para caracterizar transições de fase [21–24, 42] e orientar processos de termalização e equilíbrio de sistemas quânticos implementados em redes óticas [43, 44]. No âmbito teórico, a dinâmica de não-equilíbrio do emaranhamento tem sido frequentemente investigada em modelo de spin, visto o maior conjunto de técnicas analíticas disponíveis e a menor complexidade das simulações numéricas quando comparadas ao modelos de partículas com mais graus de liberdade. No contexto de *quenches* controlados no tempo em sistemas que consideram os graus de liberdade de spin e carga, especialmente os de natureza fermiônica, essa análise tem sido pouco explorada [45–47], permanecendo um problema aberto e pouco investigado em muitos contextos.

Nessa perspectiva, a presente tese versa sobre uma investigação teórica da relação de dependência entre os mecanismos elementares que produzem uma situação de não-equilíbrio e a formação de fases isolantes em sistemas de baixa dimensionalidade. Como visto no exemplo da Fig. 2, esses sistemas apresentam um rico diagrama de fases, que incluem fases isolantes, caracterizadas pelos ordenamentos de carga e spin, e uma fase supercondutora, as quais possivelmente compartilham a mesma origem, ou seja, os mesmos mecanismos fundamentais. Nesse sentido, o estudo da formação das fases isolantes pode orientar o estudo de outros comportamentos presentes nesses sistemas, bem como pode fornecer subsídios para o entendimento de como ocorrem as transições de fase. Neste estudo será considerado o modelo de Hubbard estendido unidimensional, descrito da seguinte

⁸ Resultados experimentais de sondagem da dinâmica de não-equilíbrio são baseados no uso de técnicas de espectroscopia que consideram uma pequena porção do sistema, sendo possível avaliar quantidade locais. Medidas de emaranhamento pressupõem que todo o sistema seja analisado no momento da medida. No entanto, resultados de emaranhamento para o caso de equilíbrio podem ser encontrados em experimentos de redes óticas [41].

forma:

$$H = -J \sum_{j=1}^{L-1} \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \left(a_{j,\sigma}^\dagger a_{j+1,\sigma} + H.c. \right) + U \sum_{j=1}^L \hat{n}_{j\uparrow} \hat{n}_{j\downarrow} + V \sum_{j=1}^{L-1} \hat{n}_j \hat{n}_{j+1}, \quad (1.1)$$

em que L é o tamanho da cadeia, $a_{j,\sigma}^\dagger$ e $a_{j+1,\sigma}$ são os operadores de criação e aniquilação, respectivamente, de um férmion com spin σ no sítio j , $\hat{n}_{j,\sigma} = a_{j,\sigma}^\dagger a_{j,\sigma}$ e $\hat{n}_j = \hat{n}_{j,\uparrow} + \hat{n}_{j,\downarrow}$. A amplitude de *hopping* entre os sítios vizinhos é dada pelo parâmetro J , enquanto as interações no sítio e entre primeiros vizinhos são dadas por U e V , respectivamente. Esse modelo, além de sua realização em redes óticas [36, 39], pode ser usado para descrever as propriedades eletrônicas de materiais que apresentam efetivamente um caráter unidimensional [8–10], como condutores orgânicos unidimensionais, nanotubos de carbono e cupratos unidimensionais.

Em equilíbrio, para interações repulsivas e semi-preenchimento, o modelo apresentado na eq. (1.1) possui um rico diagrama de fase que inclui as fases isolantes *charge-density wave* (CDW), *spin-density wave* (SDW) e *bond-order wave* (BOW) - esta última gerada pela instabilidade produzida pela competição entre os ordenamentos de spin e carga. Neste projeto, nosso foco está em investigar formação de não-equilíbrio das fases CDW e SDW. Basicamente, o ordenamento CDW surge quando a forte repulsão coulombiana entre sítios vizinhos, controlada pelo parâmetro V , desfavorece a ocupação eletrônica entre sítios consecutivos da cadeia, tal que o estado fundamental é caracterizado por um padrão de alternância entre sítios duplamente ocupados e sítios vazios ao longo da cadeia. A SDW, por outro lado, basicamente ocorre quando a forte repulsão coulombiana no sítio, controlada pelo parâmetro U , desfavorece a dupla ocupação, tal que o estado fundamental apresente uma periodicidade na distribuição de spin, caracterizada pelo ordenamento antiferromagnético. No Capítulo 4 apresentamos o diagrama de fases do modelo da eq. (1.1), dando mais detalhes sobre as características dessas fases. Um dos objetivos desta tese é analisar as propriedades de não-equilíbrio desse modelo, bem como os mecanismos físicos por trás da formação dos ordenamentos CDW e SDW no contexto de um modelo baseado puramente em interações elétron-elétron. No primeiro estágio desse intento, o estado inicial será preparado em uma configuração desordenada e interações desligadas (U e V iguais a zero). O segundo estágio consiste em investigar os fenômenos que precedem a formação das fases isolantes, em um cenário de não-equilíbrio - produzido via *quenches* - em que controlamos a velocidade em que as interações são ligadas até a região de parâmetros correspondentes aos ordenamentos CDW e SDW. Os códigos DMRG e t-DMRG (disponíveis no endereço eletrônico <https://github.com/isaacarvalho7/t-DMRG>) utilizados neste estudo foram desenvolvidos pelo autor desta tese, implementado majoritariamente em linguagem de programação C++, usando o pacote ITensor [48]. Os resultados e os detalhes dessa investigação serão abordados nos próximos capítulos.

Esta tese é organizada da seguinte forma:

- no Capítulo 2 apresentamos uma revisão da literatura sobre resultados experimentais e teóricos que motivam e orientam a investigação das propriedades de não-equilíbrio em sistemas de muitos corpos interagentes. Focamos em fenômenos que envolvem a formação de fases isolantes no contexto de não-equilíbrio, destacando resultados de implementações em redes óticas e avanços teóricos sobre a relação entre o emaranhamento e as propriedades emergentes;
- no Capítulo 3 apresentamos uma revisão mais detalhada dos métodos DMRG e t-DMRG no formalismo do produto de matrizes [18] utilizado para implementação do código desenvolvido para o estudo do problema tratado nesta tese. Essas técnicas foram selecionadas devido à sua eficiência em tratar propriedades de equilíbrio e não-equilíbrio de sistemas unidimensionais;
- e finalmente no Capítulo 4 apresentamos os resultados principais desta tese, sobre o estudo da formação dos ordenamentos de carga e spin no contexto do modelo de Hubbard estendido. Especificamente, exploramos a formação dos ordenamentos CDW e SDW controlando a velocidade na qual as interações no sítio e entre sítios mais próximos são ligadas a partir de um estado inicial preparado com interações desligadas. Investigamos a evolução dos parâmetros de ordem dos ordenamentos e do emaranhamento entre bipartições do sistema, relacionando os comportamentos dessas quantidades com as excitações produzidas ao ligarmos as interações. Esses resultados foram publicados na *Physical Review B* [49].

No final desta tese apresentamos as conclusões gerais e perspectivas de trabalhos futuros.

2 Sistemas de muitos corpos fora do equilíbrio

Este capítulo é dedicado a uma revisão da literatura sobre as propriedades de não-equilíbrio que emergem de sistemas de muitos corpos. O estudo dessas propriedades vem sendo estimulado pelos recentes avanços das técnicas de espectroscopia resolvida no tempo [50] e implementações que utilizam redes óticas com átomos frios [39], que permitem acessar com alta precisão a dinâmica de relaxamento de sistemas postos fora do equilíbrio. Entre as questões que permeiam esse rico tema de pesquisa, o entendimento da competição dos mecanismos eletrônicos que dão origem às propriedades de não-equilíbrio em materiais fundamenta a ideia básica de diversos problemas de pesquisa nessa área.

Utilizaremos essa ideia como pano de fundo para analisar alguns trabalhos tratados na literatura, caminhando primeiro sobre as realizações experimentais em materiais e depois sobre as implementações que utilizam átomos frios em redes óticas (sistemas artificiais que simulam materiais). Esse último caso representa um importante avanço experimental para o estudo de sistemas isolados de banhos térmicos, ou qualquer outra fonte de decoerência, que amortecem a dinâmica de não-equilíbrio.

A possibilidade de isolar sistemas eletrônicos corresponde a uma importante motivação para o estudo teórico de sistemas com propriedades exclusivamente quânticas - que ocorrem no limite de temperatura zero. Partindo de um cenário mais simples podemos explorar em maior detalhe a conexão entre o papel desempenhado pelos mecanismos de interação e as propriedades correspondentes no regime de não-equilíbrio. Entre os protocolos de não-equilíbrio, com redes óticas é possível sondar sistemas quânticos cujas interações entre as partículas foram modificadas num intervalo de tempo controlado - algo não realizável em materiais. Essa perspectiva permite estudar temas desafiadores de pesquisa como termalização, equilíbrio e o surgimento de alguma velocidade limite na qual a informação se espalha pelo sistema.

Este capítulo é dividido em duas seções: na primeira revisamos as realizações experimentais de não-equilíbrio em sistemas de muitos corpos, indo de materiais às redes óticas; na segunda conectamos as realizações experimentais de redes óticas com o protocolo de não-equilíbrio chamado *quench* quântico, discutindo alguns conceitos fundamentais deste assunto e a conexão com o projeto desta tese.

2.1 Motivações experimentais para sistemas fora do equilíbrio

Nas últimas décadas, os avanços experimentais em técnicas de espectroscopia resolvida no tempo estimularam o estudo de fenômenos de não-equilíbrio, levando a

insights complementares à análise de equilíbrio. A possibilidade de observar eventos na escala de femtossegundos permitiu sondar em mais detalhes a dinâmica de relaxamento das propriedades de não-equilíbrio de materiais, estimulando a pesquisa nesse campo. Nessa escala, processos ultra-rápidos (da ordem de 10^{-15} s) relacionados à mobilidade eletrônica, como o movimento dos elétrons de valência ao longo dos íons, podem ser explorados. Nas últimas décadas, o acesso à dinâmica desses processos vem estimulando novas pesquisas sobre o comportamento eletrônico no cenário de não-equilíbrio. Um exemplo seminal nesse contexto foi dado ao mostrar que a resposta espectroscópica da dinâmica de relaxamento de materiais perturbados por pulsos de lasers pode revelar a natureza dos mecanismos dominantes que dão origem à localização eletrônica em transições do tipo metal-isolante¹ [51]. Essa possibilidade ataca um problema central em matéria condensada, que é a identificação dos mecanismos predominantes que dão origem às propriedades de equilíbrio em materiais, já que esses sistemas tipicamente apresentam processos interativos simultâneos, como interações elétron-elétron e elétron-fônon. Além disso, a identificação desses mecanismos representa um passo fundamental para o estudo teórico dos fenômenos que emergem desses sistemas, que em princípio considera a interação entre um número elevado de constituintes (da ordem de 10^{23}). Desta forma, esse exemplo mostra como os fenômenos de não-equilíbrio podem orientar o entendimento das propriedades estáticas de materiais.

A ideia básica que fundamenta a seleção dos graus de liberdade mais importantes na análise de não-equilíbrio do exemplo anterior é que a escala de tempo em que ocorre a dinâmica de relaxamento do parâmetro de ordem eletrônico reflete a natureza do tipo de interação dominante. Essa análise estimula novas pesquisas sobre como a competição entre os graus de liberdade do sistema conecta os fenômenos de equilíbrio e não-equilíbrio, especialmente nos contextos de transições e formação de fases. Essa conexão representa um frutífero problema de pesquisa, que vem recebendo destaque em muitos contextos [50, 52].

Transpondo a ideia de um estudo que complementa a análise de equilíbrio - como a identificação dos mecanismos de interação predominantes mostrados anteriormente - a dinâmica de não-equilíbrio oferece acesso a novas propriedades da matéria. Como exemplo, destaca-se o comportamento supercondutor transiente acessado durante a dinâmica de relaxamento de compostos fotoexcitados [50, 53, 54]. Em uma visão geral, a fotoexcitação pode alterar o formato da energia livre do sistema, possibilitando o acesso a fases da matéria que podem não existir no equilíbrio térmico. Basicamente isso ocorre porque a competição entre os mecanismos que dão origem ao comportamento de equilíbrio é afetada ao excitar o sistema. Isso possibilita a emergência de estados supercondutores transientes que podem ser acessados em temperaturas maiores do que a temperatura

¹ Este exemplo se insere no contexto de experimentos de *pump and probe*, baseados no uso de pulso de laser ultra-rápido - da ordem de femtossegundos - que permite sondar (*probe*) a dinâmica de relaxamento de átomos e moléculas após uma perturbação inicial (*pump*).

crítica da transição para supercondutor.

Além de induzir estados delocalizados não presentes no equilíbrio, foi visto que compostos postos fora do equilíbrio por fotoexcitação podem acessar estados com ordenamento de carga [55]. Especificamente, foi observada a presença de um estado transiente do tipo onda de carga (CDW, sigla do inglês) induzido pela fotoexcitação do composto LaTe_3 , como mostrado na Fig. 3. Em um instante de tempo posterior à fotoexcitação, ao longo do plano formado pelo Te ocorre a formação de ordenamentos de carga unidirecionais, os quais são perpendiculares à CDW unidirecional de equilíbrio. Em equilíbrio, as CDW unidirecionais ao longo do eixo-c se formam como consequência de uma pequena anisotropia dos íons do plano-ac ($a \geq 0.997c$). Isso pode ser visto na Fig. 3(b), que mostra os resultados da dinâmica da difração eletrônica. Em equilíbrio, os picos do padrão de difração eletrônico revelam os ordenamentos de carga unidirecionais ao longo do eixo-c e os íons da rede, bolas pequenas e bolas grandes no painel (b) da Fig. 3, respectivamente. Após a fotoexcitação, picos adicionais aos de equilíbrio surgem devido ao ordenamento CDW transiente. Os autores sugerem que ambos ordenamentos, de equilíbrio e não-equilíbrio, são gerados pelos mesmos mecanismos eletrônicos, dada a escala de tempo muito curta na qual a CDW transiente aparece após a fotoexcitação. Embora a origem dos ordenamentos permaneça em debate, há fortes indícios que ambas CDWs competem no equilíbrio, tal que a instabilidade gerada pela fotoexcitação favoreça o ordenamento transiente ao longo do eixo-a.

Esses resultados reforçam a ideia de que regiões de instabilidade eletrônica constituem um ambiente frutífero para o estudo de fenômenos de não-equilíbrio. Essa acessibilidade a estados de não-equilíbrio é especialmente importante quando há competição de fases, sendo uma delas preferida em relação a outra a menos de uma pequena escala de energia, em princípio superável pela fotoexcitação. Novas propriedades de não-equilíbrio, sem contrapartida no caso de equilíbrio, têm sido frequentemente rastreadas nesse regime [55–57], muitas vezes vistas em regiões próximas de transições de fase. Por outro lado, há cenários em que a perturbação induz transições de fase, como é o caso da transição de isolante para metal fotoinduzidas em isolantes de Mott [58–62]. Nesse sentido, o entendimento de como a competição dos diferentes mecanismos de interação eletrônica é afetada ao excitar sistemas nesses regimes fundamenta um amplo problema de pesquisa. Esses desenvolvimentos estão abrindo caminho para novos fenômenos de não-equilíbrio que eventualmente podem ser induzidos e manipulados por parâmetros externos.

Entre os avanços experimentais que estimularam o estudo de fenômenos de não-equilíbrio, destacam-se também as implementações de átomos frios confinados em redes óticas. Essas redes são formadas pela superposição de lasers contra-propagantes. As interferências entre os feixes formam um potencial efetivo onde os átomos podem ser aprisionados. O perfil de interferência dos lasers pode produzir potenciais que simulam estruturas cristalinas em uma, duas e três dimensões [37–39]. A visão esquemática dessas

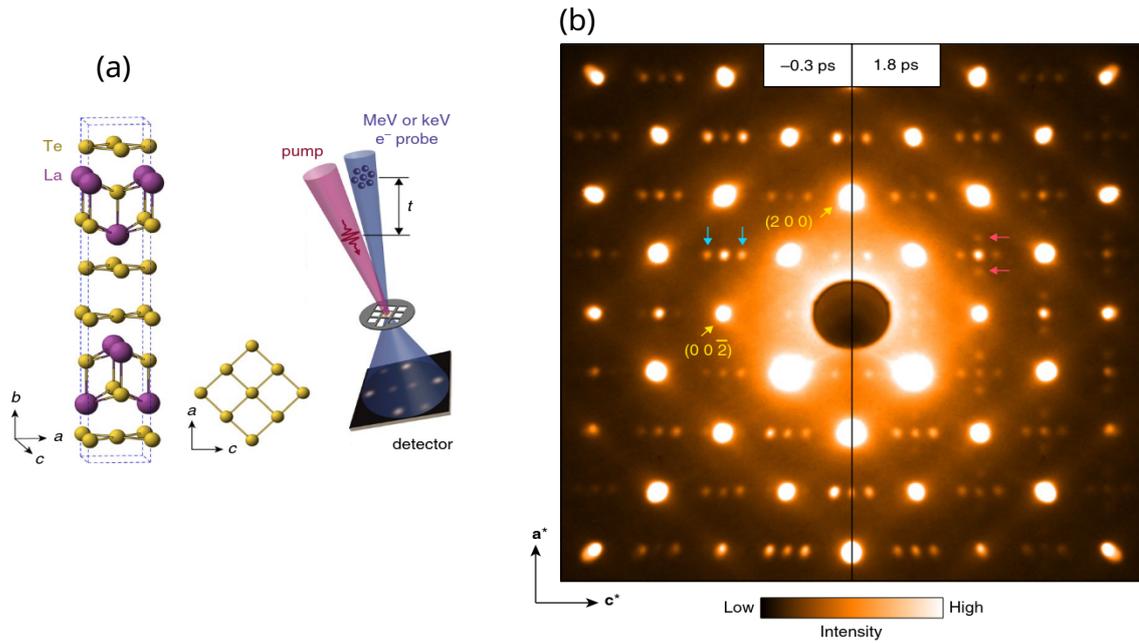


Figura 3 – Observação de uma CDW transiente fotoinduzida no LaTe_3 . Em (a) está o esquema da estrutura cristalina LaTe_3 , onde as linhas pontilhadas indicam a célula unitária. O estado CDW transiente é observado no plano- ac formado pelo Te. O esquema experimental da difração de elétron ultrarrápida é apresentado ao lado da estrutura cristalina, o qual mostra a sondagem *probe*, após um tempo t , da dinâmica de não-equilíbrio produzida por um pulso de laser *pump*. Em (b) é apresentado o padrão de difração eletrônico antes (à esquerda) e após (à direita) 1.8ps da fotoexcitação com um pulso de laser próximo ao infravermelho. As imagens à esquerda e à direita são espelhadas, onde $\mathbf{a}^* \equiv (2\pi/|\mathbf{a}|)\hat{\mathbf{a}}$ e $\mathbf{c}^* \equiv (2\pi/|\mathbf{c}|)\hat{\mathbf{c}}$ são os vetores unitários da rede recíproca. As setas em azul e vermelho indicam os picos da CDW de equilíbrio ao longo do eixo- c e os picos da CDW fotoinduzida ao longo do eixo- a , respectivamente.

implementações é apresentada na Fig. 4. Esses arranjos experimentais funcionam como

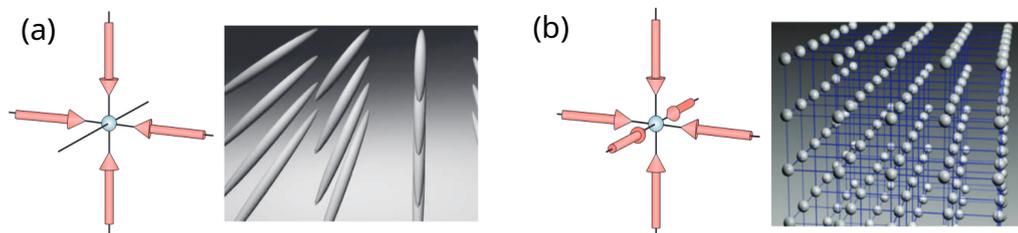


Figura 4 – Potencial óptico formado pela superposição de dois ou três feixes ortogonais. O painel (a) mostra redes em forma de tubos de potencial unidimensional. Em (b) a superposição resulta numa rede cúbica tridimensional. Figura retirada de [63].

“sólidos artificiais”, que habilitam simulações de sistemas bosônicos e fermiônicos. Enquanto o estudo de fenômenos que emergem de materiais reais exige diversas considerações para

a análise de determinada propriedade física - como a presença de defeitos na estrutura cristalina e vibrações de rede - experimentos em redes óticas são construídos a partir da seleção de determinados graus de liberdade para o estudo de um fenômeno.

A alta controlabilidade dos parâmetros físicos em experimentos com redes óticas possibilita simular modelos efetivos que descrevem as interações entre as partículas. Por exemplo, controlando a profundidade do potencial ótico foi possível simular a transição da fase superfluido para um isolante de Mott em um sistema bosônico [63]. Efetivamente esse sistema é descrito pelo modelo de Bose-Hubbard, cujo Hamiltoniano é dado por

$$\hat{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} a_i^\dagger a_j + \frac{1}{2} U \sum_i \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1), \quad (2.1)$$

em que o primeiro termo corresponde à energia cinética, descrita pelo tunelamento J entre sítios vizinhos $\langle i, j \rangle$, sendo que a_i (a_i^\dagger) cria (aniquila) uma partícula bosônica no sítio i . O segundo termo corresponde às interações U entre as partículas, sendo que \hat{n}_i avalia a densidade de partículas no sítio i . O aumento da profundidade do potencial ótico corresponde ao aumento de U e diminuição de J . A fase superfluida foi obtida para um poço suficientemente raso, favorecendo a mobilidade das partículas, enquanto a fase isolante foi observada aumentando a profundidade do potencial. O esquema dessa transição pode ser observado na Fig. 5. Na fase superfluida apresentada no painel (a), a ocupação por sítio pode flutuar ao longo da rede devido à mobilidade das partículas, enquanto na fase isolante de Mott no painel (b) temos uma partícula por sítio.

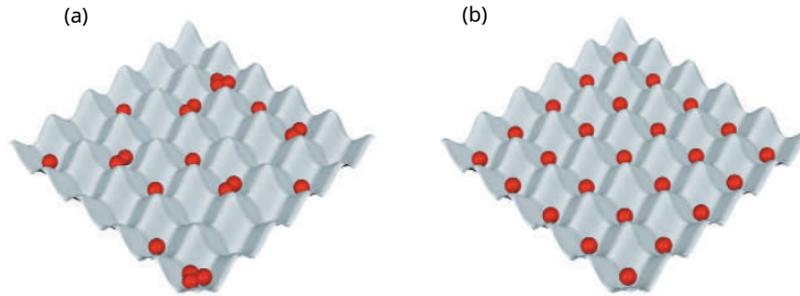


Figura 5 – Transição superfluida para isolante de Mott em redes óticas. Em (a) está representada a visão esquemática da fase superfluida, enquanto em (b) da fase isolante de Mott. Figura retirada de [63].

Experimentos em redes óticas podem fazer contribuições únicas para nosso entendimento da dinâmica de não-equilíbrio de sistemas quânticos de muitos corpos. Entre os fatores que tornam essas realizações experimentais idealmente adequadas para o estudo de fenômenos dinâmicos, destacam-se as escalas de tempo convenientes, isolamento do ambiente e alta controlabilidade dos parâmetros do sistema [64]. A frequência característica de átomos frios em redes óticas é da ordem de kilohertz, em contraste à frequência usual de sólidos reais, que estão no intervalo entre giga a terahertz. Essa diferença revela uma

vantagem em utilizar redes óticas para explorar a física de fenômenos de não-equilíbrio, visto que a dinâmica dos eventos pode ser observada em escalas de tempo ao menos um bilhão de vezes maiores do que geralmente é observada em sólidos.

Enquanto sistemas da matéria condensada sempre envolvem algum tipo de acoplamento com um reservatório térmico (usualmente feito pelos fônons no cristal), experimentos de átomos frios são essencialmente isolados. Esses experimentos permitem explorar a dinâmica coerente de sistemas quânticos fechados em longas escalas de tempo, ao contrário do que ocorre em materiais reais, onde ela é rapidamente amortecida pelo acoplamento com o banho. Isso permite investigar a evolução unitária de sistemas quânticos fechados após uma perturbação, possibilitando estudar a conexão entre os comportamentos de equilíbrio e não-equilíbrio sem o amortecimento da dinâmica provocado por qualquer processo de decoerência [65].

Um exemplo seminal dessas realizações experimentais foi dado ao observar a formação de um cone de luz efetivo que limita a velocidade de propagação da informação em cadeias bosônicas formadas por átomos de Rb [40]. Nesse experimento, investigou-se a evolução das funções de correlação após abaixar subitamente o potencial ótico em um sistema inicialmente preparado no estado isolante de Mott, como apresentado na Fig. 6. Essa mudança abrupta do potencial para produzir a dinâmica de não-equilíbrio é comumente conhecida como *quench* quântico (detalhes teóricos sobre esse protocolo de não-equilíbrio são dados na próxima seção). Após o *quench* há a formação de dois tipos de quase-partículas: *holon* e *doublon*, que correspondem à ausência de partícula (em azul na Fig. 6) e dupla ocupação (em vermelho na Fig. 6) no sítio, respectivamente. Essas quase-partículas emergem emaranhadas e se propagam em direções opostas ao longo da cadeia, introduzindo novas correlações no sistema. Nesse estudo é medida a propagação da função de correlação entre o par, *holon* e *doublon*, ao longo dos sítios da cadeia na seguinte forma:

$$C_d(t) = \langle \hat{s}_j(t) \hat{s}_{j+d}(t) \rangle - \langle \hat{s}_j(t) \rangle \langle \hat{s}_{j+d}(t) \rangle, \quad (2.2)$$

onde j identifica a posição do sítio e d denota a distância até o segundo sítio considerado. O operador $\hat{s}_j(t) = e^{i\pi[\hat{n}_j(t) - \bar{n}]}$ mede a paridade do número de ocupação $\hat{n}_j(t)$, enquanto $\bar{n} = 1$ representa o regime de semi-preenchimento investigado no trabalho. Na ausência (presença) de quase-partícula seu resultado é igual a $+1$ (-1). A Fig. 7 apresenta a função de correlação em função do tempo para diferentes distâncias. Para cada valor de d , observa-se um pico de correlação positiva no tempo $t = d/v$. Essa observação indica a propagação de um “pulso” de correlação com velocidade v , formando um cone de luz efetivo, representado no inset da Fig. 7. A existência de uma velocidade máxima de propagação da informação foi proposta por Lieb e Robinson para uma classe de sistemas (por exemplo, redes de spins de muitos corpos com interações de curto alcance [66]) e verificada experimentalmente, como visto implementação de redes óticas da Fig. 7.

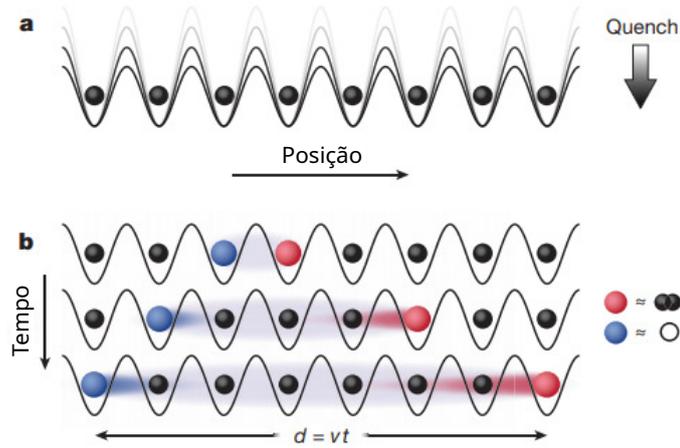


Figura 6 – a) Sistema unidimensional composto por átomos bosônicos (bolas pretas) em uma rede óptica, o qual foi preparado inicialmente em um estado isolante de Mott. A profundidade do potencial óptico é abruptamente diminuída (seta à direita especificando o *quench*), deixando o sistema fora do equilíbrio; b) Após abaixar abruptamente a profundidade do potencial óptico, pares emaranhados de quase-partícula emergem em todos os sítios da cadeia. Cada um desses pares consiste em um *doublon* e um *holon* (bola vermelha e azul, respectivamente) que se propagam (na figura, a seta do tempo indica a direção temporal da propagação) balisticamente em direções opostas. Isso resulta em uma correlação na paridade da ocupação dos sítios separados por uma distância $d = vt$, sendo v a velocidade relativa dos *doublons* e *holons*. Figura adaptada de [40].

No exemplo de redes óticas mostrado anteriormente, o cenário de não-equilíbrio produzido pelo abaixamento abrupto do potencial óptico dá origem à correlações adicionais (não presentes no equilíbrio) que se propagam com velocidade limite pela cadeia. Esse protocolo de não-equilíbrio corresponde a um *quench* instantâneo ou abrupto nas interações entre as partículas do sistema. Na próxima seção daremos mais detalhes sobre esse protocolo, utilizado para produzir um cenário de não-equilíbrio, mostrando trabalhos teóricos onde foram observados cones de luz.

2.2 Protocolo de não-equilíbrio: *quenches* quânticos

Um *quench* quântico é um processo de não-equilíbrio no qual o sistema, inicialmente em um dado estado, é induzido a evoluir sob ação de um Hamiltoniano aplicado. Esse protocolo pode ser dividido em duas etapas: na primeira o sistema é preparado em um estado inicial $|\Psi_0\rangle$ que corresponde ao estado fundamental de algum Hamiltoniano inicial \hat{H}_0 ; na segunda, o estado inicial evolui sob ação de um novo Hamiltoniano \hat{H} aplicado. Em geral, como o estado $|\Psi_0\rangle$ não é um auto-estado de \hat{H} , a evolução não é trivial. A resposta do sistema a um *quench* revela suas escalas de tempo intrínsecas, os mecanismos subjacentes à evolução e as transições de fase que acontecem à medida que evolui. Esse

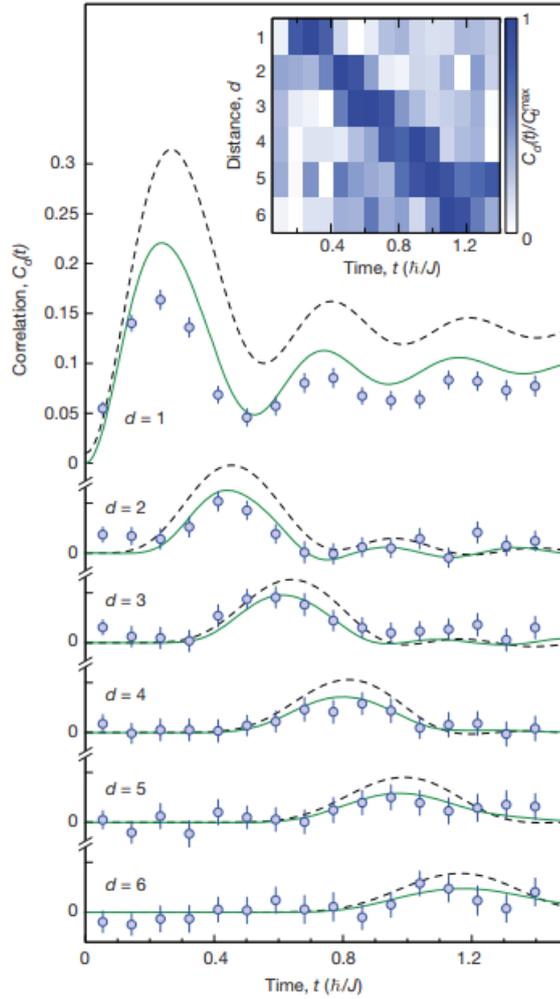


Figura 7 – Após o *quench*, um sinal positivo da função de correlação entre as duas quase-partículas (tipos *doublon* e *holon*) se propaga para distâncias maiores conforme o tempo evolui, seguindo um cone de luz efetivo apresentado no painel inserido na imagem. Resultados experimentais e numéricos são identificados pela bola azul e pela linha contínua verde, respectivamente. As linhas pretas tracejadas são resultados do modelo analítico e reproduzem qualitativamente a dinâmica. Figura retirada de [40].

estudo é permeado por questões relacionadas ao desenvolvimento de novas correlações, ao comportamento dos parâmetros de ordem eletrônico e dos observáveis locais durante a dinâmica de relaxamento, à formação de domínios de carga ou spin, entre outras.

Como já mencionado, o *quench* pode ser abrupto, i.e., ocorrer sobre uma janela de tempo muito curta em relação a outras escalas de tempo do sistema, ou pode ser controlado por alguma taxa de variação no tempo. Temos a estrutura $|\Psi, t\rangle = e^{-i\hat{H}t} |\Psi_0\rangle$ para a evolução da função de onda após o *quench* ser aplicado, sendo que \hat{H} pode ser dependente do tempo no caso do *quench* não ser abrupto. *Quenches* podem ser classificados como globais ou locais, dependendo de se a alteração afeta todo ou uma pequena porção do sistema, respectivamente. Por exemplo, a mudança das interações entre dois sítios

específicos numa cadeia de elétrons suficientemente grande é classificada como local, enquanto mudar as interações entre todos os sítios da cadeia é chamada global.

Tipicamente, *quenches* quânticos não são processos de baixa energia. Uma quantidade de energia é injetada no sistema, $\epsilon_{quench} = \langle \Psi_0 | H | \Psi_0 \rangle$, e conservada ao longo da evolução [67]. Se escrevermos o estado inicial na base $\{|n\rangle\}$ do Hamiltoniano da evolução, temos que $\epsilon_{quench} = \sum_{\{n\}} \epsilon_n |\langle n | \Psi_0 \rangle|^2$. Isso especifica a superfície de energia na qual o sistema relaxa, formada pela superposição do estado inicial com os estados da base do Hamiltoniano que rege a dinâmica. Desta forma, como a energia colocada no sistema isolado não pode ser dissipada, geralmente não há um relaxamento para o estado fundamental, embora em *quenches* locais - que envolvem uma menor energia injetada - exista uma maior tendência para isso. Em vez disso, os auto-estados que contribuem para a dinâmica dependem fortemente do estado inicial através das superposições $C_n = \langle n | \Psi_0 \rangle$, como visto na Fig. 8.

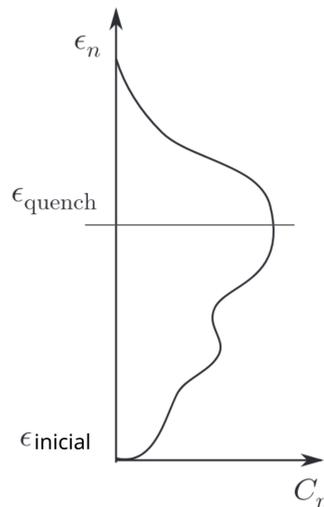


Figura 8 – Após o *quench* o sistema visita estados de alta-energia e não necessariamente relaxa em direção ao estado fundamental. Isso é diferente da minimização da energia vista na termodinâmica, onde o sistema visita regiões próximas ao estado fundamental. Figura adaptada de [67].

O estudo de *quenches*, em princípio, foi especialmente motivado por questões sobre quão lento deve ser o processo experimental para evitar a formação de defeitos ao preparar um dado estado quântico e se isso é possível no limite termodinâmico [68]. Em geral, esses defeitos emergem como domínios de carga ou spin em sistemas eletrônicos. Um modelo teórico chave, baseado no teorema adiabático, para descrever esses processos - em especial no caso de transições dinâmicas que envolvem o cruzamento da criticalidade em direção a uma fase que envolve quebra espontânea de simetria - foi proposto por Kibble e Zurek² [72]. Para transições de fase quânticas - orientadas pela mudança de algum parâmetro interno

² Baseado somente em expoentes críticos, o mecanismo de Kibble-Zurek prevê como a densidade de defeitos escala com a velocidade na qual o *quench* foi realizado. Originalmente esse mecanismo foi

do sistema, como as interações entre as partículas - esse mecanismo tem se mostrado capaz de descrever com precisão o escalonamento dos defeitos quando a transição envolve o cruzamento de um único ponto crítico em alguns modelos [72]. Para sistemas fortemente correlacionados em configurações experimentais realistas, a dinâmica das transições de fase quânticas é mais elusiva e não há indícios de que a complexidade da dinâmica pode ser totalmente capturada pelo emprego de argumentos de escala baseados em expoente críticos [73, 74]. Apesar de alguns resultados promissores, a dinâmica de transições de fase quântica e como capturá-la em termos de argumentos de escala permanecem um amplo problema em aberto.

A dinâmica do *quench* pode ser investigada experimentalmente e teoricamente observando a evolução das quantidades físicas, como observáveis locais, funções de correlação, correntes locais, operadores de mais de uma partícula, ou também quantidades globais como emaranhamento. Os progressos em controlar, sondar e manipular átomos frios em redes óticas representam um importante passo em direção à investigação da dinâmica de não-equilíbrio produzida por *quenches* em sistemas quânticos fortemente correlacionados [74, 75]. Como visto no exemplo de uma implementação em redes óticas da Fig. 7, discutido na seção anterior, o abaixamento abrupto do poço de potencial ótico introduz novas correlações no sistema, que apresentam uma velocidade limite de propagação. Por outro lado, resultados teóricos tem mostrado que a velocidade máxima para propagação das correlações depende da escala de tempo na qual realiza-se o *quench*. Por exemplo, para o caso de um *quench* controlado num tempo finito τ , observou-se uma menor velocidade máxima de propagação das correlações em comparação com a velocidade máxima para o caso de um *quench* abrupto ou $\tau \rightarrow 0$ [30]. Nesse estudo, os autores realizaram o *quench* ligando no tempo a anisotropia magnética $\Delta(t)$ do modelo de Heisenberg XXZ, descrito pelo Hamiltoniano

$$\hat{H}(t) = J_z \sum_{i=1}^L \left[S_i^x S_{i+1}^x + S_i^y S_{i+1}^y + \Delta(t) S_i^z S_{i+1}^z \right], \quad (2.3)$$

onde S_i^a ($a = x, y$ e z) denota os operadores de spin-1/2 no sítio i . Para $|\Delta| < 1$ o espectro de menor energia é descrito pelo regime líquido de Luttinger, enquanto é ferromagnético para $\Delta < 1$ e antiferromagnético para $\Delta > 1$. Considerando inicialmente que o sistema não apresenta anisotropia, $\Delta_0 = 0$, o *quench* consiste em variar linearmente $\Delta(t)$ até um valor finito, $\Delta < 1$, da seguinte forma

$$\Delta(t) = \begin{cases} \Delta \frac{t}{\tau}, & t < \tau, \\ \Delta, & t \geq \tau. \end{cases} \quad (2.4)$$

desenvolvido para transições de fase orientadas pela temperatura, que foram observadas experimentalmente [69–71].

Para a fase líquido de Luttinger no caso de equilíbrio, prevê-se a seguinte velocidade máxima na qual as excitações se propagam pela cadeia [76]

$$\tilde{v} = \frac{\pi J_z \sqrt{1 - \Delta^2}}{2 \arccos \Delta}. \quad (2.5)$$

Como *quenches* em geral não são processos de baixas energias (isto é, a dinâmica de não-equilíbrio pode acessar estados excitados), a velocidade máxima das excitações produzidas por esses protocolos não necessariamente atinge o limite esperado para o caso de equilíbrio no setor de baixas energias da eq. (2.5). A Fig. 9 apresenta os resultados do *quench* da eq. (2.4) para as funções de correlação longitudinais $\langle S_i^z S_{i+l}^z \rangle$ no espaço-tempo. Nos painéis (a) e (b), observa-se um atraso Δx na posição do cone de luz no *quench* de tempo τ (linha contínua) em relação ao *quench* abrupto (linha tracejada). As linhas tracejadas e contínuas são as predições para o resultados teóricos do modelo obtidos via teoria do Líquido de Luttinger, enquanto os resultados do painel de cores são obtidos via DMRG dependente do tempo. No painel (b), para $J_z \tau = 4$ o cone de luz mostra uma torção, que não está presente na linha contínua apresentada para $J_z \tau = 1$ no painel (a). Essa torção surge no momento em que o *quench* termina e o sistema passa a evoluir livremente, mostrando a mudança da velocidade efetiva das excitações após o *quench*. No painel (c) as funções de correlação são avaliadas para sítios distintos separados por uma distância $l = 10$ em diferentes tempos τ para o *quench*. Esse resultado mostra um atraso no máximo local das funções de correlação para os *quenches* de tempo finito em relação ao *quench* abrupto. A origem do atraso está associada ao fato de que *quenches* produzem excitações de quase-partículas que emergem emaranhadas e se propagam com uma velocidade efetiva \tilde{v} pela cadeia. Para *quenches* abruptos, todas as quase-partículas são produzidas em $t = 0$, induzindo correlações entre dois sítios distintos separados por uma distância l no tempo t se $l < 2\tilde{v}t$. Essa propriedade é explicada pelo fato das quase partículas serem emaranhadas [77]. Em contraste, para *quenches* de tempo finito observa-se um atraso Δt adicional, i.e., as correlações aparecem somente se $l < 2\tilde{v}(t - \Delta t)$. Basicamente, durante todo o tempo τ do *quench* são produzidas excitações de quase-partículas que, durante o *quench*, se propagam pela cadeia mais lentamente em comparação a velocidade máxima atingida no pós *quench*.

Apesar das excitações de quase-partículas induzirem correlações adicionais no sistema, a sua propagação pode não caracterizar um cone de luz efetivo. Por exemplo, mapeando via transformação de Jordan-Wigner o modelo de spin-1/2 XXZ numa cadeia de férmions sem spins [6], observou-se que a propagação das quase-partículas após um *quench* abrupto cruzando a criticalidade não segue necessariamente a estrutura de um cone de luz [31]. O modelo usado nesse estudo é descrito pelo Hamiltoniano

$$\hat{H}(V) = -t_h \sum_j (c_{j+1}^\dagger c_j + H.c.) + V \sum_j n_j n_{j+1}, \quad (2.6)$$

em que $t_h = 1$ identifica a amplitude de *hopping* e V a força de interação coulombiana. O operador $c_i^{(\dagger)}$ aniquila (cria) um férmion localizado no sítio i e $n_i = c_i^\dagger c_i$ é o operador de

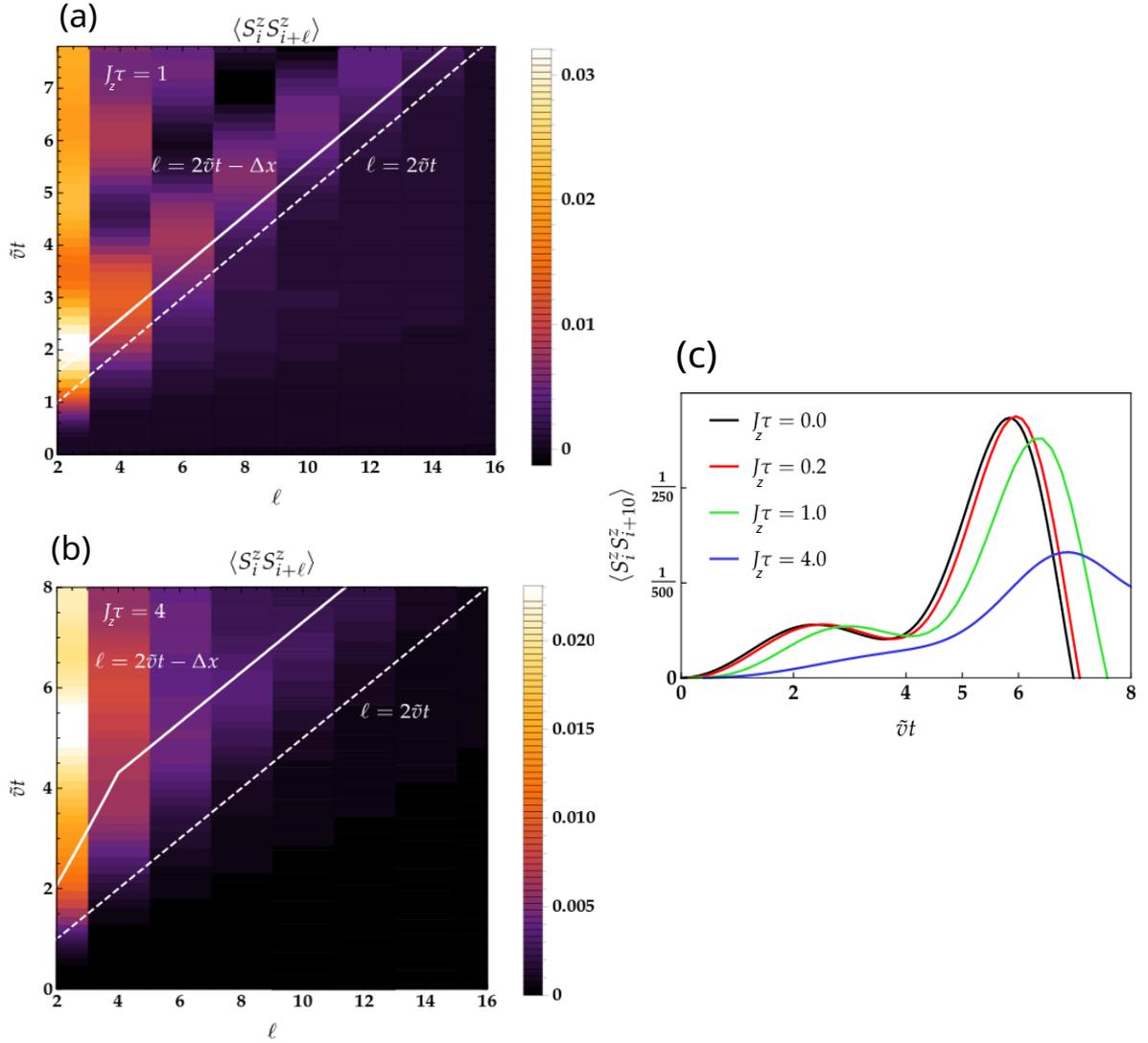


Figura 9 – Funções de correlação no espaço-tempo para o *quench* linear da eq. 2.4, sendo $\Delta = 0.2$ e $J_z \tau = 1$ e 4 nos painéis (a) e (b), respectivamente. Nesses painéis, as linhas contínuas e tracejadas identificam para o mesmo parâmetro Δ a posição do cone de luz para o *quench* de tempo τ e para o *quench* abrupto ($\tau = 0$), respectivamente. A posição do cone de luz corresponde ao máximo local das funções de correlações, observado detalhadamente no painel (c), onde a função de correlação é avaliada entre dois sítios distintos separados por uma distância $l = 10$, considerando $\Delta = 0.2$ e vários tempos τ para o *quench*. Figura retirada de [30].

densidade local do sítio i . O diagrama de fases para o estado fundamental pode ser obtido via ansatz de Bethe [6] e mostra, no caso de semi-preenchimento e interação repulsiva $V \geq 0$, que o sistema apresenta uma transição de fase contínua em $V_c = 2$, indo de um regime metálico ($V < V_c$) para um regime com ordenamento CDW ($V > V_c$). Nesse modelo investigou-se o caso de *quenches* que envolvem quebra espontânea de simetria, ou seja, *quenches* que cruzam V_c . A Fig. 10 apresenta a evolução das funções de correlação de

densidade de carga

$$C_{i,j}(t) = \langle n_i(t) n_j(t) \rangle - \langle n_i(t) \rangle \langle n_j(t) \rangle, \quad (2.7)$$

sendo $\langle n_i(t) \rangle$ o valor esperado da densidade local de carga no instante t , após um *quench* abrupto de um estado inicial metálico $V_0 = 0.5$ [estado fundamental de $\hat{H}(V_0)$] para o regime CDW com $V_f = 40$. O painel (a) mostra o resultado da função de correlação (na

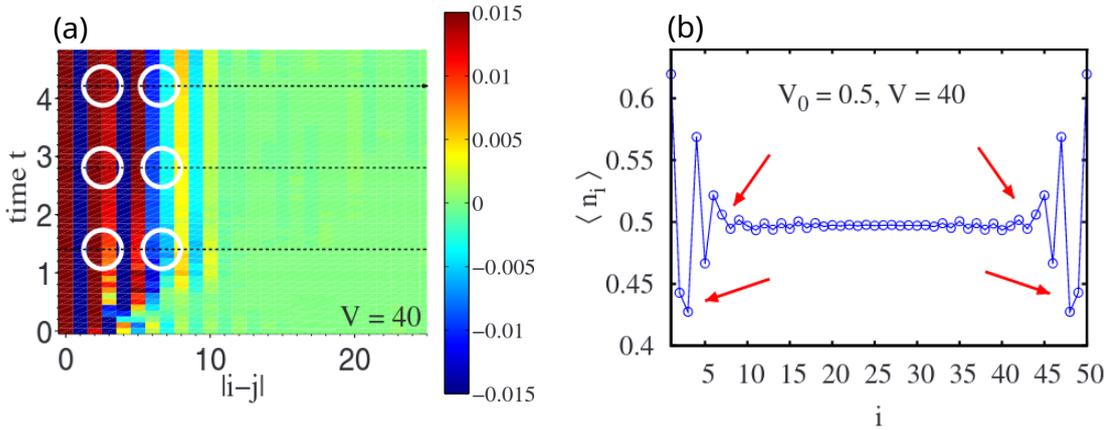


Figura 10 – Resultados para o *quench* de $H(V_0 = 0.5)$ para $H(V = 40)$, para o Hamiltoniano dado na eq. 2.6. A evolução temporal das funções de correlação é apresentada no painel (a), enquanto no painel (b) é apresentada a distribuição das densidades locais em $t = 5/t_h$. Os círculos em branco no painel (a) identificam a posição das *phase slips*, que identificam a posição das paredes de domínio, discutidas no texto. As setas em vermelho em (b) apontam para a localização das paredes de domínio que separam modulações diferentes do regime CDW. Figura retirada de [31].

barra de cores) em função da distância $|i - j|$ entre os sítios no tempo. Nesse painel não é possível identificar a assinatura de um cone de luz, visto que $C_{i,j}(t)$, após o *quench*, não muda significativamente para tempos $t \gtrsim 1/t_h = 1$, correspondente à escala de tempo típica do *hopping* fermiônico. Desta forma não é possível caracterizar a formação de um horizonte de eventos relacionado à propagação das quase-partículas produzidas pelo *quench*. Os círculo branco destacados no painel caracterizam a formação de paredes de domínio, que identificam uma mudança no padrão de alternância negativo e positivo de $C_{i,j}(t)$ ao longo de sítios consecutivos da cadeia. Para detalhar a formação desses domínios, o painel (b) apresenta a distribuição local $\langle n_i \rangle(t)$ em $t = 5$. Observa-se que, após o *quench*, há a formação de paredes de domínios que separam modulações distintas na distribuição local do regime CDW. Essas paredes de domínios são estáveis no tempo e se formam próximo à extremidade da cadeia, como mostrado pelas setas em vermelho. Quando *quenches* acontecem rápido o suficiente e terminam em fases caracterizadas pela quebra espontânea de simetria é esperada a formação de paredes de domínio, como previsto pelo mecanismo de Kibble-Zurek³ [78].

³ O mecanismo de Kibble-Zurek fornece um cenário intuitivo e calculável para criação de defeitos e os

Nos dois últimos exemplos observamos que *quenches* quânticos são fontes de excitações de quase-partículas, que emergem emaranhadas e se propagam pelo sistema introduzindo novas correlações não presentes nos estados de equilíbrio. Embora nem sempre a propagação dessas excitações siga a estrutura de um cone de luz efetivo, o emaranhamento entre as subpartes do sistema pode ser avaliado. Essa análise pode oferecer *insights* sobre os detalhes da evolução de sistemas quânticos em *quenches*. Por exemplo, observou-se que a evolução do emaranhamento de cadeias puramente magnéticas durante *quenches* controlados no tempo pode ser efetivamente bem descrita por poucos auto-estados da matriz densidade reduzida do sistema⁴ [79]. Especificamente, investigou-se a evolução do emaranhamento no modelo de Ising de campo transverso, descrito por

$$\hat{H}(t) = -\frac{1}{2} \sum [S_i^z S_{i+1}^z + h(t) S_i^x], \quad (2.8)$$

onde

$$h(t) = h_i + \text{sgn}(h_f - h_i) \frac{t}{\tau}, \quad (2.9)$$

sendo τ a escala de tempo característica e $t \in [0, t_f]$, tal que $t_f = |h_f - h_i| \tau$. No limite termodinâmico, o estado fundamental do modelo apresenta as fases paramagnética ($h > 1$) e ferromagnética ($0 \leq h < 1$). Neste estudo os autores investigaram *quenches* que levam o sistema de uma fase paramagnética para uma fase ferromagnética, avaliando ao longo do *quench* a evolução da entropia de emaranhamento, descrita por

$$S(t) = - \sum_n \lambda_n(t) \log_2 \lambda_n(t), \quad (2.10)$$

sendo o conjunto $\{\lambda_n(t)\}$ os autovalores da matriz densidade reduzida do sistema evoluído, formada pelo subsistema que engloba metade dos sítios da cadeia. O painel principal da Fig. 11 apresenta os resultados para a entropia de emaranhamento para diferentes τ ao longo do *quench* da fase paramagnética para ferromagnética. Para contraste, os resultados de $S(t)$ para o estado fundamental de equilíbrio (caso estático) calculado no instante t também é avaliado, descrito pela curva de GS na figura. Para um *quench* abrupto ($\tau = 0.1$), os resultados de $S(t)$ permanecem “congelados” no seu valor inicial. À medida que o valor de τ aumenta, a entropia de emaranhamento cresce além do seu valor inicial, assumindo um comportamento oscilatório ($8 \leq \tau \leq 100$) após cruzar a criticalidade. Para tempos suficientemente longos ($\tau = 500$), o comportamento do estado evoluído converge para

resultantes comprimentos de correlação em um sistema que cruza a uma taxa finita uma transição de fase contínua. Originalmente esse mecanismo foi desenvolvido para transições de fase clássicas, mas também é aplicável a transições de fase quânticas. Esse mecanismo é esperado, por exemplo, após um *quench* que cruza um ponto crítico em direção a uma fase caracterizada pela quebra espontânea de simetria. O tamanho dos domínios e o correspondente comprimento de correlação do sistema após a transição de fase, ocasionada pelo *quench*, podem ser estimado via esse mecanismo [78].

⁴ Dado o estado quântico $|\Psi\rangle$ de um sistema, dividido em duas metades A e B , a matriz densidade reduzida do subsistema formado pela metade A é avaliada da seguinte forma $\hat{\rho}_A = \text{Tr}_B |\Psi\rangle \langle \Psi|$, onde calcula-se o traço eliminando os graus de liberdade de B .

os resultados previstos para o estado fundamental de equilíbrio, configurando o caráter adiabático da evolução. Esse comportamento é esperado para sistemas de dimensão finita de acordo com o teorema adiabático, devido à presença do gap não nulo entre as energias do estado fundamental e do primeiro estado excitado [80]. No painel inserido na figura, são apresentados os resultados para a entropia de emaranhamento truncada $\tilde{S}(t)$, definida considerando somente os quatro primeiros autovalores $\lambda_n(t)$ de maior peso na eq.(2.10). Comparando os resultados do painel principal e do painel inserido, observa-se que poucos auto-estados da matriz densidade reduzida efetivamente governam as características da evolução do sistema durante o *quench*. Esses auto-estados se combinam de tal forma que o emaranhamento da função de onda do sistema aumente para determinadas escalas de tempo que precedem o caso adiabático. O aumento do emaranhamento além do seu valor estático é explicado como uma consequência dos múltiplos cruzamentos dos auto-valores da matriz densidade reduzida ao longo da evolução.

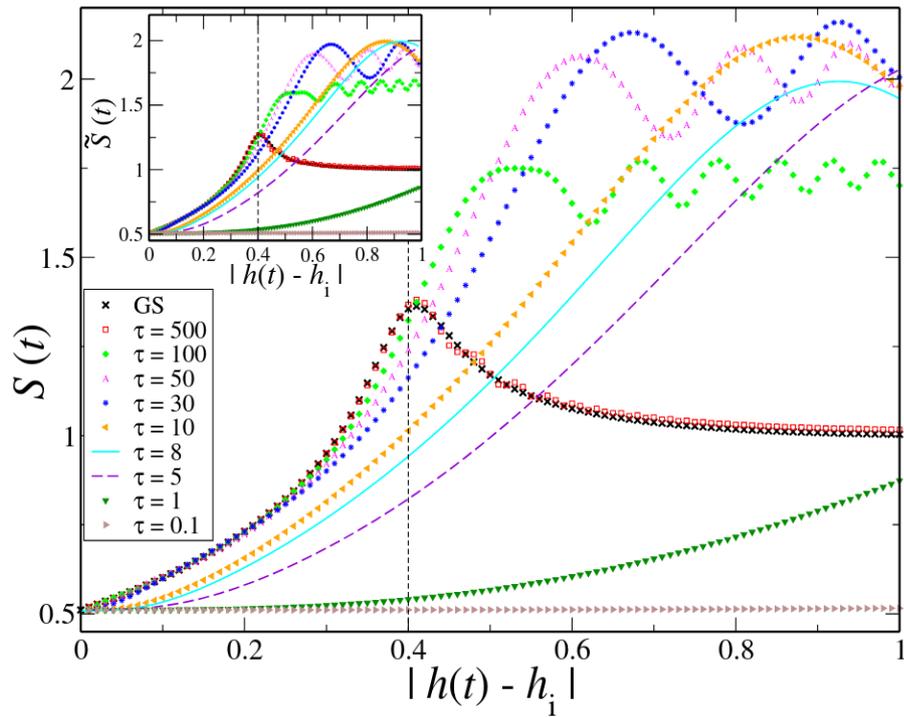


Figura 11 – Dinâmica da entropia de emaranhamento para $h_i = 1.4$ e $h_f = 0.4$. No painel principal estão os resultados de $S(t)$ para diferentes valores de τ (linha tracejada identifica a posição do ponto crítico). No painel inserido está a entropia de emaranhamento truncada $\tilde{S}(t)$ para os mesmos valores de τ do painel principal. Figura retirada de [79].

Os avanços teóricos no estudo da dinâmica de não-equilíbrio do emaranhamento são especialmente importantes para o entendimento da interação entre as subpartes do sistema e a conexão com os resultados experimentais. Recentemente essa análise vem sendo utilizada para explorar os processos de termalização e equilibração de sistemas quânticos

de muitos corpos em redes óticas [43, 44]. Em geral esses processos são investigados através dos observáveis de um subsistema local. Como basicamente o emaranhamento nos orienta sobre o grau de interação entre subsistemas, nos quais são realizadas as medidas experimentais, o estudo dessa quantidade relaciona os processos locais e globais de fenômenos de não-equilíbrio.

2.3 Propriedades do emaranhamento na dinâmica de não-equilíbrio

O estudo da dinâmica de relaxamento de quantidades físicas como, observáveis locais, funções de correlação, operadores de mais de uma partícula, ou também quantidade globais como o emaranhamento entre bipartições do sistema, orientam nosso entendimento dos mecanismos que permeiam a dinâmica de não-equilíbrio de sistemas de muitos corpos. Em especial, para sistemas quânticos fechados, onde a evolução é unitária, genericamente prevê-se que a dinâmica de não-equilíbrio seja transiente, tal que após um tempo suficientemente longo os observáveis equilibrem em valores estacionários. Em princípio isso ocorre para observáveis locais, que envolvem poucos sítios do sistema. A matriz densidade do estado de equilíbrio para tempos suficientemente longos deve ser igual à média no tempo:

$$\bar{\rho} = \lim_{T \rightarrow \infty} \frac{1}{T} \int_0^T e^{-itH} \rho_0 e^{itH} dt, \quad (2.11)$$

sendo ρ_0 a matriz densidade inicial do sistema. Esse estado comporta-se como um estado de entropia máxima,⁵ mantendo todas as constantes de movimento fixas [81]. Para alguns casos é possível mostrar que a distância entre o valor esperado de um observável local no tempo $\langle A(t) \rangle$ e a sua média temporal $\text{tr}(\bar{\rho}A)$, após um tempo de relaxação inicial conhecido, permanece pequena a maior parte do tempo [82]. Embora sistemas quânticos possam relaxar em estados estacionários, o conhecimento das escalas de tempo em que se observa equilibração é ainda um problema aberto em muitos sistemas.

Outro tópico de investigação é comparar o valor esperado de um dado estado de não-equilíbrio com seu análogo térmico. Usamos o termo “termalização” para nos referir ao equilíbrio em direção a um estado que é próximo de ser indistinguível de um estado de equilíbrio térmico proporcional a $e^{-\beta H}$ para o inverso de uma dada temperatura $\beta > 0$. Nesse sentido os valores esperados dos observáveis locais se aproximam dos obtidos via função de partição $\sum_j e^{-\beta E_j}$, sendo $\{E_j\}$ o espectro de energia do sistema. Entre os mecanismos que levam à termalização, a “Hipótese de Termalização de Autoestado” (ETH, sigla do inglês) conjectura que sistemas quânticos complexos (que tendem a um número infinito de graus de liberdade) têm auto-estados que - no contexto do valor esperado dos

⁵ No contexto da mecânica estatística existe um princípio varacional onde a maximização da entropia corresponde a uma energia média mínima. A partir deste momento é dito que o sistema alcançou um estado de equilíbrio termodinâmico. Esse tema será discutido mais adiante no contexto desta tese, embora sem esgotar o tema.

observáveis locais - são praticamente indistinguíveis dos estados térmicos com a mesma energia média. Contudo, uma série de evidências teóricas [83–86], em geral baseadas em métodos numéricos, têm revelado que sistemas quânticos integráveis⁶ [87] não termalizam.⁷

O estudo de problemas relacionados à equilibração e termalização em sistemas quânticos fechados depende fortemente do tipo de *quench* realizado para produzir a dinâmica de não-equilíbrio. Essa dependência está estreitamente relacionada ao comportamento do emaranhamento no sistema. Do ponto de vista da termodinâmica, a energia média de um certo sistema é mínima quando sua entropia é maximizada. Nesse momento é dito que o sistema está em equilíbrio termodinâmico ou termalizou. Nesse sentido, von Neumann propôs o que é comumente denominado “entropia de emaranhamento”: $S = -\text{Tr}(\rho \log(\rho))$, em que ρ é a matriz densidade de um certo sistema. Do ponto de vista quântico, esta equação é interpretada como um equivalente à entropia clássica de Gibbs. Algumas de suas principais propriedades são [88]: $S(\rho) = 0$ somente se o sistema é puro; o máximo valor de entropia é aquele em que todos os níveis de energia possuem a mesma probabilidade; dadas duas matrizes distintas, ρ_A e ρ_B , então $S(\rho_A \otimes \rho_B) \leq S(\rho_A) + S(\rho_B)$ é sempre verdade, sendo que a igualdade ocorre para sistemas não interagentes; $S(\rho) = S(U\rho U^\dagger)$, em que U é uma matriz de transformação unitária. Essa entropia pode ser usada como uma medida de “mistura” entre sistemas. Por exemplo, se dois sistemas, inicialmente puros, passam a interagir, então a entropia de ambos passará de zero para um certo valor finito. Em trabalhos recentes, a entropia de emaranhamento entre as subpartes do sistema vem sendo interpretada para distinguir transições entre estados localizados e delocalizados [22, 89]. A ideia básica é que o fenômeno de localização eletrônico pode ser efetivamente reinterpretado como um desacoplamento dos estados de partícula única que compõem a função de onda do sistema. Isso implica em uma entropia de emaranhamento mínima, ao contrário do fenômeno de delocalização eletrônico, onde os estados de partícula única tendem a ser emaranhados.

Considerando o caso de *quenches* globais e locais, adiante será ilustrado como o emaranhamento cresce em ambos cenários após uma variação abrupta dos parâmetros. Os exemplos apresentados não representam casos gerais, mas são utilizados para contrastar as diferenças entre os comportamentos do emaranhamento - relacionado a propagação das excitações de quase-partículas emaranhadas - produzidos por *quenches* globais e locais. Na perspectiva numérica dos métodos que consideram a truncagem da matriz densidade reduzida, o crescimento do emaranhamento dita o limite de tempo em que as simulações de relaxamento são viáveis. Embora existam algumas demonstrações específicas de como o emaranhamento cresce após um *quench*, realizadas para casos particulares, acredita-se que esse comportamento abranja uma família ampla de problemas⁸ [77, 90]. Em

⁶ São sistemas que apresentam um número suficiente de quantidades locais conservadas.

⁷ As muitas constantes de movimento de sistemas integráveis proíbem a completa termalização para o ensemble canônico.

⁸ Nesses trabalhos são apresentadas provas formais de muitos conceitos relacionados ao comportamento

sistemas unidimensionais, em geral, essa mudança abrupta, introduzida pela perturbação, produz excitações de quase-partículas emaranhadas que se propagam no tempo e no espaço com velocidade típica v . Desta forma, os efeitos produzidos por uma excitação local seriam sentidos por sítios a uma distância d do local perturbado após um tempo $t = d/v$. Esse fenômeno pode ser analisado na perspectiva de um cone de luz efetivo que limita a velocidade de propagação das correlações ao longo da rede. O termo cone de luz foi apropriado da teoria da relatividade, onde defini-se uma região causal pela qual um certo evento pode ser observado. A formação de um cone de luz efetivo foi confirmada numericamente [91] e em experimentos de átomos frios em redes óticas [40] (discutido na seção 2.1).

Em um *quench* global, a perturbação (que pode ser interna - como o termo de interação J_z do modelo de Heisenberg - ou externa - como um campo magnético) afeta instantaneamente todos os sítios da rede. Por exemplo, o resultado da Fig. 12 apresenta a evolução da entropia de emaranhamento após um *quench* global sobre uma cadeia de spins em um campo transversal. Em geral, a entropia de emaranhamento cresce linearmente no

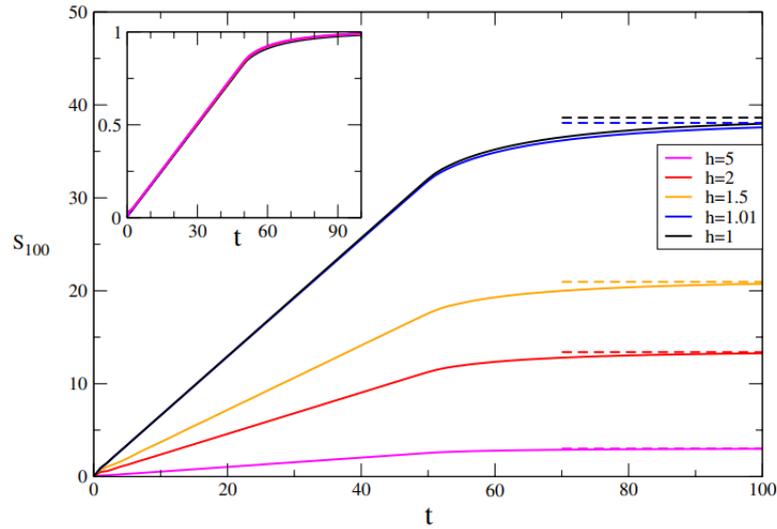


Figura 12 – Gráfico da entropia de emaranhamento após um *quench* global. O modelo definido é $H(h) = -\frac{1}{2} \sum_j \left[\sigma_j^x \sigma_{j+1}^x + h \sigma_j^z \right]$, sendo $\sigma_j^{x,z}$ as matrizes de Pauli agindo sobre o sítio j de uma cadeia infinita. A evolução da entropia de emaranhamento foi calculada para um subsistema com $l = 100$ sítios, $S_{100}(t)$, de um estado inicial $|\psi_0\rangle$, sendo esse o estado fundamental de $H(h = \infty)$ em $t = 0$, após uma mudança abrupta do campo para $h = 5, 2, 1.5, 1.01, 1$. As linhas pontilhadas correspondem aos resultados assintóticos para $t \rightarrow \infty$. O painel inserido no gráfico mostra as curvas renormalizadas de acordo com esses valores assintóticos de $S_{100}(t \rightarrow \infty)$. Figura retirada de [92].

tempo até $t = l/2v$, sendo l o tamanho do subsistema considerado, depois disso satura em

da entropia durante perturbações introduzidas por *quenches*. Aqui, por outro lado, serão usados tais raciocínios para ilustrar qualitativamente esses conceitos.

um valor proporcional a l . Essa saturação em um valor limite pode ser vista para $t \rightarrow \infty$ em subsistemas de tamanho $l = 100$, apresentada pelas linhas tracejadas da Fig. 12. Em termos ilustrativos, pode-se considerar o caso em que cada sítio emite um par de quase-partículas emaranhadas, como apresentado na Fig. 13, supondo que esse par de excitações se propaga ao longo da rede com velocidade v . Desprezando os efeitos de espalhamento, as quase-partículas de um par de excitações produzidas em uma posição arbitrária estarão sempre separadas por uma distância $2vt$. O emaranhamento aumentará sempre que o par de excitações conectar ambas partições, **A** representando o subsistema escolhido e **B** o resto do sistema, da Fig. 13. No limite em que o emaranhamento é proporcional ao número

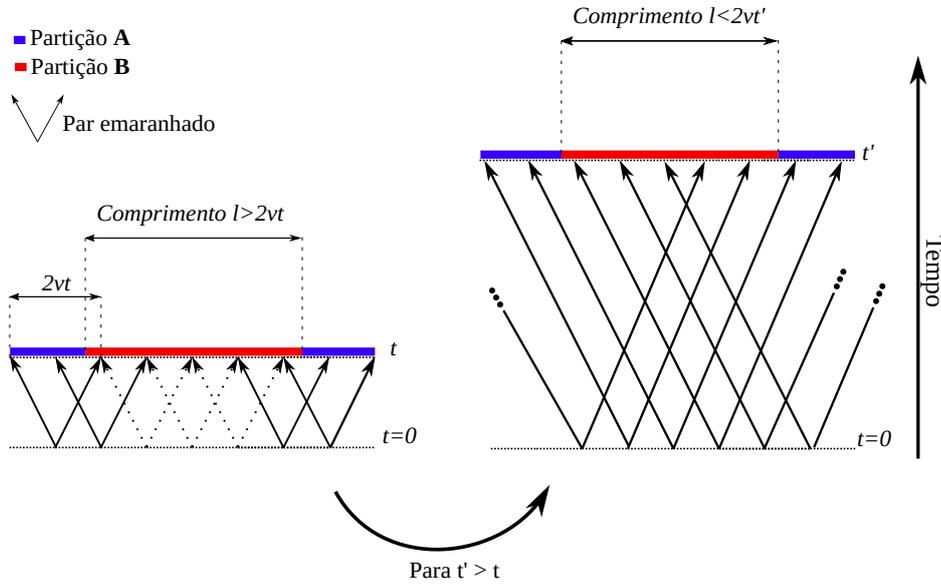


Figura 13 – Ilustração da evolução do emaranhamento, após um *quen*ch global, no espaço-tempo entre duas partições, **A** em vermelho (representando o subsistema predefinido) e **B** em azul (representando o resto do sistema). Em $t = 0$ o sistema é perturbado, dando origem a pares emaranhados de quase-partículas (ver texto) que se movem com velocidade v . Na imagem à esquerda, os pares emaranhados em linhas pontilhadas não contabilizam o aumento da entropia de emaranhamento entre as partições. No entanto, evoluindo o sistema para um tempo maior (imagem à direita), $t' > t$, mais pares emaranhados conectam ambas partições, aumentando a entropia de emaranhamento entre esses subsistemas. Nessa aproximação são ignorados os efeitos de espalhamento e as excitações se movem ao longo de cones de luz. Figura adaptada de [93].

de pares em que uma partícula está dentro e outra fora da partição **A**, a entropia aumenta linearmente com o tempo: $S = S_0 + ct$, sendo c uma constante e S_0 uma entropia presente no sistema antes da perturbação. Esse regime linear pode ser visto até $t \simeq l/2$ no gráfico da Fig. 12.

Para ilustrar o caso de *quen*ches locais, será considerado o cenário em que a perturbação é introduzida no centro de um sistema unidimensional em $t = 0$. Seguindo o raciocínio anterior para a ilustração de um *quen*ch global, uma perturbação local produz

localmente excitações de quase-partículas emaranhadas, que apresentam velocidade v e são separadas por uma distância $2vt$, como apresentado na Fig. 14. Na ilustração consideramos a formação de um único par emaranhado após a perturbação local, no entanto em geral são produzidas excitações localmente que apresentam uma velocidade limite para a propagação. À medida que essas quase-partículas conectam ambas partições, observa-se uma rápida variação do emaranhamento até atingir seu valor máximo. Para um sistema na criticalidade,

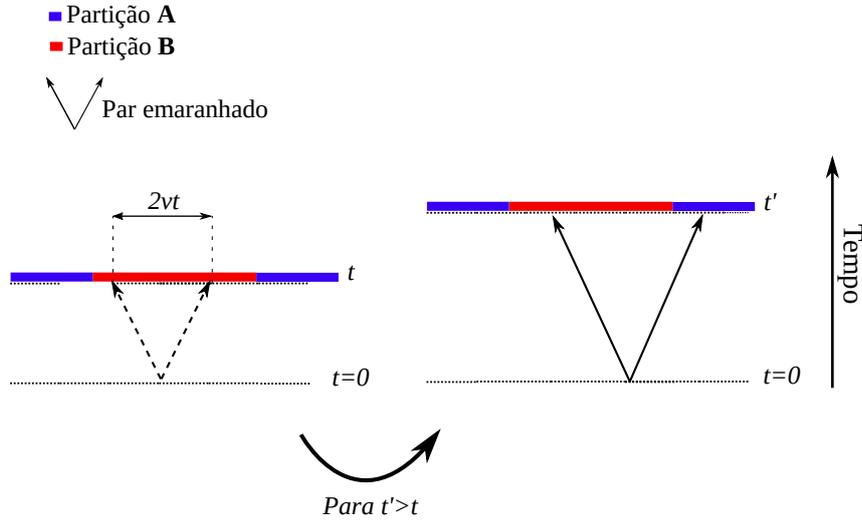


Figura 14 – Ilustração da evolução do emaranhamento, após um *quench* local, no espaço-tempo entre duas partições, **A** em vermelho (representando o subsistema predefinido) e **B** em azul (representando o resto do sistema). Em $t = 0$ o sistema é perturbado, dando origem a par emaranhado de quase-partículas que se movem com velocidade v . Na imagem à esquerda, no instante de tempo t , o par emaranhado, em linhas pontilhadas, produzido em $t = 0$ não conecta ambas partições, portanto não contribui para o emaranhamento. No entanto, em um instante de tempo posterior, $t' > t$, imagem à esquerda, o par emaranhado é contabilizado no emaranhamento, pois conecta ambas partições. Nessa aproximação são ignorados os efeitos de espalhamento e as excitações se movem ao longo de cones de luz. Figura adaptada de [93]

por exemplo, a evolução do emaranhamento em um sistema de férmions sem spin após um *quench* local é apresentada na Fig. 15. Nesse sistema, foi mostrado que o comportamento da entropia de emaranhamento no tempo é proporcional a $S(t) \sim \ln(t)/t$, atingindo um valor máximo proporcional ao tamanho da partição considerada, $S_{\max} \sim \ln(l)$ [90]. Em contraste ao *quench* global do caso anterior, onde a entropia de emaranhamento satura aproximando dos valores assintóticos de $t \rightarrow \infty$, em um *quench* local, depois de S_{\max} segue-se um longo período de relaxamento do emaranhamento em direção ao valor previsto para o sistema não perturbado - neste caso em direção ao valor de emaranhamento para um sistema homogêneo. Isso, no entanto, não implica que o emaranhamento convergirá para tempos longos para esse valor, visto que o estado quântico, preparado em um Hamiltoniano inicial, evolui no tempo sob influência de outro Hamiltoniano.

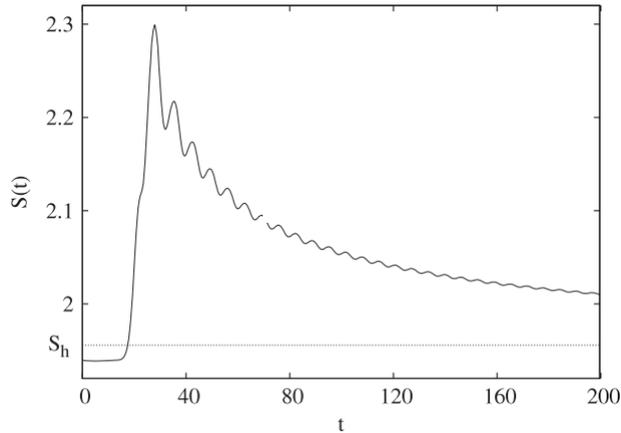


Figura 15 – Evolução temporal da entropia de emaranhamento em um *quench* local. O estado fundamental do sistema é descrito pelo Hamiltoniano não homogêneo $H_0 = -\frac{1}{2} \sum_{-\infty}^{\infty} t_h^n (c_n^\dagger c_{n+1} + c_{n+1}^\dagger c_n)$, considerando o caso semi-preenchido e as amplitudes de *hopping* sendo $t_h^0 = t_h'$ e $t_h^n = 1$ para $n \neq 0$. O *quench* é realizado removendo o defeito no instante de tempo $t = 0$ e o estado fundamental passa a evoluir sob ação de um Hamiltoniano homogêneo $H_0 = -\frac{1}{2} \sum_{-\infty}^{\infty} (c_n^\dagger c_{n+1} + c_{n+1}^\dagger c_n)$. A entropia de emaranhamento foi avaliada considerando um subsistema de tamanho $l = 40$ sítios. Observa-se um salto seguido de um lento relaxamento em direção à S_h - valor para o caso de um sistema homogêneo. Figura adaptada de [90].

Os casos anteriores de *quenches* globais (Fig. 12) e locais (Fig. 15) foram obtidos via teoria conforme de campos. Apesar desses casos não estarem relacionados ao uso dos métodos numéricos apresentados nesta tese, eles servem como exemplos para ilustrar o comportamento da entropia de emaranhamento no tempo. Esse resultados, no entanto, não são gerais e dependem do tipo de *quench* e do modelo considerado, embora similaridades entre os comportamentos possam ser encontradas. Nesses exemplos o emaranhamento foi avaliado em longos períodos de relaxamento após o *quench*, considerando sistemas de dimensão infinita e subsistemas de dimensão relativamente grande, nos quais o emaranhamento foi calculado. Embora esses exemplos estejam relacionados à dinâmica de *quenches* no limite de tempos longos, muitas correlações aparecem em curtos intervalos de tempo e se dissolvem posteriormente, como visto nos exemplos de redes óticas e resultados teóricos apresentados na seção anterior. Desta forma, o período de relaxamento após um *quench* oferece um rico cenário para o estudo dos mecanismos físicos, inerentes aos estados de não-equilíbrio, responsáveis pelas propriedades emergentes em uma dada escala de tempo.

Além de introduzir novas correlações no sistema, a propagação de quase-partículas produzidas pelo *quench* tem implicações sobre a dinâmica do emaranhamento, que estabelece um limite em que as simulações computacionais são realizáveis. Basicamente isso ocorre porque a eficiência das metodologias numéricas atualmente disponíveis diminuem à medida que o emaranhamento cresce. Para sistemas unidimensionais com interações de

curto alcance a lei de área prevê a presença de um limite superior para o crescimento do emaranhamento entre subpartes do sistema, que independe do tamanho do sistema [19]. Contudo, a presença de um limite superior não garante que simulações de tempos longos sejam realizáveis. Como visto anteriormente, a dinâmica do emaranhamento varia segundo o tipo de *quench*, podendo escalar exponencialmente no tempo [94]. Essa é a razão pela qual os métodos de redes tensoriais [95,96] e o grupo de renormalização da matriz densidade [18] podem simular a dinâmica de não-equilíbrio em sistemas unidimensionais de forma eficiente para tempos curtos, enquanto tempos longos são tipicamente inacessíveis.

3 Metodologias

Em materiais sólidos, há propriedades emergentes, como transições de fase, supercondutividade, magnetismo, entre outros, as quais surgem quando as interações entre as partículas não pode ser desprezada. No limite em que as interações são suficientemente pequenas, o mapeamento num sistema auxiliar de partículas independentes oferece uma descrição eficiente dos fenômenos. Fora desse limite, as soluções do problema de muitos corpos interagentes exigem tratamentos teóricos nada fáceis. Nos casos em que as interações não podem ser desprezadas, pode-se recorrer a modelos efetivos que incorporam os graus de liberdade selecionados para descrição de um dado fenômeno de interesse. No contexto de modelos efetivos, o desafio das soluções está ligado ao rastreamento do espectro de energia do sistema. Para alguns fenômenos em temperatura nula, o rastreamento do setor de mais baixa energia é suficiente para descrever as propriedades, reduzindo em princípio a complexidade das soluções. Por outro lado, há fenômenos em que as soluções devem considerar outras faixas ou todo o espectro, tornando as soluções nada triviais.

No contexto das simulações numéricas, o rastreamento de todo espectro de energia consistiria em realizar a diagonalização exata do Hamiltoniano do sistema. No entanto isso é limitado pelo rápido crescimento do espaço de Hilbert à medida em que aumenta-se o tamanho do sistema. Mesmo modelos simples, como cadeias de spin-1/2 de comprimento L , podem esgotar rapidamente a memória utilizada nas simulações computacionais quando L atinge algumas dezenas de sítios, uma vez que a dimensão das matrizes escala com 2^L . Para modelos que incluem a mobilidade eletrônica, a situação torna-se ainda mais complexa, como é o caso do modelo de Hubbard unidimensional, no qual o crescimento exponencial da matriz com relação ao comprimento da cadeia escala com 4^L . De modo geral, na perspectiva de sistemas unidimensionais, a dimensão das matrizes que compõe o espaço de Hilbert escala com d^L , sendo d a dimensão local relacionada ao número configurações possíveis por sítio do modelo considerado. A complexidade do cálculo aumenta à medida que a matriz torna-se menos esparsa. Basicamente isso ocorre ao incluir novos parâmetros de interação no modelo, como anisotropias magnéticas, interações de longo alcance, mobilidade eletrônica, entre outros. Por outro lado, fazer o uso máximo de simetrias pode aumentar a eficiência do cálculo, especialmente se o estudo considera a conservação de números quânticos, como magnetização ao longo de uma componente e número total de partículas. Mesmo com todos esses artifícios, o tamanho da memória computacional para armazenar e manipular os elementos do Hamiltoniano de muitos corpos constitui uma limitação severa.

Em geral as metodologias numéricas utilizam algum tipo de aproximação para solução do problema. No DMRG, essa aproximação pode ser vista nas truncagens seletivas do espaço de Hilbert, que visam minimizar a perda de informação após a truncagem. Essen-

cialmente, o objetivo da truncagem é controlar o crescimento do espaço de Hilbert (até um limite previamente definido) à medida que o tamanho do sistema aumenta iterativamente. Na versão original do método [17], a truncagem ocorre a partir de renormalizações baseadas nos auto-estados da matriz densidade reduzida formada pelas bipartições do sistema. A partir desses auto-estados é possível selecionar uma base de representação conveniente para realizar truncagens que minimizem a perda de informação. Historicamente, essa abordagem pode ser considerada uma evolução do Grupo de Renormalização numérico de Wilson¹ [97], no qual a seleção da base de representação é baseada no espectro de energia.

A composição dessa base de representação conveniente para o truncamento possui uma ligação estreita com a entropia de emaranhamento entre bipartições do sistema, o qual vem sendo utilizado para orientar aplicações de metodologias na descrição de sistemas de muitos corpos [18]. Em termos práticos, o limite no qual o espaço de Hilbert pode ser reduzido para uma representação precisa da função de onda depende da quantidade de emaranhamento entre as bipartições. O crescimento demasiado do emaranhamento à medida que o tamanho do sistema aumenta, pode tornar ineficiente a truncagem, piorando a qualidade da aproximação. Em particular, a lei de área [19] prediz o comportamento do emaranhamento em relação ao tamanho de sistemas descritos por Hamiltonianos com interações de curto alcance no setor de baixas energia fora da criticalidade. Para um sistema no limite termodinâmico, dividido em duas partições A e B - sendo o tamanho de A igual a L^D , onde D é a dimensão espacial e L o comprimento do subsistema - a lei de área prevê que a entropia de emaranhamento $S_{A|B}$ entre bipartições do estado fundamental não é extensiva, mas proporcional a $S_{A|B} \sim L^{D-1}$. Isto implica que $S \sim \text{cte.}$ para sistemas unidimensionais e $S \sim L$ para sistemas bidimensionais. Na criticalidade, outras estruturas emergem, as quais usualmente envolvem a presença ou ausências de correções logarítmicas, como $S_{A|B} \propto \log_2 L$ e $S_{A|B} \propto L \log_2 L$ para sistemas em uma e duas dimensões, respectivamente [98].

A presença de um limite superior para o crescimento do emaranhamento entre as partições de modelos unidimensionais à medida que o tamanho da cadeia aumenta, oferece uma explicação para o sucesso de DMRG nesses sistemas. De modo geral, essa lei prevê que os estados físicos relevantes no setor de baixas energias de sistemas de muitos corpos interagentes se concentram em uma pequena porção do espaço de Hilbert, como no esquema mostrado na Fig. 16. O tamanho dessa porção relevante do espaço de Hilbert está intimamente ligada a quantidade de emaranhamento entre bipartições do sistema. Utilizando DMRG, essa porção pode ser rastreada e reduzida ainda mais, com o objetivo de obter uma representação eficiente de um dado estado quântico. Em geral essa metodologia têm-se mostrado eficiente em sistemas unidimensionais.

¹ Primeira técnica de sucesso baseada em truncagens do espaço de Hilbert. Para descrição da física de baixas energias, as truncagens são baseadas no descarte de estados correspondentes a altas energias, ou seja, somente os graus de liberdade associados a baixas energias são retidos na descrição do sistema.

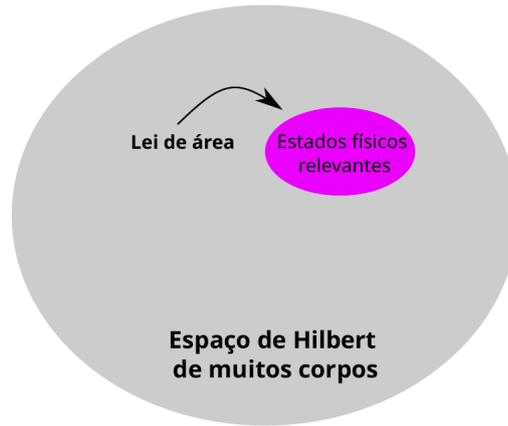


Figura 16 – Representação esquemática da previsão da lei de área para sistemas unidimensionais com interações de curto alcance. Os estados físicos relevantes pode ser condensados em uma pequena porção de todo o espaço de Hilbert.

Nesta tese trabalhamos no limite de temperatura nula, considerando um sistema unidimensional isolado ou desacoplado do banho térmico. Para obter os resultados de equilíbrio, utilizamos DMRG para rastrear o estado fundamental do sistema. Por outro lado, para investigar o cenário de não-equilíbrio produzido pelo *quench*, utilizamos t-DMRG, que apresenta maior complexidade numérica devido a dinâmica acessar estados excitados.

Este capítulo é dividido em quatro seções: na seção 3.1 discutimos as ideias básicas do DMRG em sua versão original; na seção 3.2 introduzimos o formalismo do *ansatz* MPS para decomposição de estados quânticos em um produto de matrizes; nas seções 3.3 e 3.4 mostramos o formalismo DMRG e t-DMRG na linguagem de produto de matrizes, respectivamente.

3.1 Grupo de renormalização da matriz densidade

No contexto dos métodos numéricos para tratar sistemas unidimensionais interagentes, surge o DMRG [17, 18], que pode ser considerado uma técnica numérica variacional com maior aplicabilidade em sistemas unidimensionais, justificada pelas previsões da lei de área [19]. A ideia básica do método consiste em crescer o tamanho do sistema controlando o crescimento do espaço de Hilbert - até limite pré-definido - por meio de truncagens seletivas que minimizem a perda de informação. Numa visão geral, a eficiência desse processo baseia-se em rastrear uma base de representação para a função de onda que concentre os pesos de probabilidade em poucos elementos da base, tal que após a truncagem o mínimo de informação seja perdido, como mostrado no esquema da Fig. 17. A figura mostra como uma base de representação eficiente (painel à direita) pode concentrar os pesos de probabilidade sobre poucos elementos da base, minimizando a informação perdida pela truncagem.

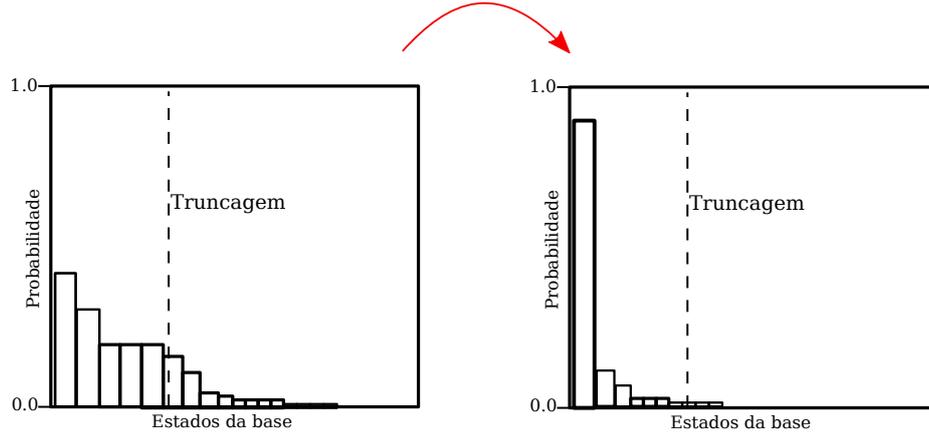


Figura 17 – Ilustração de um esquema de mudança de base na representação da função de onda, visando concentrar os pesos de probabilidade em poucos estados da base, tal que a perda de informação após a truncagem seja mínima. Na base de representação utilizada no painel à esquerda, a truncagem elimina estados da base que carregam uma quantidade considerável de informação, enquanto na base utilizada no painel à direita a perda de informação pela truncagem é minimizada.

Na versão original do DMRG, o rastreamento da base de representação eficiente é baseado nos auto-estados com maiores autovalores da matriz densidade reduzida formada pelas bipartições do sistema. A ideia central é utilizar esses auto-estados para renormalizar o sistema cujo tamanho cresce iterativamente.² Assim o tamanho do sistema cresce sem crescer o espaço de Hilbert.

Do ponto de vista do método no formalismo original, divide-se uma cadeia em duas porções: bloco A e B . O conjunto formado pela união desses blocos é denominado superbloco. O cálculo de DMRG é separado em duas partes, parte infinita e parte finita, como visto na Fig. 18. Na parte infinita, vista no painel à esquerda da figura, um novo sítio é adicionado nos blocos A e B , aumentando assim o tamanho do sistema, que novamente é dividido em novos blocos A e B . Após adicionar o novo sítio nos blocos, uma nova base de representação é rastreada via matriz densidade reduzida dos subsistemas que compõem o novo superbloco. Dado o estado fundamental $|\Psi\rangle$ do superbloco, a matriz densidade reduzida do bloco A (ou B) é avaliada eliminando os graus de liberdade dos sítios do bloco B (ou A):

$$\hat{\rho}_{A(B)} = \text{Tr}_{B(A)} |\Psi\rangle \langle \Psi|. \quad (3.1)$$

Basicamente, os auto-estados com maiores auto-valores são selecionados para renormalizar os novos blocos de acordo com a truncagem predefinida. Assim limita-se o crescimento do espaço de Hilbert enquanto a cadeia cresce. Os auto-valores de $\hat{\rho}_{A(B)}$ são utilizados para

² Nas referências [99,100] são encontradas uma revisão completa do DMRG baseado na matriz densidade.

quantificar o emaranhamento das bipartições da seguinte forma

$$S = -\text{Tr}(\hat{\rho}_{A/B} \log \hat{\rho}_{B/A}) = -\sum \lambda_a \log_2 \lambda_a, \quad (3.2)$$

no qual a eq. (3.2) é conhecida como “entropia de emaranhamento de von Neumann”, sendo λ_a os autovalores da matriz densidade reduzida. Assim vemos que a truncagem visa preservar o emaranhamento entre as bipartições. O processo iterativo de crescimento da cadeia e truncagem do espaço de Hilbert ocorre até que a cadeia atinja o tamanho previamente definido. O ponto inicial do algoritmo finito começa com o processo iterativo da parte infinita até que o sistema tenha o tamanho e dimensão do espaço de Hilbert desejados. Enquanto na parte infinita ambos blocos crescem e são renormalizados, na parte finita (mostrada no painel à direita da figura) um dos blocos cede um sítio para o outro, assim um bloco aumenta em detrimento do outro, tal que o comprimento da cadeia permaneça constante. O processo de renormalização é aplicado somente ao bloco crescido, enquanto o bloco decrescido é representado na base utilizada na parte infinita do DMRG. Portanto é necessário que as representações da parte infinita sejam armazenadas, pois serão reutilizadas nesse passo para representar o bloco decrescido. Novamente repete-se o procedimento de crescimento e renormalização do bloco à esquerda, bem como de decréscimo e reutilização da base no bloco à direita. Esse processo recebe o nome de varredura e termina quando o bloco à direita possuir um sítio. Nesse momento, o bloco à direita passa a crescer e é renormalizado, repetindo o procedimento anterior no sentido contrário, até que o bloco à esquerda contenha um sítio. Um ciclo completo, denominado *sweep*,³ termina quando os dois sítios livres estiverem localizados novamente em suas posições iniciais.

Os processos descritos na Fig. 18 utilizam a matriz densidade reduzida para renormalizar o sistema. Em uma versão mais recente, o DMRG foi reformulado com base no *ansatz* do Estado de Produto de Matrizes (MPS, sigla do inglês), que apresenta alta aplicabilidade computacional [18]. Como o código implementado para o estudo do problema tratado nessa tese é baseado na versão MPS do DMRG, a seguir será discutido os conceitos básicos desse formalismo. Nossa intenção é oferecer os fundamentos básico do formalismo, já que há na literatura referências que tratam o assunto de forma detalhada [18, 95, 101].

³ Nome dado ao processo de seleção inteligente dos estados mais relevantes para representar a função de onda de um dado sistema finito. Esse processo pode ser entendido como um aprimoramento da parte infinita do DMRG, pois otimiza a base de representação do estado alvo para uma truncagem de estados mais precisa

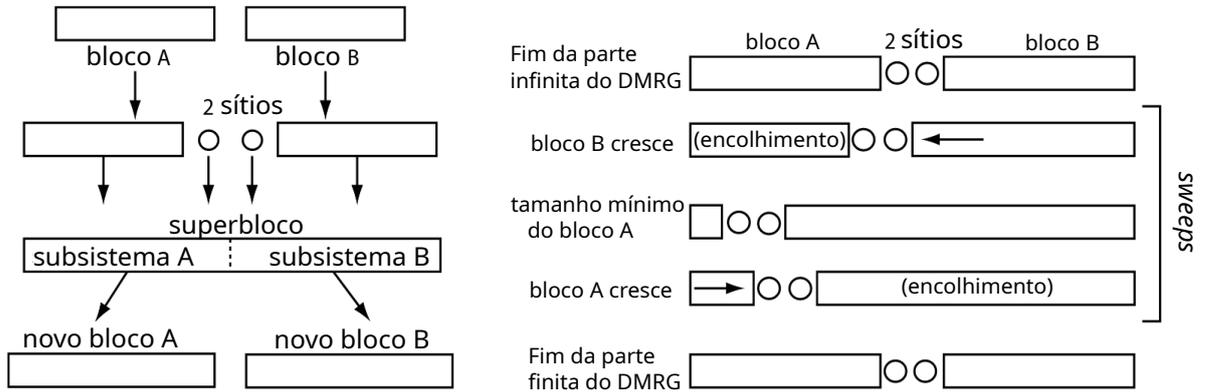


Figura 18 – Representação esquemática do processo iterativo das partes infinita e finita do DMRG, mostradas nos painéis à esquerda e à direita, respectivamente. Figura retirada de [18].

3.2 Estado de produto de matrizes (MPS): formalismo e operações

3.2.1 Decomposição do valor singular e decomposição de Schmidt

A ferramenta algébrica principal utilizada no formalismo MPS é a Decomposição do Valor Singular (SVD, sigla do inglês), da qual deriva uma representação compacta para estados quânticos. Primeiro discutiremos os conceitos básicos dessa decomposição, conectando na sequência a sua relação com a Decomposição de Schmidt (SD, sigla do inglês), que oferece uma base de representação para estados quânticos bi-particionados, a qual é baseada no emaranhamento entre as bipartições do sistema. Essas decomposições fornecem os subsídios teóricos que fundamentam o *ansatz* MPS utilizado para decomposição de estados quânticos em termo de produtos de matrizes.

A SVD garante a decomposição de matrizes M retangulares da seguinte forma

$$M = USV^\dagger, \tag{3.3}$$

ou escrevendo em termos do elemento- ij da matriz M

$$M_{ij} = \sum_{a=1}^r U_{ia} S_{aa} (V^\dagger)_{aj}, \tag{3.4}$$

onde S é a matriz singular diagonal, com entradas positivas não nulas denominadas valores singulares $S_{aa} \equiv s_a$, tipicamente organizados em ordem decrescente $s_1 \geq s_2 \geq \dots \geq s_r > 0$. O número de valores singulares é conhecido como *rank-r* de Schmidt da matriz M . As matrizes U e V^\dagger apresentam colunas e linhas ortonormais, respectivamente, que satisfazem a relação $U^\dagger U = I$ e $V^\dagger V = I$.

Uma aplicação prática do uso da SVD é possibilitar uma aproximação eficiente de uma matriz M de *rank*- r de uma matriz M' de *rank*- r' , sendo $r > r'$. Nessa redução do *rank* são descartados os valores singulares de menor peso, tal que as propriedades da matriz original sejam preservadas ao máximo após a aproximação. A qualidade da aproximação pode ser controlada comparando a diferença entre a norma de Frobenius das matrizes M e M' , definida pra M como $\|M\|_F^2 = \sum_{mn} |M_{mn}|^2$ e de modo análogo para M' .

Além da decomposição e redução do *rank* de matrizes, da SVD deriva uma importante representação compacta para estados quânticos, que conecta-se com a quantidade de emaranhamento entre as bipartições, conhecido como Decomposição de Schmidt (SD, sigla do inglês) [102]. Dado um estado puro formado pelos subsistemas A e B de um sistema quântico, descritos nas bases $\{|i_A\rangle\}$ e $\{|j_B\rangle\}$, respectivamente, a SD permite - via SVD dos coeficientes - a seguinte representação

$$\begin{aligned} |\Psi\rangle &= \sum_{ij} \Omega_{ij} |i_A\rangle |j_B\rangle \\ &= \sum_{ij} \sum_{a=1} U_{ia} s_a (V^\dagger)_{aj} |i_A\rangle |j_B\rangle, \\ &= \sum_{a=1} \left(\sum_i U_{ia} |i_A\rangle \right) s_a \left(\sum_j (V^\dagger)_{aj} |j_B\rangle \right), \end{aligned} \quad (3.5)$$

sendo os coeficientes Ω_{ij} interpretados como entradas de uma matriz Ω - na qual realiza-se a SVD descrita na eq. (3.4) - e s_a os valores singulares da decomposição, denominados coeficientes Schmidt. Na eq. (3.5), a notação do produto tensorial entre $|i_A\rangle \otimes |j_B\rangle$ é subentendida, por isso não mostramos na equação. Substituindo $|a_A\rangle \equiv \sum_i U_{ia} |i_A\rangle$ e $|a_B\rangle \equiv \sum_j (V^\dagger)_{aj} |j_B\rangle$ na eq. (3.5), chegamos na SD de $|\Psi\rangle$, que apresenta a seguinte forma

$$|\Psi\rangle = \sum_{a=1}^r s_a |a_A\rangle |a_B\rangle, \quad (3.6)$$

sendo as bases $\{|a\rangle_A\}$ e $\{|a\rangle_B\}$ ortonormais dos subsistemas A e B . O *rank*- r de Schmidt está intrinsecamente relacionado ao emaranhamento entre as partições A e B do sistema. A entropia de emaranhamento de von Neumann entre as bipartições pode ser obtida através dos valores singulares s_a da seguinte forma

$$S_{A|B}(|\Psi\rangle) = - \sum_{a=1}^r s_a^2 \log_2 s_a^2. \quad (3.7)$$

O caso $r = 1$ implica um estado clássico - não emaranhado - onde $|\Psi\rangle$ pode ser descrito como um estado produto associado aos dois subsistemas, i.e., $|\Psi\rangle_{A|B} = |a_A\rangle |a_B\rangle$. No caso $r > 1$, o estado é emaranhado e $|\Psi\rangle_{A|B} \neq |a_A\rangle |a_B\rangle$. Assim, a SD oferece uma base de representação compacta de $|\Psi\rangle$, a qual é baseada no emaranhamento entre bipartições do sistema. De modo geral, a “compressibilidade” dessa base (capacidade de concentrar os pesos de probabilidade sobre poucos elementos da base, como discutido na Fig. 17) depende

do *rank-r* da SD, que está intrinsecamente relacionado a quantidade de emaranhamento entre as partições.

Da SD extraímos diretamente a matriz densidade reduzida das regiões A e B :

$$\hat{\rho}_A = \text{Tr}_B |\Psi\rangle \langle \Psi| = \sum_{a=1}^r s_a^2 |a_A\rangle \langle a_A| \quad \text{e} \quad \hat{\rho}_B = \text{Tr}_A |\Psi\rangle \langle \Psi| = \sum_{a=1}^r s_a^2 |a_B\rangle \langle a_B|, \quad (3.8)$$

mostrando que os subsistemas compartilham o mesmo espectro (que relaciona-se com o emaranhamento entre as partições), mas apresentam auto-estados diferentes. Assim como na SD de um estado quântico, a forma diagonal da matriz densidade reduzida (vista na eq. (3.8) oferece uma base de representação compacta baseada no emaranhamento entre as bipartições. Essa representação compacta para sistemas quânticos bi-particionados foi utilizada na formulação do DMRG original, onde incorporou-se uma renormalização baseada nos auto-estados de maior autovalor da matriz densidade reduzida, percebendo que isso minimizava a perda de informação pela truncagem. No entanto, a análise do emaranhamento para justificar o porquê e quando o DMRG funciona, entraram em cena muitos anos depois de sua criação. Um importante resultado dessa análise pode ser visto na lei de área [19], que justifica a alta aplicabilidade do DMRG para sistemas unidimensionais no setor de baixas energias. Além disso, é possível inferir que um crescimento demasiado do emaranhamento com o aumento do tamanho do sistema pode piorar a qualidade da truncagem realizada no DMRG, visto que isso está associado a uma menor “compressibilidade” da base de representação.

Para o estado quântico de sistemas de muitos corpos, o qual tipicamente está associado a um vasto espaço de Hilbert, é possível realizar, através da SD, aproximações ao truncar o *rank* da representação. Organizando os coeficientes s_a da eq. (3.6) em ordem decrescente, a truncagem baseia-se em descartar os $r - r'$ valores singulares de menor peso, sendo $r > r'$. Assim como na aproximação de matrizes via SVD, a qualidade da truncagem pode ser controlada comparando a diferença entre a norma de Frobenius do estado original e do estado truncado. Portanto a SD pode ser utilizada também para aproximar um estado quântico

$$|\Psi'\rangle = \sum_{a=1}^{r'} s_a |a_A\rangle |a_B\rangle, \quad (3.9)$$

no qual os coeficientes s_a devem ser reescalados no caso de normalização.

3.2.2 Decomposição de um estado quântico em MPS

O MPS pode ser interpretado como um *ansatz* que possibilita decompor o estado quântico de sistemas de muitos corpos em redes de matrizes multidimensionais compostas por números complexos. Para entender esse formalismo, primeiro vamos considerar o exemplo de um sistema formado por N partículas. Cada partícula pode apresentar d

diferentes estados locais. Por exemplo, seja o modelo de Heisenberg de spin-1/2, onde $d = 2$, descrito pela seguinte função de onda:

$$|\Psi\rangle = \sum_{i_1, i_2 \dots i_N} C_{i_1 i_2 \dots i_N} |i_1 i_2 \dots i_N\rangle \quad (3.10)$$

onde utilizamos a notação $|i_1 i_2 \dots i_N\rangle \equiv |i_1\rangle \otimes |i_2\rangle \dots |i_N\rangle$, descrita em termos das bases locais $\{|i_k\rangle\}$, sendo $k = 1, 2 \dots N$, de cada partícula individual e $C_{i_1 i_2 \dots i_N}$ são d^N números complexos. O ansatz MPS consiste em remodelar d^N coeficientes $C_{i_1 i_2 \dots i_N}$ como entradas de uma matriz Ψ com dimensão $d \times d^{N-1}$, na qual realiza-se iterativamente SVDs. Esse processo iterativo apresenta três principais formas diferentes de ser executado, descritas abaixo.

1. Forma canônica à esquerda para decomposição MPS

O primeiro passo consiste em remodelar os d^N coeficientes $C_{i_1 i_2 \dots i_N}$ em uma matriz Ψ de dimensão $d \times d^{N-1}$, com entradas $\Psi_{i_1, (i_2 \dots i_N)} = C_{i_1 i_2 \dots i_N}$. Aplicando a SVD sobre Ψ temos

$$\begin{aligned} C_{i_1 i_2 \dots i_N} = \Psi_{i_1, (i_2 \dots i_N)} &= U_{i_1, a_1} S_{a_1, a_1} (V^\dagger)_{a_1, (i_2 \dots i_N)} \\ &\equiv L_{a_1}^{i_1} c_{a_1 i_2 \dots i_N} \end{aligned} \quad (3.11)$$

onde contraímos o somatório para índices repetidos. Na eq. (3.11) a matriz U foi decomposta em uma coleção de d vetores linhas com entradas $U_{i_1, a_1} = L_{a_1}^{i_1}$, enquanto as matrizes S e V^\dagger foram contraídas nos coeficientes $c_{a_1 i_2 \dots i_N} = S_{a_1, a_1} (V^\dagger)_{a_1, (i_2 \dots i_N)}$. O próximo passo da decomposição consiste em remodelar $c_{a_1 i_2 \dots i_N}$ em uma matriz $\Psi_{a_1 i_2, (i_3 \dots i_N)}$, assim

$$C_{i_1 i_2 \dots i_N} = L_{a_1}^{i_1} \Psi_{a_1 i_2, (i_3 \dots i_N)}. \quad (3.12)$$

Aplicando uma SVD em $\Psi_{a_1 i_2, (i_3 \dots i_N)}$ a eq. (3.12) assume a forma

$$C_{i_1 i_2 \dots i_N} = L_{a_1}^{i_1} U_{(a_1 i_2), a_2} S_{a_2, a_2} (V^\dagger)_{a_2, (i_3 \dots i_N)} = L_{a_1}^{i_1} L_{a_1, a_2}^{i_2} \Psi_{(a_2 i_3), (i_4 \dots i_N)}, \quad (3.13)$$

onde $L_{a_1, a_2}^{i_2} \equiv U_{(a_1 i_2), a_2}$ representa o conjunto de d matrizes L^{i_2} , enquanto matriz Ψ com entradas $\Psi_{(a_2 i_3), (i_4 \dots i_N)}$ corresponde a multiplicação das matrizes S e V^\dagger . Esse processo é repetido até Ψ seja completamente descrita em termos das matrizes L . Ao final desse processo teremos a seguinte estrutura

$$C_{i_1 i_2 \dots i_N} = L_{a_1}^{i_1} L_{a_1 a_2}^{i_2} \dots L_{a_{N-2} a_{N-1}}^{i_{N-1}} L_{a_{N-1}}^{i_N}.$$

Assim a função de onda da eq. (3.10) pode ser rescrita via ansatz MPS na seguinte forma

$$|\Psi\rangle = \sum_{i_1 i_2 \dots i_N} L_{a_1}^{i_1} L_{a_1 a_2}^{i_2} \dots L_{a_{N-2} a_{N-1}}^{i_{N-1}} L_{a_{N-1}}^{i_N} |i_1 i_2 \dots i_N\rangle.$$

Na representação diagramática, a decomposição de um estado quântico em MPS na forma canônica à esquerda é vista no painel (a) da Fig. 19. Inicialmente, entende-se os d^N coeficientes $C_{i_1 i_2 \dots i_N}$ da função de onda como um objeto tensorial com N índices, relacionados aos graus de liberdade dos sítios i da cadeia, representados pelas linhas com uma extremidade livre, rotuladas por i_1, \dots, i_N . Os índices i são chamados de índices físicos porque estão relacionados aos sítios da cadeia. A decomposição do *ansatz* MPS, remodela as entradas desse tensor numa matriz, na qual é aplicada a SVD (indo dos sítios à esquerda para os sítios à direita). Na figura, a aplicação da SVD introduz uma nova linha cuja às extremidades conectam as partições do tensor. Essa nova linha está associada ao índice de ligação (ocultados na figura), recebendo esse nome por não apresentar extremidades livres, no qual as entradas recebem os elementos diagonais da matriz singular da SVD. Esse processo é repetido até que o estado quântico seja completamente descrito como produto de matrizes multidimensionais, representados pelas bolas pretas da figura, associadas as matrizes L da eq. (3.14).

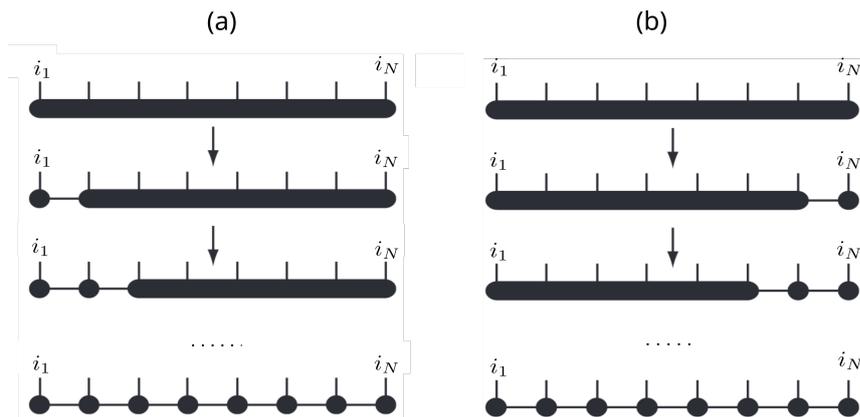


Figura 19 – Representação diagramática do processo iterativo da construção de um MPS de um estado quântico através de aplicações sucessivas da SVDs, em (a) na forma canônica à esquerda e em (b) na forma canônica à direita. Figura adaptada de [17].

2. Forma canônica à direita para decomposição MPS

O processo de decomposição MPS desta forma, ao invés de começar à esquerda

(como no caso anterior), inicia-se à direita. Assim

$$\begin{aligned}
C_{i_1 i_2 \dots i_N} &= \Psi_{(i_1, \dots, i_{N-1}), i_N} \\
&= U_{(i_1 \dots i_{N-1}), a_{N-1}} S_{a_{N-1} a_{N-1}} \left(V^\dagger \right)_{a_{N-1}, i_N} \\
&= \Psi_{(i_1 \dots i_{N-2}), (i_{N-1} a_{N-1})} R_{a_{N-1}}^{i_N} \\
&= U_{(i_1 \dots i_{N-2}), a_{N-2}} S_{a_{N-2}, a_{N-2}} \left(V^\dagger \right)_{a_{N-2}, (i_{N-1} a_{N-1})} R_{a_{N-1}}^{i_N} \\
&= \Psi_{(i_1 \dots i_{N-3}), (i_{N-2} a_{N-2})} R_{a_{N-2}, a_{N-1}}^{i_{N-1}} R_{a_{N-1}}^{i_N} \\
&= R_{a_1}^{i_1} R_{a_1, a_2}^{i_2} \dots R_{a_{N-2}, a_{N-1}}^{i_{N-1}} R_{a_{N-1}}^{i_N},
\end{aligned} \tag{3.14}$$

onde remodelamos $(V^\dagger)_{a_{N-1}, i_N}$ em uma coleção de d vetores colunas $R_{a_{N-1}}^{i_N}$ e $(V^\dagger)_{a_{N-2}, (i_{N-1} a_{N-1})}$ em uma coleção d matrizes $R_{a_{N-2}, a_{N-1}}^{i_{N-1}}$, multiplicando U e S para remodelar a matriz Ψ . Esse processo é repetido até que Ψ seja completamente descrita em termos de R .

Assim reescrevemos a eq. (3.10) como

$$|\Psi\rangle = \sum_{i_1 i_2 \dots i_N} R_{a_1}^{i_1} R_{a_1, a_2}^{i_2} \dots R_{a_{N-2}, a_{N-1}}^{i_{N-1}} R_{a_{N-1}}^{i_N} |i_1 i_2 \dots i_N\rangle. \tag{3.15}$$

Na representação diagramática, a decomposição de um estado quântico em MPS na forma canônica à direita é vista no painel (b) da Fig. 19. Diferente da forma canônica à esquerda, a forma canônica à direita inicia a SVD indo do sítio à direita para o sítio à esquerda. Ao final do processo, temos um estado quântico escrito como um produto de matrizes multidimensionais, representadas pelas bolas pretas na figura, as quais estão associadas as matrizes R da eq. (3.14).

3. Forma canônica mista para decomposição MPS

Além das formas canônicas à esquerda e à direita da construção do MPS de um dado estado quântico, podemos combinar essas decomposições numa representação mista. Aplicando a decomposição à esquerda [eq. (3.11)] até o sítio l , temos

$$C_{i_1 i_2 \dots i_N} = \left(L^{i_1} \dots L^{i_l} \right)_{a_l} S_{a_l, a_l} \left(V^\dagger \right)_{a_l, (i_{l+1} \dots i_N)}. \tag{3.16}$$

O próximo passo consiste em remodelar V^\dagger numa matriz Ψ com entradas $\Psi_{(a_l i_{l+1} \dots i_{N-1}), i_N}$. Essa matriz é utilizada como entrada da decomposição na forma canônica à direita, vista na eq 3.14, tal que $(V^\dagger)_{a_l, (i_{l+1} \dots i_N)} = R_{a_l, a_{l+1}}^{i_{l+1}} \dots R_{a_{N-1}}^{i_N}$. Portanto, a decomposição iniciando à esquerda engloba os l primeiros sítios, enquanto a decomposição à direita é realizada sobre os $N - l$ sítios restantes. Assim podemos reescrever a eq. (3.16) como

$$C_{i_1 i_2 \dots i_N} = L_{a_1}^{i_1} \dots L_{a_{l-2} a_{l-1}}^{i_l} S_{a_l, a_l} R_{a_l, a_{l+1}}^{i_{l+1}} \dots R_{a_{N-2} a_{N-1}}^{i_{N-1}} R_{a_{N-1}}^{i_N}, \tag{3.17}$$

e a função de onda da eq. (3.10) como

$$|\Psi\rangle = L_{a_1}^{i_1} \dots L_{a_{l-2} a_{l-1}}^{i_l} S_{a_l, a_l} R_{a_l, a_{l+1}}^{i_{l+1}} \dots R_{a_{N-2} a_{N-1}}^{i_{N-1}} R_{a_{N-1}}^{i_N} |i_1 i_2 \dots i_N\rangle \tag{3.18}$$

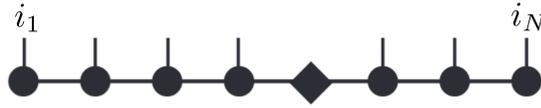


Figura 20 – Representação diagramática da representação MPS realizada por uma sequência de SVD, começando à esquerda e à direita, onde o diamante representa a matriz diagonal composta pelos valores singulares, que separa as duas decomposições. Figura adaptada de [17].

Na versão diagramática, combinamos as decomposições da eq. (3.17) numa representação mista, como vista na Fig. 20. Na figura, o diamante representa a matriz singular S_{a_l, a_l} da eq. (3.17), cujos índices a_l , são associados as linhas que conectam o diamante as bolas pretas. A posição do diamante demarca o “centro de ortogonalidade”, que separa as decomposições em termos das matrizes L e R . As bolas pretas à esquerda do diamante são normalizadas⁴ pela esquerda, enquanto à direita são normalizadas pela direita.

Uma importante propriedade dessa decomposição mista é a derivação direta da SD entre as bipartições englobadas pelas decomposições à esquerda e à direita. Para demonstrar isso, primeiro consideramos

$$|a_l\rangle_L = \sum_{i_1 \dots i_l} L^{i_1} \dots L^{i_l} |i_1 \dots i_l\rangle \quad (3.19)$$

$$|a_l\rangle_R = \sum_{i_{l+1} \dots i_N} R^{i_{l+1}} \dots R^{i_N} |i_{l+1} \dots i_N\rangle, \quad (3.20)$$

os quais apresentam a propriedade $\delta_{a_l, a'_l} = \langle a'_l | a_l \rangle_{R,L}$ como uma consequência das matrizes U e V da SVD serem ortonormais. Assim $\{|a_l\rangle_L\}$ e $\{|a_l\rangle_R\}$, formam uma base ortonormal. Portando a eq. (3.18) pode ser reescrita compactamente como

$$|\Psi\rangle = \sum_{a_l} s_{a_l} |a_l\rangle_L |a_l\rangle_R, \quad (3.21)$$

onde consideramos $s_{a_l} = S_{a_l, a_l}$.

3.2.3 Decomposição de operadores em produto de matrizes

Assim como é possível fatorar um estado $|\Psi\rangle$ em MPS, um operador \hat{O} pode ser decomposto na forma de um Operador de Produto de Matrizes (MPO, sigla em inglês). Seja um operador arbitrário

$$\begin{aligned} \hat{O} &= C_{(i_1 \dots i_N)(i'_1 \dots i'_N)} |i_1 \dots i_N\rangle \langle i'_1 \dots i'_N|, \\ &= C_{(i_1 i'_1) \dots (i_N i'_N)} |i_1 \dots i_N\rangle \langle i'_1 \dots i'_N|, \end{aligned} \quad (3.22)$$

⁴ Usamos esse termo para referir as decomposição que apresenta a propriedade $\sum_{i_l} L^{i_l \dagger} L^{i_l} = I$ ou $\sum_{i_l} R^{i_l \dagger} R^{i_l} = I$, devido a ortonormalidade das matrizes da SVD.

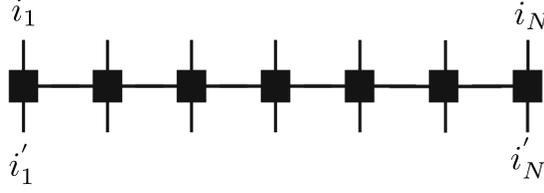


Figura 21 – Representação diagramática de um operador na representação MPO. Figura adaptada de [17].

onde contraímos o somatório para índices repetidos. A decomposição é realizada remodelando os coeficientes $C_{(i_1 i'_1) \dots (i'_N i_N)}$ em uma matriz Ψ , a qual decompõe-se de forma similar ao MPS, mas considerando os índices duplos $i_1 i'_1, \dots, i_N i'_N$ como um único índice na decomposição. Assim a eq. (3.22) pode ser escrita como

$$\hat{O} = W^{i_1, i'_1} \dots W^{i_N, i'_N} |i_1 \dots i_N\rangle \langle i'_1 \dots i'_N|, \quad (3.23)$$

onde $W^{i_1, i'_1} \dots W^{i_N, i'_N}$ é a forma geral das matrizes da decomposição.

Diagramaticamente, o coeficiente da eq. (3.23) é representado na Fig. 21, onde as caixas pretas são associadas aos termos W da eq. (3.23). Diferente de um MPS, um MPO apresenta dois índices físicos (i e i') para cada termo W da decomposição. Esses índices são contraídos nas operações entre um MPO e um MPS.

Aplicando a eq. (3.23) a um MPS, cuja forma geral é descrita por

$$|\Psi\rangle = M^{i_1} M^{i_2} \dots M^{i_N} |i_1 \dots i_N\rangle, \quad (3.24)$$

sendo $M^{i_1} M^{i_2} \dots M^{i_N}$ as matrizes da decomposição, temos

$$\begin{aligned} \hat{O} |\Psi\rangle &= \left(W^{i_1, i'_1} W^{i_2, i'_2} \dots W^{i_N, i'_N} \right) \left(M^{i'_1} M^{i'_2} \dots M^{i'_N} \right) |i_1, \dots, i_N\rangle \\ &= \left(W_{1, b_1}^{i_1, i'_1} W_{b_1, b_2}^{i_2, i'_2} \dots W_{b_{N-1}, 1}^{i_N, i'_N} \right) \left(M_{1, a_1}^{i'_1} M_{a_1, a_2}^{i'_2} \dots M_{a_N, 1}^{i'_N} \right) |i_1, \dots, i_N\rangle. \end{aligned} \quad (3.25)$$

Definido $N_{(b_{k-1}, a_{k-1}), (b_k, a_k)}^{i_k} \equiv W_{b_{k-1}, b_k}^{i_k, i'_k} M_{a_{k-1}, a_k}^{i'_k}$ podemos reescrever a eq. (3.25) na forma compacta

$$\hat{O} |\Psi\rangle = N^{i_1} N^{i_2} \dots N^{i_N} |i_1, \dots, i_N\rangle, \quad (3.26)$$

mostrando que a forma MPS permanece invariante, ao passo que a dimensão das matrizes singulares associadas a $\hat{O} |\Psi\rangle$ é aumentada devido ao produto do MPS original com o MPO.

Para o cálculo de observáveis locais, em especial, as formas canônicas da decomposição em MPS simplificam os cálculos. Por exemplo, seja o valor esperado de dado operador local $\langle \Psi | \hat{O}_l | \Psi \rangle$ atuando sobre um sítio arbitrário com índice l , representado diagramaticamente na Fig. 22. No painel (a), o MPS é decomposto na forma mista, tal

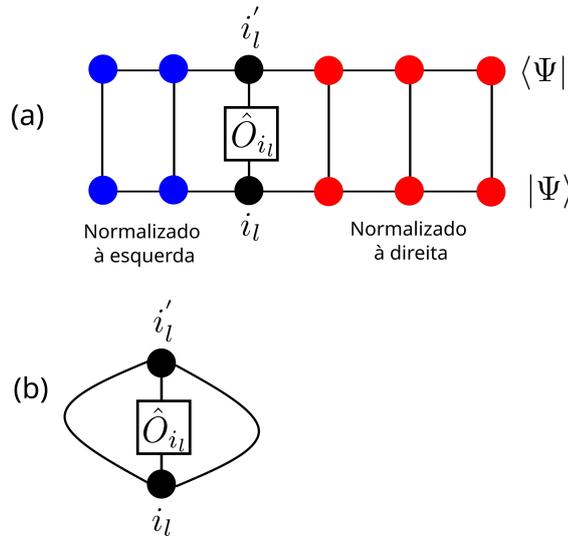


Figura 22 – Representação diagramática do valor esperado de um operador local \hat{O}_l na representação MPO. Os sites em cor preta representam o centro de ortogonalidade da decomposição mista, onde usamos as regras de contração em (a) para chegar na representação simplificada em (b).

que aproveite-se as propriedades de ortogonalidade da decomposição para contrair os índices físicos. No painel (b) utilizamos a propriedade $\delta_{a_l, a'_l} = \langle a'_l | a_l \rangle_{R,L}$ para matrizes normalizadas à esquerda ou a direita, que diagramaticamente é representada na Fig. 23. Isso mostra que uma decomposição conveniente do estado quântico em MPS pode simplificar os cálculos de observáveis do sistema.

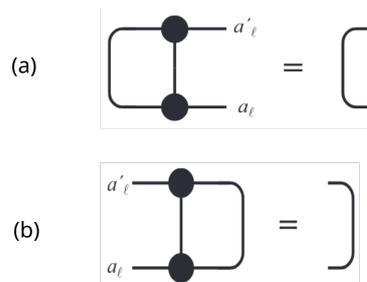


Figura 23 – Contração entre duas matrizes normalizadas à esquerda (a) e à direita (b). A contração produz $\delta_{a'_l, a_l}$, representado por uma linha. Figura adaptada de [17].

3.3 DMRG no formalismo MPS

3.3.1 DMRG para sistemas finitos

Para o cálculo do estado fundamental de um dado Hamiltoniano \hat{H} de um sistema finito, o DMRG rastreia $|\Psi\rangle$ que minimiza

$$E_0 = \frac{\langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle}, \quad (3.27)$$

ou - na linguagem dos multiplicadores λ de Lagrange - extremiza

$$\langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle - \lambda \langle \Psi | \Psi \rangle. \quad (3.28)$$

onde consideramos $|\Psi\rangle$ e \hat{H} escritos na linguagem de produto de matrizes, como nas equações (3.24) e (3.23), respectivamente. A eq. (3.28) envolve um elevado número de variáveis (associados aos elementos das matrizes M e W das equações (3.24) e (3.23) que aparecem na forma de produtos, tornando o problema altamente complexo do ponto de vista numérico. O cálculo DMRG-MPS contorna esse problema rastreando iterativamente as soluções para uma dada matriz $M_{a_{l-1}, a_l}^{i_l}$ associada ao sítio i_l , enquanto as demais matrizes são mantidas constantes. Esse processo é repetido para todos sítios, tal que ao final da iteração a energia do sistema seja minimizada.

Para mostrar como o cálculo DMRG realiza as interações, vamos reescrever o segundo termo da eq. (3.28) explicitando a matriz M^{i_l}

$$\langle \Psi | \Psi \rangle = \psi_{a_{l-1}, a'_{l-1}}^A M_{a_{l-1}, a_l}^{i_l*} M_{a_{l-1}, a'_l}^{i_l} \psi_{a_l, a'_l}^B, \quad (3.29)$$

onde

$$\psi_{a_{l-1}, a'_{l-1}}^A = \left(M^{i_{l-1}\dagger} \dots M^{i_1\dagger} M^{i_1} \dots M^{i_{l-1}} \right)_{a_{l-1}, a'_{l-1}} \quad (3.30)$$

$$\psi_{a_l, a'_l}^B = \left(M^{i_{l+1}} \dots M^{i_N} M^{i_N\dagger} \dots M^{i_{l+1}\dagger} \right)_{a'_l, a_l}. \quad (3.31)$$

Considerando a forma canônica mista para decompor $|\Psi\rangle$ - onde decompõe-se à esquerda do sítio 1 ao $l-1$ e à direita do sítio $l+1$ ao N - e utilizando as condições de normalização $\psi_{a_{l-1}, a'_{l-1}}^A = \delta_{a_{l-1}, a'_{l-1}}^A$ e $\psi_{a_l, a'_l}^B = \delta_{a_l, a'_l}^B$ para simplificar a eq. (3.29), temos

$$\langle \Psi | \Psi \rangle = M_{a_{l-1}, a_l}^{i_l*} M_{a_{l-1}, a'_l}^{i_l}. \quad (3.32)$$

Portando, o extremo da eq. (3.28) com respeito a $M_{a_{l-1}, a_l}^{i_l*}$ é descrito por

$$L_{b_{l-1}}^{a_{l-1}, a'_{l-1}} W_{b_{l-1}, b_l}^{i_l, i'_l} R_{b_l}^{a_l, a'_l} M_{a'_{l-1}, a'_l}^{i'_l} - \lambda M_{a_{l-1}, a_l}^{i_l} = 0, \quad (3.33)$$

onde $L_{b_{l-1}}^{a_{l-1}, a'_{l-1}}$ e $R_{b_l}^{a_l, a'_l}$ condensam as contrações dos índices posicionados ao lado esquerdo e ao lado direito do sítio l , respectivamente, enquanto $W_{b_{l-1}, b_l}^{i_l, i'_l}$ está associada a representação

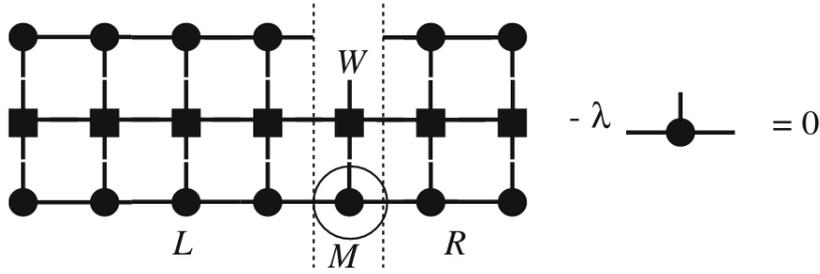


Figura 24 – Representação diagramática do problema do autovalor para otimização da matriz M_{a_{l-1}, a_l}^i (circulada no diagrama) no processo de rastreamento do estado de menor energia. Os índices L e R são utilizados para identificar os sítios normalizados à esquerda e à direita na eq. (3.33), respectivamente. Figura retirada de [17].

matricial da decomposição de \hat{H} no sítio l . Diagramaticamente, a eq. (3.33) é representada na Fig. 24. Remodelando as entradas $H_{(i_l a_{l-1} a_l), (i'_l a'_{l-1} a'_l)} = L_{b_{l-1}}^{a_{l-1}, a'_{l-1}} W_{b_{l-1}, b_l}^{i_l, i'_l} R_{b_l}^{a_l, a'_l}$ para escrever o operador \hat{H} do sítio l e considerando um vetor v com entradas $v_{i_l a_{l-1} a_l} = M_{a_{l-1}, a_l}^i$, chegamos ao problema de auto-valor

$$\hat{H}v - v\lambda = 0. \quad (3.34)$$

Resolvendo a eq. (3.34) para encontrar o menor autovalor λ_0 , obtém-se $v_{i_l a_{l-1} a_l}$, o qual é remodelado em M_{a_{l-1}, a_l}^i - sendo λ_0 a estimativa de energia do estado fundamental atual. Em geral, a dimensão da matriz do problema da eq. (3.34) é razoavelmente grande para uma diagonalização exata, mas como o interesse principal são os auto-estados de menor energia, podemos usar métodos iterativos para esse fim. Tipicamente, os métodos utilizados são Lanczos e Jacobi-Davidson [98].

O algoritmo DMRG-MPS consiste em realizar sucessivas aplicações do procedimento da eq. (3.34) ao longo da cadeia, ou seja, realizando uma varredura sobre todos os sítios. Dessa forma, $|\Psi\rangle$ é atualizado a cada iteração, aproximando-se do estado de mais baixa energia. Durante as iterações, as formas canônicas de $|\Psi\rangle$ são selecionadas tal que aproveite-se ao máximo o uso das contrações (relacionadas as propriedade de normalização da decomposição), visando a redução do número de variáveis do problema. Em geral, para atingir a convergência da energia é necessário realizar várias varreduras sobre os sítios, tal que a variância $\langle \Psi | \hat{H}^2 | \Psi \rangle - (\langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle)^2$ seja próxima de zero, dentro de um limite previamente estabelecido. Essas varreduras compartilham a mesma função dos *sweeps* realizados na parte finita do cálculo DMRG tradicional, vista na Fig. 18. A truncagem realizada no DMRG-MPS é baseada na dimensão máxima das matrizes singulares utilizadas na decomposição em MPS, predefinindo um $rank-r_{\max}$ máximo para as matrizes singulares, tal que os r_{\max} maiores valores singulares sejam mantidos. Usualmente utiliza-se o termo *dimensão de ligação máxima* para referenciar a dimensão ou ao $rank$ máximo das matrizes

singulares. Esse termo é utilizado porque as matrizes singulares conectam as matrizes com índices relacionados ao graus de liberdade do sítios i_1, i_2, \dots, i_N .

3.3.2 DMRG para sistemas infinitos

Assim como visto na parte infinita do DMRG tradicional (painel à esquerda da Fig. 18), o procedimento básico do DMRG-MPS para sistemas infinitos consiste em crescer iterativamente a cadeia, controlando o crescimento do espaço de Hilbert. Para descrever como funcionam as iterações desse formalismo, convém primeiro redefinir a notação para os vetores de estado dos sítios $|i_1^A i_2^A \dots i_l^A i_l^B \dots i_1^B i_2^B\rangle$, onde os índices A e B identificam em qual bloco ou porção o sítio está contido (como na Fig. 18).

Iniciando com uma cadeia com dois sítios, a função de onda do estado fundamental pode ser descrita por

$$|\Phi_1\rangle = \sum_{i_1^A i_1^B} \Psi^{i_1^A i_1^B} |i_1^A i_1^B\rangle, \quad (3.35)$$

sendo termo $\Psi^{i_1^A i_1^B}$ associado a matriz $(\Psi^1)_{i_1^A, i_1^B}$ do *ansatz* MPS para os coeficientes relacionados a todas configurações de estado local dos sítios i_1^A e i_1^B . A decomposição em valores singulares da matriz do *ansatz* tem a seguinte forma

$$(\Psi^1)_{i_1^A, i_1^B} = (U_1)_{i_1^A, a_1} S_{a_1, a_1}^{[1]} (V_1^\dagger)_{a_1, i_1^B}. \quad (3.36)$$

A função de onda da eq. (3.35) pode ser reescrita como

$$|\Phi_1\rangle = \sum_{i_1^A i_1^B} A^{[1]i_1^A} S^{[1]} B^{[1]i_1^B} |i_1^A i_1^B\rangle, \quad (3.37)$$

onde $A_{1, a_1}^{[1]i_1^A} \equiv (U_1)_{i_1^A, a_1}$ e $B_{a_1, 1}^{[1]i_1^B} \equiv (V_1^\dagger)_{a_1, i_1^B}$, sendo o A e B normalizados⁵ à esquerda e à direita, respectivamente. Na eq. (3.37) os índices que não estão relacionados aos sítios foram ocultados. O próximo passo consiste em adicionar um novo sítio nos blocos A e B , substituímos a matriz $S^{[1]}$ pela matriz do *ansatz* para os coeficientes dos sítios adicionados. Minimizando a energia com respeito a \hat{H} do sistema crescido, obtemos

$$|\Phi_2\rangle = \sum_{i_1^A i_2^A i_2^B i_1^B} A^{[1]i_1^A} \Psi^{i_2^A i_2^B} B^{[1]i_1^B} |i_1^A i_2^A i_2^B i_1^B\rangle, \quad (3.38)$$

onde $\Psi^{i_2^A i_2^B}$ descreve uma coleção de matrizes redimensionadas de acordo com as dimensões de A e B . Remodelando o conjunto das matrizes Ψ como $(\Psi^{i_2^A i_2^B})_{a_1^A, a_1^B} = (\Psi^2)_{(a_1^A i_2^A), (a_1^B i_2^B)}$, podemos utilizar a SVD para escrever $\Psi^2 = U_2 S^{[2]} V_2^\dagger$. Assim a função de onda da eq. (3.38) é reescrita como

$$|\Phi_2\rangle = \sum_{i_1^A i_2^A i_2^B i_1^B} A^{[1]i_1^A} A^{[2]i_2^A} S^{[2]} B^{[2]i_2^B} B^{[1]i_1^B} |i_1^A i_2^A i_2^B i_1^B\rangle, \quad (3.39)$$

⁵ Significa que foram decomposto na forma canônicas das equações (3.19) e (3.20), que apresentam a propriedade $\delta_{a_l, a'_l} = \langle a'_l | a_l \rangle_{R, L}$

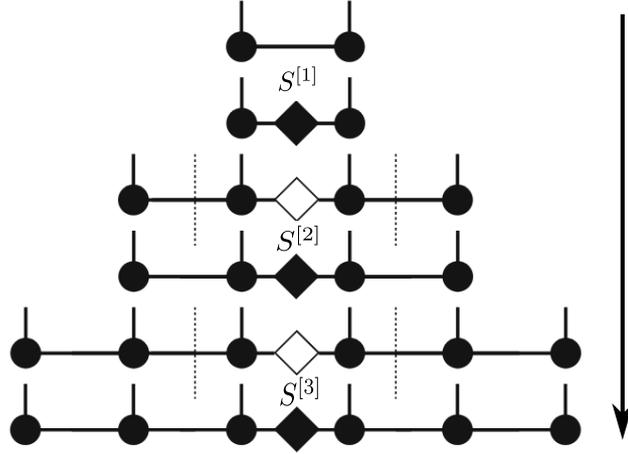


Figura 25 – Representação diagramática do processo de crescimento da cadeia da parte infinita do DMRG. A seta indica a direção do processo. As matrizes S (representadas pelo diamante preto) estão associadas à matriz singular do *ansatz* MPS. A cada passo, dois sítios são adicionados na cadeia, tal que matriz S é substituída pela matriz do *ansatz* (representada pelo diamante branco) para os coeficientes dos sítios adicionados. Uma nova SVD é realizada sobre o sistema crescido, levando a uma nova matriz S . Figura adaptada de [17].

onde $A_{a_1^A, a_2^A}^{[2]i_2^A} \equiv U_{(a_1^A i_2^A), a_2^A}$ e $B_{a_2^B, a_1^B}^{[2]i_2^B} \equiv V_{(a_1^B i_2^B), a_2^B}^\dagger$. Após l iterações, a função de onda é descrita por

$$|\Phi_l\rangle = \sum_{i_1^A \dots i_l^A i_1^B \dots i_l^B} A^{[1]i_1^A} \dots A^{[l]i_l^A} S^{[l]} B^{[l]i_l^B} \dots B^{[1]i_1^B} |i_1^A \dots i_l^A i_1^B \dots i_l^B\rangle. \quad (3.40)$$

Esse processo é repetido até que o sistema atinja o tamanho desejado. Diagramaticamente, esse processo é representado na Fig. 25.

No processo iterativo do DMRG para sistemas finitos configura-se previamente um valor para dimensão máxima das matrizes diagonais da SVD, que é equivalente a configurar a *dimensão de ligação máxima*. A truncagem visa descartar os valores singulares de menor peso, minimizando a perda de informação. Esse processo é equivalente ao descarte dos auto-estados de menor peso da matriz densidade reduzida utilizado nas renormalizações do DMRG tradicional.

3.4 t-DMRG

Na mecânica quântica, a evolução temporal de um sistema consiste basicamente em resolver a equação de Schrödinger dependente do tempo, que possui soluções na forma

$$|\Psi(t)\rangle = \hat{U}(t) |\Psi(t=0)\rangle, \quad (3.41)$$

sendo $\hat{U}(t) = e^{-it\hat{H}}$ o operador de evolução para $\hbar = 1$ e $|\Psi(t=0)\rangle$ um estado fundamental obtido via DMRG. No caso em que $|\Psi(t=0)\rangle$ não é o estado fundamental de \hat{H} , a

dinâmica de $|\Psi(t)\rangle$ pode acessar auto-estados com energia mais alta que a energia do estado fundamental. O t-DMRG surge como uma implementação capaz de descrever essa evolução, enquanto o caso estático (para rastreamento do estado fundamental) é tratado via DMRG. Um ponto crucial para a inclusão da evolução temporal no cálculo DMRG está no método de decimação de blocos em evolução no tempo (TEBD, *time-evolving block decimation method*) [103]. O TEBD é um esquema numérico capaz de identificar dinamicamente a parte relevante do espaço de Hilbert sob evolução no tempo.⁶ Escrito na linguagem de produto de matrizes, esse método é altamente eficiente para estudar Hamiltonianos de sistemas unidimensionais com interações de curto alcance. A principal inovação dessa ideia consiste em usar a decomposição de Suzuki-Trotter (S-T) do operador de evolução temporal, apresentada a seguir.

A decomposição do operador de evolução temporal pode ser entendida de forma mais natural quando considera-se Hamiltonianos somente com interações entre primeiros vizinhos, embora seja possível construir implementações para interações de maior alcance. A ideia básica consiste em evoluir o estado fundamental desses sistemas através de sucessivas aplicações de evolução:

$$|\Psi(t)\rangle = \left(e^{-i\hat{H}\delta t} \dots e^{-i\hat{H}\delta t} \right) |\Psi(0)\rangle, \quad (3.42)$$

em que o Hamiltoniano \hat{H} pode ser decomposto como a soma de termos $\sum \hat{H}_i$, tal que cada um deles descreve somente as interações entre o sítio i e o sítio $i + 1$. Em geral, os termos do Hamiltoniano que identificam as interações em pares não comutam $[\hat{H}_i, \hat{H}_{i+1}] \neq 0$. Esse resultado implica que $e^{-i\hat{H}\delta t} \neq e^{-i\hat{H}_1\delta t} e^{-i\hat{H}_2\delta t} \dots e^{-i\hat{H}_{L-1}\delta t}$.

O esquema da decomposição de S-T inicia-se separando o Hamiltoniano em duas partes $\hat{H} = \hat{H}_A + \hat{H}_B$ (veja a Fig. 26): uma contendo os termos de interação com índice ímpar $\hat{H}_A = \hat{H}_1 + \hat{H}_3 + \hat{H}_5 \dots$ e outra com índice par $\hat{H}_B = \hat{H}_2 + \hat{H}_4 + \hat{H}_6 \dots$. Uma vez que não há conexão entre os termos dentro de \hat{H}_A , é possível verificar a seguinte relação $[\hat{H}_{2i}, \hat{H}_{2(i+1)}] = 0$, em que $i = 1, 2, 3, \dots$. De modo análogo, para \hat{H}_B tem-se que $[\hat{H}_{2i-1}, \hat{H}_{2i+1}] = 0$. Portanto, o operador de evolução para índices ímpares pode ser expandido na forma

$$e^{-i\hat{H}_A\delta t} = e^{-i\hat{H}_1\delta t} e^{-i\hat{H}_3\delta t} \dots, \quad (3.43)$$

e de modo similar para \hat{H}_B .

Em primeira ordem, a expansão de S-T tem a seguinte forma

$$e^{-i(\hat{H}_A + \hat{H}_B)\delta t} = e^{-i\hat{H}_A\delta t} e^{-i\hat{H}_B\delta t} + O(\delta t^2). \quad (3.44)$$

⁶ O fato de o DMRG trabalhar em uma base truncada, que não considera todo espaço de Hilbert, quebra a unitariedade das evoluções temporais. Além disso, a evolução das funções de onda pode “desviar-se” em direção a regiões do espaço de Hilbert que não são consideradas na solução. Nesse sentido, o desafio é adaptar a base à medida que o tempo evolui, de modo que, a cada intervalo de tempo, a função de onda seja otimizada para representar a solução exata da equação de Schrödinger dependente do tempo.

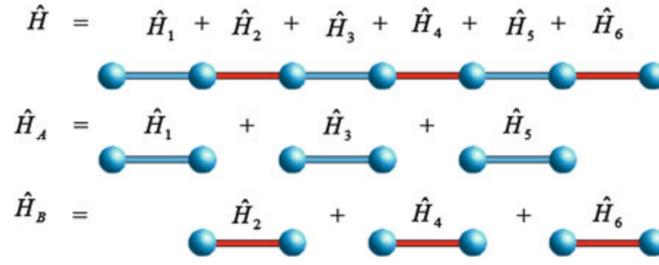


Figura 26 – Esquema da decomposição de Suzuki-Trotter: o Hamiltoniano é separado em duas partes, uma contendo os termos de interação com índice ímpar, \hat{H}_A , e outra contendo os termos com índice par, \hat{H}_B . Figura retirada de [98].

Em segunda ordem, pode ser escrita como

$$e^{-i(\hat{H}_A + \hat{H}_B)\delta t} = e^{-i\hat{H}_A/2\delta t} e^{-i\hat{H}_B\delta t} e^{-i\hat{H}_A/2\delta t} + O(\delta t^3), \quad (3.45)$$

a qual está contida o termo de primeira ordem. Os erros da aproximação são referidos usualmente como “erros de Trotter”.

No t-DMRG escrito na linguagem de produto de matrizes, os termos infinitesimais da evolução, $e^{\hat{H}_i\tau}$ para $i = 1, 2, \dots, L - 1$, são escritos como MPOs para os sítios i e o sítio $i + 1$, os quais são utilizados para evoluir a função de onda $|\Psi(t)\rangle$. O algoritmo funciona realizando as operações de evolução contidas em $e^{\hat{H}_A\tau}$ e $e^{\hat{H}_B\tau}$, varrendo todos os sítios com índices ímpares e pares, respectivamente. Essa estrutura é semelhante ao *sweep* do cálculo DMRG. Após uma varredura completa, o sistema evolui um tempo τ , sendo necessário repetir esse processo até o tempo desejado. Assim, para um tempo total de evolução t é necessário realizar t/τ varreduras. Para cada varredura é necessário ajustar uma truncagem - visto que dimensão das matrizes singulares associadas a $e^{\hat{H}_i\tau} |\Psi(t)\rangle$ é aumentada devido ao produto do MPS com o MPO - monitorando o erro introduzido. Tipicamente, configura-se previamente uma truncagem para o valor mínimo dos valores singulares mantidos, sem que seja necessário ajustar a truncagem a cada varredura. Uma truncagem da ordem de 10^{-8} em muitos casos é suficiente para uma evolução precisa, mas isso depende do tempo total da evolução e do valor de τ . Por exemplo, na expansão em primeira ordem de S-T da eq. (3.44), o erro acumulado após um intervalo $\tau = \delta t$, que corresponde a uma varredura, é da ordem de δt^2 . Portanto o erro total escala com τ^2 , embora outras fontes de erro introduzidas pela truncagem dos valores singulares possam dominar para um τ muito pequeno ou evoluções de tempos longos.

4 Resultados

Neste trabalho investigamos a formação dos ordenamentos SDW e CDW no contexto do modelo de Hubbard estendido unidimensional submetido a *quenches* interagentes. O estado inicial corresponde ao estado fundamental (GS, sigla do inglês) do Hamiltoniano sem interação, sendo posteriormente evoluído sob a ação de um Hamiltoniano interagente. As interações no sítio e/ou entre primeiros vizinhos são ligadas linearmente no tempo, tal que o estado do Hamiltoniano final da evolução corresponda a estados com ordenamentos SDW ou CDW. Em equilíbrio, para interações repulsivas e semi-preenchimento da cadeia, o modelo apresenta uma fase metálica para o caso onde as interações estão desligadas, passando por uma transição metal-isolante ao se ligar as interações. As fases isolantes incluem a CDW, SDW e *bond-order wave* (BOW) - está última criada pela instabilidade gerada pela competição entre os ordenamentos de spin e carga. O diagrama de fase do modelo é apresentado na Fig. 27 - maiores detalhes sobre a natureza das transições e a posição das linhas do diagrama são encontrados na ref. [104]. Tais fases são basicamente

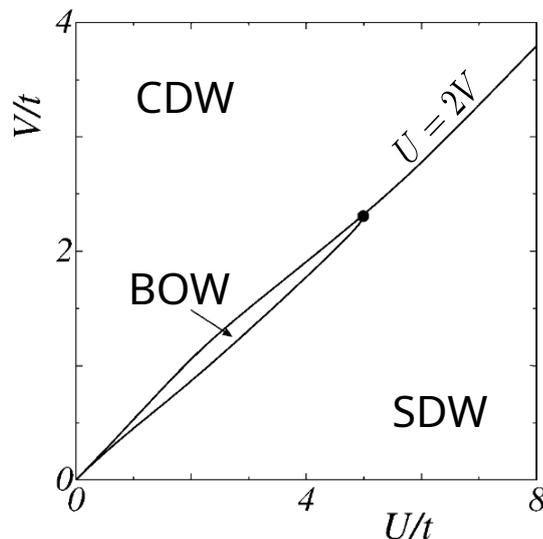


Figura 27 – Diagrama de fases do modelo unidimensional de Hubbard estendido em semi-preenchimento. A fase isolante BOW existe entre as fases SDW e CDW. A bola preta no diagrama demarca a posição do ponto crítico. Figura adaptada de [105].

um produto da competição entre as interações elétron-elétron, no sítio (descrita por U) e entre primeiros vizinhos (descrita por V). Nosso foco está sobre as fases CDW e SDW. A primeira apresenta *gap* nas excitações de carga e spin, surgindo no caso de forte repulsão entre as interações intersítios ($V > 0$, tal que $V \gg U$), onde as cargas tendem a se afastar e a dupla ocupação é favorecida. Isso produz uma periodicidade na densidade de carga

ao longo da cadeia, caracterizada basicamente pela alternância entre sítios duplamente ocupados e sítios vazios. A segunda apresenta *gap* nas excitações de spin, originando quando há forte repulsão entre as interações no sítio ($U > 0$, tal que $U \gg V$), tal que o estado fundamental tende a evitar duplas ocupações, resultando numa periodicidade na densidade de spin que aparece como um estado antiferromagnético. Portanto, no nosso trabalho investigamos a formação dos ordenamento de carga e spin começando no ponto crítico do sistema.

Observamos diferentes regimes de acordo com a escala de tempo característica de ligação das interações no *quench*, indo de uma variação abrupta a adiabática dos parâmetros. Começamos a investigação ligando somente uma das interações no *quench* - termo de interação no sítio ou entre primeiros vizinhos - de acordo com o ordenamento alvo, SDW ou CDW. Para o último, no regime intermediário (que precede o adiabático), observamos um aumento da entropia de emaranhamento além do seu valor inicial, indicando que o estado evoluído no *quench* acessa estados excitados emaranhados durante a dinâmica de não-equilíbrio da formação do ordenamento CDW. Como consequência, para suprimir as excitações produzidas pelo rearranjo de cargas na formação do ordenamento CDW, é necessário uma maior escala para o sistema entrar no regime adiabático - em comparação à escala do rearranjo de spins para formar o ordenamento SDW. Nossos resultados revelam que a escala de tempo, ao invés do tempo total do *quench*, é o fator determinante para observar a formação dos ordenamentos. Para os resultados da dinâmica de não-equilíbrio, não observamos uma mudança significativa entre os comportamentos analisados nos *quenches* em que foram ligados ambos ou um dos termos de interações.

Este capítulo está organizado da seguinte maneira: na seção 4.1 apresentamos o modelo e o protocolo de *quench*; detalhes dos cálculos numéricos também são mencionados. Os resultados são apresentados na seção 4.2. Na seção 4.3 discutimos os resultados obtidos para os *quenches* onde somente uma das interações é ligada, no sítio, U , ou entre primeiros vizinhos, V . Observamos a presença de três regimes distintos: impulso, intermediário e adiabático. Por último, na seção 4.4 analisamos os efeitos de ligar simultaneamente ambas as interações no *quench*. Ao longo do capítulo, apresentamos resultados obtidos para uma cadeia com 17 sítios, a dependência dos resultados principais para cadeias com outros comprimentos é apresentada na seção 4.5.

4.1 Modelo e protocolo de *quench*

Neste estudo investigamos o modelo de Hubbard estendido (EHM, sigla do inglês) dependente do tempo, dado pelo seguinte Hamiltoniano

$$\hat{H}(t) = -J \sum_{j,\sigma} (a_{j,\sigma}^\dagger a_{j+1,\sigma} + H.c.) + U(t) \sum_j \hat{n}_{j\uparrow} \hat{n}_{j\downarrow} + V(t) \sum_j \hat{n}_j \hat{n}_{j+1}, \quad (4.1)$$

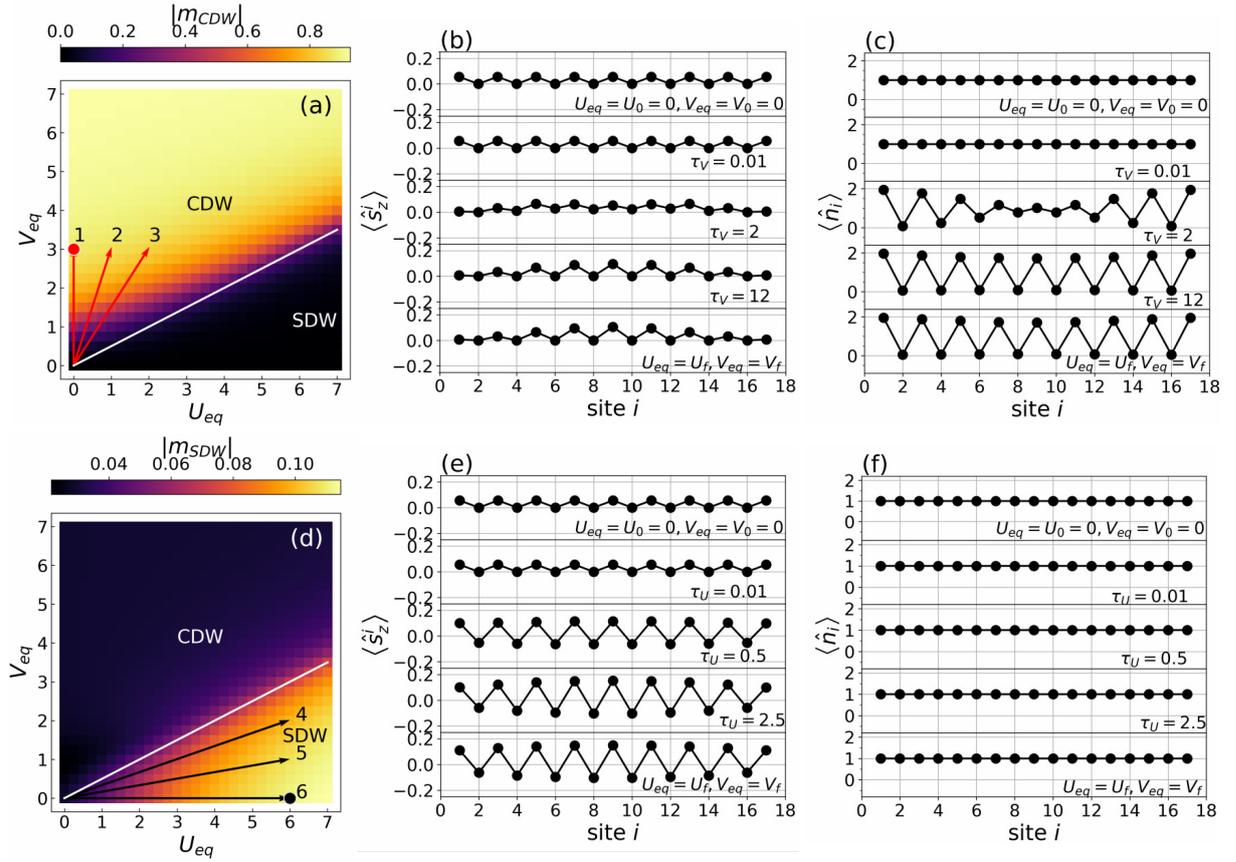


Figura 28 – Valores de equilíbrio - indicados na barra de cores - para os parâmetros de ordem (a) CDW e (d) SDW no plano $V_{eq} \times U_{eq}$. A linha branca corresponde à inclinação $U = 2V$. As setas indicam os diferentes caminhos nos quais os *quenches* foram realizados neste trabalho. O ponto vermelho (preto) identifica o estado final para o *quench* #1 (#6). Para o estado final do *quench* #1, a magnetização local e a densidade de carga como funções do sítio j da cadeia são mostradas nos painéis (b) e (c), respectivamente, enquanto para o estado final do *quench* #6 essas grandezas são mostradas nos painéis (e) e (f). As quantidades locais foram avaliadas para diferentes escalas características (τ_V e τ_U), incluindo os resultados de equilíbrio correspondente ao estado inicial, $U_{eq} = U_0 = 0$ e $V_{eq} = V_0 = 0$, e ao estado final, $U_{eq} = U_f$ e $V_{eq} = V_f$.

em que J descreve a amplitude de *hopping* entre primeiros vizinhos, sendo $U(t)$ e $V(t)$ as interações no sítio e entre primeiros vizinhos, respectivamente, que são dependentes do tempo. Na equação acima, para o sítio j da cadeia, $a_{j,\sigma}^{(\dagger)}$ aniquila (cria) um férmion com spin $\sigma = \uparrow, \downarrow$, $\hat{n}_{j,\sigma} = a_{j,\sigma}^\dagger a_{j,\sigma}$ avalia a densidade de carga para spin σ e $\hat{n}_j = \hat{n}_{j,\uparrow} + \hat{n}_{j,\downarrow}$ é a densidade total.

Estudamos a evolução no tempo do sistema descrito pelo Hamiltoniano da eq. (4.1) durante o *quench* de tempo-finito nas interações. No primeiro caso (seção 4.3) ligamos somente uma das interações, no sítio ou entre primeiros vizinhos; no segundo caso (seção 4.4) ambas interações são ligadas simultaneamente. O interesse principal está sobre a formação de estados com ordenamento de carga e spin partindo de um estado delocalizado, corres-

pondente ao GS do Hamiltoniano sem interações ($U_0 = V_0 = 0$). A estratégia baseia-se em ligar durante um intervalo de tempo finito as interações $U(t)$ ou/e $V(t)$ a partir do estado inicial preparado com interações desligadas, evoluindo-o até os valores finais, U_f e V_f . As interações são ligadas mudando seu valor linearmente no tempo da seguinte forma:

$$U(t) = U_0 + \text{sgn}(U_f - U_0) \frac{t}{\tau_U} \quad (4.2)$$

ou/e

$$V(t) = V_0 + \text{sgn}(V_f - V_0) \frac{t}{\tau_V}, \quad (4.3)$$

em que $t \in [0, t_f]$ e τ_U e τ_V são as escalas de tempo características das alterações nas interações. Ao final do *quench*, no instante t_f , as interações assumem os valores $U(t_f) = U_f$ ou/e $V(t_f) = V_f$. Se somente uma interação é ligada, no final do *quench* temos as seguintes relações: para o ordenamento SDW, $t_f = |U_f - U_0|\tau_U$ e $V_f = V_0 = 0$; para o ordenamento CDW, $t_f = |V_f - V_0|\tau_V$ e $U_f = U_0 = 0$. Quando ambas as interações são simultaneamente ligadas, τ_U e τ_V são conectados da seguinte forma $\tau_V = \tau_U |U_f - U_0| / |V_f - V_0|$.

Ao longo deste trabalho medimos a energia em unidades de J , conseqüentemente o tempo é avaliado em unidades de $1/J$. Configuramos o sistema em condições abertas de contorno, fixando o número de partícula em semi-preenchimento ($N = L$) e conservando a magnetização total na direção- z . Investigamos predominantemente cadeias de tamanho $L = 17$, mas confirmamos os resultados principais para sistemas maiores, como discutido na seção 4.5. O motivo para isso está relacionado ao alto custo computacional das simulações de não-equilíbrio, que aumentam rapidamente com o tamanho da cadeia. Sistemas de comprimento finito apresentam, na criticalidade, *gap* não nulo entre as energias de GS e do primeiro estado excitado. Em transições que não cruzam alguma região de *gap* nulo, o teorema adiabático [80] prevê que um comportamento adiabático pode ser atingido para uma variação suficientemente lenta dos parâmetros do sistema. Nesse sentido esperamos, de acordo com esse teorema, observar um comportamento adiabático, como de fato é verificado em nossos resultados (ver discussão nas seções a seguir).

Para obter a evolução no tempo, como descrito na seção 3.4 do Capítulo 3, usamos cálculos t-DMRG [18, 28] na linguagem do formalismo MPS, baseados na decomposição de Suzuki-Trotter, fixando um erro da ordem $\mathcal{O}(d\tau^2)$, no qual $d\tau$ corresponde ao passo de tempo que define a precisão da evolução. De acordo com a escala de tempo característica (τ_U e τ_V), variamos $d\tau$ no intervalo entre 10^{-3} e 10^{-2} configurando uma truncagem de 10^{-12} para a evolução. Nossa implementação foi construída usando a biblioteca ITensor [48]. Para as quantidades estudadas neste trabalho (valor esperado das densidades e magnetização locais, bem como para quantidades globais como o emaranhamento), não observamos uma mudança significativa ao aumentarmos a *dimensão de ligação máxima* - apenas melhoramos a convergência da energia. Isso indica que nossa escolha de parâmetros do cálculo é suficiente para uma descrição precisa do sistema. Além disso, os resultados

de equilíbrio para o GS instantâneo - considerando os valores constantes $U_{eq} = U(t)$ e $V_{eq} = V(t)$ para cada instante t - foram obtidos via DMRG. Os cálculos do GS foram configurados para convergência da energia da ordem de 10^{-8} . Para isso, realizamos entre 50 a 80 *sweeps*, configuração uma *dimensão de ligação máxima* de ~ 1500 , descartando os valores singulares com peso menor que 10^{-12} . Para os resultados de equilíbrio e não-equilíbrio de cadeias com mais de 17 sítios, reconfiguramos a *dimensão de ligação máxima* para até 3000, descartando os valores singulares com peso inferior a $\sim 10^{-10}$.

Na próxima seção apresentamos os resultados numéricos para a dinâmica do sistema durante o *quench* em direção a diferentes regiões do diagrama de fases. De forma geral, observamos uma diferença significativa em relação à escala de tempo característica mínima para atingir o comportamento adiabático ao final do *quench*, dependendo se há formação dos ordenamento de carga e/ou spin (CDW e/ou SDW). Essa diferença basicamente ocorre como uma consequência da maior ou menor excitação do sistema durante o rearranjo de carga ou spin.

4.2 Caso de equilíbrio

Começaremos a discussão analisando primeiro o diagrama de fases de equilíbrio do EHM de acordo com nossa implementação. Para caracterizar os ordenamentos CDW e SDW, utilizamos os seguintes parâmetros de ordem

$$m_{CDW} = \frac{1}{L} \sum_j (-1)^j (\langle \hat{n}_j \rangle - 1) \quad (4.4)$$

e

$$m_{SDW} = \frac{1}{L} \sum_j (-1)^j \langle \hat{s}_j^z \rangle. \quad (4.5)$$

Como visto nas Figs. 28(a) e (d), para interações repulsivas e semi-preenchimento, o EHM exhibe um ordenamento CDW para $U < 2V$ e um isolante de Mott com ordenamento SDW para $U > 2V$. As diferentes cores correspondem aos valores de $|m_{CDW}|$ [painel (a)] e $|m_{SDW}|$ [painel (d)]. Esses resultados são conhecidos há mais de duas décadas e estão de acordo com trabalhos recentes [104,106], indicando que os resultados da nossa implementação numérica para $L = 17$ são suficientes para estudar a formação dos ordenamentos CDW e SDW, vista no limite termodinâmico. Próximo à região de U e V pequenos, uma instabilidade ocorre em torno da linha $U = 2V$ como uma consequência da competição entre as interações no sítio e entre primeiros vizinhos, dando origem ao isolante BOW [107], o qual não é tratado neste trabalho.

4.3 Ligando U ou V no *quench*

Na seção anterior mostramos que o diagrama de fases do EHM (para o equilíbrio) obtidos para o nosso sistema de $L = 17$ sítios está de acordo com as previsões da literatura para o limite termodinâmico. Isso garante a confiabilidade da nossa implementação numérica para explorar a formação de não-equilíbrio dos ordenamentos de carga e spin no contexto de *quenches* de tempo finito. Para esse objetivo, começaremos primeiro ligando somente uma das interações: no sítio, U , quando o estado final corresponder ao ordenamento SDW; ou entre primeiros vizinhos, V , quando o estado final corresponder ao ordenamento CDW. Em ambos os *quenches* o estado inicial, sobre o qual a evolução é realizada, é preparado com interações desligadas [GS da eq. (4.1) considerando os valores fixos de $U_0 = V_0 = 0$]. A evolução do sistema consiste em ligar linearmente as interações até $U_f = 6, V_f = 0$ [linha vertical #1 da Fig. 28(a)] ou $U_f = 0, V_f = 3$ [linha horizontal #6 do painel (d) da figura citada], que correspondem aos ordenamentos SDW e CDW, respectivamente.

Como discutido em mais detalhes abaixo, identificamos a presença de três regimes ao final do *quench*: impulso, intermediário e adiabático. Basicamente esses regimes são classificados a partir da relação entre o estado evoluído no *quench* e o GS instantâneo. No regime de impulso, o estado evoluído não muda ao longo da evolução, ou seja, fica “congelado” no estado inicial, enquanto no adiabático, o estado evoluído segue o mesmo comportamento do GS instantâneo. No regime intermediário, observa-se uma reação do estado evoluído à mudança dos parâmetros no *quench*, porém essa resposta não é suficiente para caracterizar o comportamento como adiabático. Uma vez que nosso objetivo é caracterizar a formação de não-equilíbrio dos ordenamentos CDW ou SDW, consideramos que o *quench* é adiabático (rigorosamente quase-adiabático) analisando dois critérios. Primeiro, observamos se a fidelidade calculada entre o estado evoluído e o correspondente GS instantâneo [a definição precisa dessa quantidade é apresentada na eq. (4.6)] ao final do *quench* é maior que 0.99. Segundo, analisamos se a diferença entre as quantidades calculadas no estado evoluído e o GS instantâneo é menor que a incerteza do cálculo numérico. Se esses dois critérios são satisfeitos, consideramos o *quench* como adiabático. Nesses casos, sabemos que o sistema não muda ao longo da evolução livre (após o *quench*), pois o estado em t_f corresponde ao auto-estado do Hamiltoniano que rege a dinâmica.

4.3.1 Distribuições de carga e spin ao longo da cadeia

Começaremos a análise dos comportamentos de não-equilíbrio olhando para o valor esperado das densidades locais de spin $\langle \hat{s}_i^z \rangle$ e de carga $\langle \hat{n}_i \rangle$ em função do sítio i da cadeia ao final do *quench* ($t = t_f$). Essas quantidades apresentam comportamentos distintos de acordo com a escala de tempo característica e direção do *quench*, conforme mostrado no meio dos painéis à direita da Fig. 28, para diferentes valores de τ_U e τ_V . Para contrastar,

nas extremidades superior e inferior desses painéis, apresentamos também os perfis das distribuições locais de spin e de carga correspondentes ao GS de $H(t = 0)$ e $H(t = t_f)$.

Identificamos o regime de impulso aos *quenches* com escalas de tempo características muito curtas ($\tau_U = 0.01$ ou $\tau_V = 0.01$) - equivalentes a um *quench* instantâneo ou a uma mudança abrupta dos parâmetros. Nesse caso, o sistema fica “congelado” no seu estado inicial durante a evolução - os observáveis do sistema apresentam os mesmos resultados para os instantes $t = t_f$ e $t = t_0$, como pode ser verificado nas Fig. 28(b), (c), (e) e (f). Em contraste, quando o *quench* é suficientemente lento ($\tau_V = 12.0$ para o *quench* em direção ao ordenamento CDW e $\tau_U = 2.5$ para o SDW), o sistema entra no regime adiabático. Entre esses dois regimes extremos, observamos a presença de um regime intermediário, localizado no meio dos painéis citados anteriormente. Nesse regime, verificamos que a formação do ordenamento CDW se dá das bordas para o centro da cadeia: o centro da cadeia tem uma configuração semelhante à do estado inicial, enquanto as bordas tendem a ter a distribuição do estado final [ver Fig.28(c) para $\tau_V = 2$]. Essa característica é justificada pela repulsão coulombiana dos elétrons, que tendem a ocupar os sítios das bordas, resultando em um rearranjo das cargas na configuração CDW majoritariamente a partir das extremidades da cadeia. Esse processo é marcado por uma alta variação da densidade de carga local, justificada pela mobilidade eletrônica para produzir o ordenamento CDW. No *quench* para o estado SDW, por outro lado, observamos que a magnetização local evolui no tempo para dar origem ao ordenamento SDW sem que haja alteração significativa da densidade de carga local. Esses resultados podem ser verificados comparando os regimes dos painéis (e) e (f) da Fig. 28, respectivamente.

A formação dos ordenamentos CDW e SDW envolve majoritariamente o rearranjo de cargas e spin, respectivamente. Em contraposição, o outro grau de liberdade, spin no caso CDW e carga no caso SDW, apresenta uma pequena - ou nenhuma - diferença entre a configuração inicial e aquela ao final do *quench*, como mostrado nos painéis (b) e (f) da Fig. 28, respectivamente. Uma magnetização residual igual a $1/2$ - espalhada ao longo da cadeia - é encontrada no estado inicial. Isso ocorre como uma consequência de considerarmos uma cadeia semi-preenchida com número ímpar de sítios e conservação da magnetização total ao longo da componente- z do spin.

Até o momento discutimos o comportamento dos observáveis locais do sistema em função dos sítios da cadeia, como visto nos painéis mais à direita da Fig. 28. Nos painéis dos observáveis locais da Fig. 28, consideramos apenas os resultados para t_f , agora mostraremos resultados em função do tempo, durante o *quench*. Para oferecer uma perspectiva mais ampla da dinâmica de não-equilíbrio, a qual reúne os comportamentos dos observáveis locais ao longo de toda cadeia, consideramos a evolução temporal dos parâmetros de ordem que definem os ordenamentos CDW e SDW. Mostramos nas Figs. 29(a) e (b) (ressaltando que estamos focando nos *quenches* para os caminhos #1 e #6 da Fig. 28) os valores dos

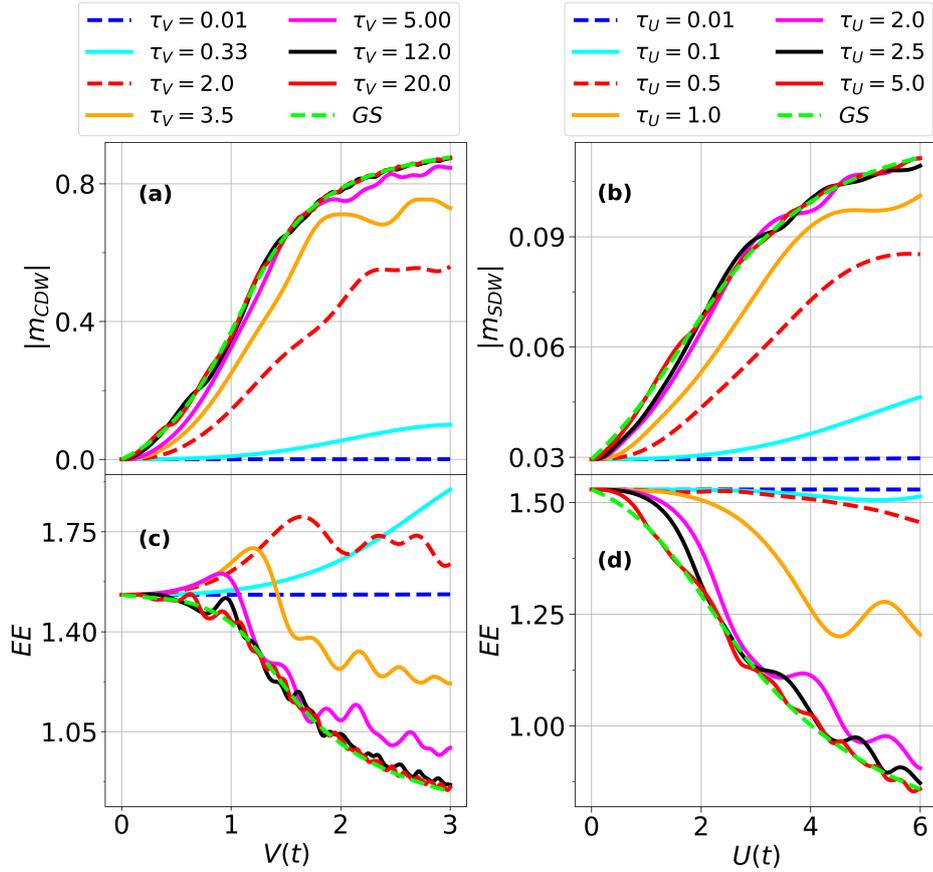


Figura 29 – Parâmetros de ordem (a) CDW e (b) SDW, e entropia de emaranhamento nos painéis (c) e (d) em função das interações $V(t)$ ou $U(t)$, dependendo de se o *quench* é em direção ao ordenamento CDW ou SDW, respectivamente.

parâmetros de ordem em função das interações, $V(t)$ ou $U(t)$, para diferentes escalas de tempo características, τ_V ou τ_U . Nos resultados apresentados, a linha verde tracejada corresponde aos valores dos parâmetros de ordem calculados para o GS do Hamiltoniano de equilíbrio no instante t , descrito pela eq. (4.1) com valores constantes $U_{eq} = U(t)$ ou $V_{eq} = V(t)$.

Em equilíbrio, os parâmetros de ordem m_{CDW} e m_{SDW} aumentam à medida que V ou U aumentam, respectivamente. Os parâmetros apresentam valores máximos distintos: enquanto o primeiro atinge seu valor máximo ($m_{CDW} \approx 1$) para $V_f = 3$, o último satura em ≈ 0.11 para $U_f = 6$, mantendo o valor da saturação para U maiores. Sabemos que, no limite de U suficientemente grande e $V = 0$, o modelo de Hubbard é mapeado em um modelo de Heisenberg com constante de troca de $4J^2/U$ [6, 108]. Para sabermos se nosso sistema com $U = 6$ está próximo desse limite, comparamos na Fig. 30 os resultados para magnetização local ao longo da cadeia de Heisenberg (considerando $U = 6$ na constante de troca $4J^2/U$) com os resultados de equilíbrio do nosso modelo. Como visto na figura citada, a descrição efetiva do EHM por uma cadeia de Heisenberg constitui uma boa aproximação para a dimensão do sistema e valor de interação considerados. A comparação

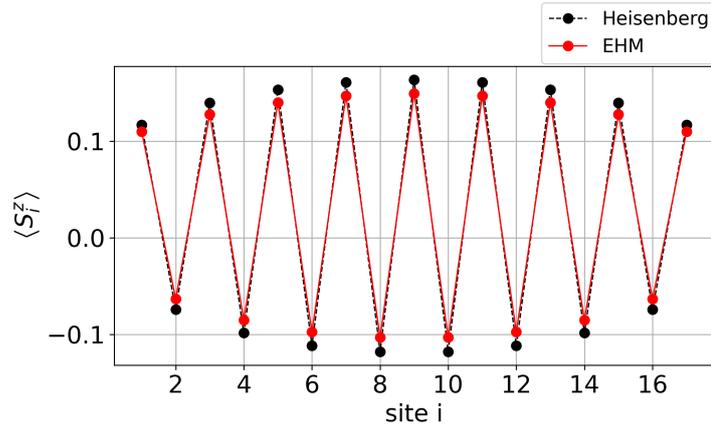


Figura 30 – Comparação entre as magnetizações locais para o GS de equilíbrio do modelo de Heisenberg com constante de troca $4J^2/U$ e do EHM em semi-preenchimento, considerando $U = 6$ e $V = 0$ e ambos os sistemas com comprimento $L = 17$.

poderia melhorar para U maior ou sistemas de maior comprimento; mesmo nesse limite, não observamos um estado de Néel perfeito, já que ele não corresponde a um auto-estado antiferromagnético do modelo de Heisenberg [109]. Por esse motivo, o parâmetro m_{SDW} não atinge seu valor máximo permitido (de 0.5) pela definição da eq. (4.5). O valor do parâmetro de ordem de ~ 0.11 encontrado em nossos cálculos está, portanto, de acordo com o esperado para um ordenamento SDW.

Ao comparar os diferentes resultados da Fig. 29(a), observamos que as curvas m_{CDW} do estado evoluído seguem o mesmo comportamento do GS de equilíbrio a partir de $\tau_V = 12.0$, revelando que esse é o valor mínimo para o sistema entrar no regime adiabático (voltaremos a esse ponto ao discutir os resultados para fidelidade na próxima subseção). Em contraste, no regime de impulso, no caso $\tau_V = 0.01$ - equivalente ao *quench* instantâneo - o sistema “congela” no mesmo valor do estado inicial durante toda a evolução. Entre esses dois extremos, nos *quenches* do regime intermediário ($0.01 < \tau_V < 12.0$), conforme τ_V aumenta, ocorre uma aproximação entre os valores de m_{CDW} correspondente ao estado evoluído e aqueles do GS de equilíbrio. Apesar dessa aproximação, a presença de estados excitados na dinâmica de não-equilíbrio implica comportamentos de m_{CDW} distintos do GS de equilíbrio à medida que as interações aumentam. Mesmo $\tau_V = 5.0$ (linha magenta), por exemplo, apresenta, próximo ao final do *quench*, um pequeno desvio entre os resultados de m_{CDW} obtidos para o estado evoluído e o caso de equilíbrio. No regime intermediário, a presença de oscilações em m_{CDW} à medida que o sistema se aproxima do regime adiabático implica um comportamento não-monotônico do parâmetro de ordem com o ligamento das interações. De modo geral, temos um análise similar para o parâmetro m_{SDW} [Fig. 29(b)], exceto pela menor escala de tempo característica necessária para o sistema entrar no regime adiabático.

A diferença na escala de tempo característica para que o regime adiabático seja

atingido, observada nos dois casos analisados, pode ser parcialmente explicada pelas mudanças necessárias nas configurações de carga e spin iniciais para a formação dos estados finais, como ilustrado na Fig. 28. Para se chegar no estado final CDW, há mudanças tanto no perfil da densidade de local, governadas pela interação V entre primeiros vizinhos, como no de magnetização. Já no caso do estado final SDW, os rearranjos ocorrem predominantemente no perfil de magnetização, cuja escala de energia vai com $4J^2/U$, uma vez que, como argumentamos acima, para os parâmetros utilizados, o EHM pode ser mapeado no modelo de Heisenberg. Essa diferença entre as configurações de spin e carga do estado evoluído e do GS de equilíbrio é associada à uma excitação do sistema durante a evolução [110]. Como consequência, para entrar no regime adiabático, os *quenches* em direção ao ordenamento CDW precisam ser mais lentos em relação ao ordenamento SDW, de tal maneira a evitar que estados excitados durante o rearranjo das cargas.

4.3.2 Fidelidade entre o estado evoluído e o estado de equilíbrio

Para caracterizar de maneira mais precisa os regimes, calculamos a fidelidade $f(t)$ entre o estado evoluído e o correspondente GS de equilíbrio do Hamiltoniano com $U_{eq} = U(t)$ ou $V_{eq} = V(t)$. $f(t)$ é definida da seguinte forma

$$f(t) = |\langle \Psi(t) | \Psi_{GS} \rangle|^2, \quad (4.6)$$

onde $|\Psi(t)\rangle$ corresponde ao estado evoluído e $|\Psi_{GS}\rangle$ ao GS instantâneo. Caracterizamos o regime como adiabático se ao final do *quench* a fidelidade for próxima à unidade (precisamente maior que 0.99, com uma tolerância de 0.01). Isso garante que o sistema irá seguir o comportamento de GS em uma evolução livre ao final do *quench*, uma vez que aproximadamente nenhuma excitação foi criada durante o ligamento das interações. Por outro lado, a presença de excitações no estado evoluído implica em uma evolução livre não-trivial.

Nas Fig. 31(a) e (b) mostramos os resultados para a fidelidade ao longo dos diferentes regimes considerados para os *quenches* em direção aos ordenamentos CDW e SDW, respectivamente. No regime de impulso ($\tau_V = 0.01$ e $\tau_U = 0.01$), que não apresenta a formação dos ordenamentos, a fidelidade decai mais rapidamente para o *quench* em direção ao ordenamento CDW [atingindo praticamente o valor zero em torno de $V(t) = 2$] em comparação ao *quench* em direção ao ordenamento SDW, em que o decaimento é mais lento com ligamento das interações. Essa diferença ocorre porque o estado inicial apresenta uma maior superposição com o GS de equilíbrio ao longo do *quench* em direção ao ordenamento SDW. Isso também pode ser visualizado comparando a semelhança entre as configurações de equilíbrio inicial e final dos ordenamentos: de spin na Fig. 28(e); de carga na Fig. 28(c).

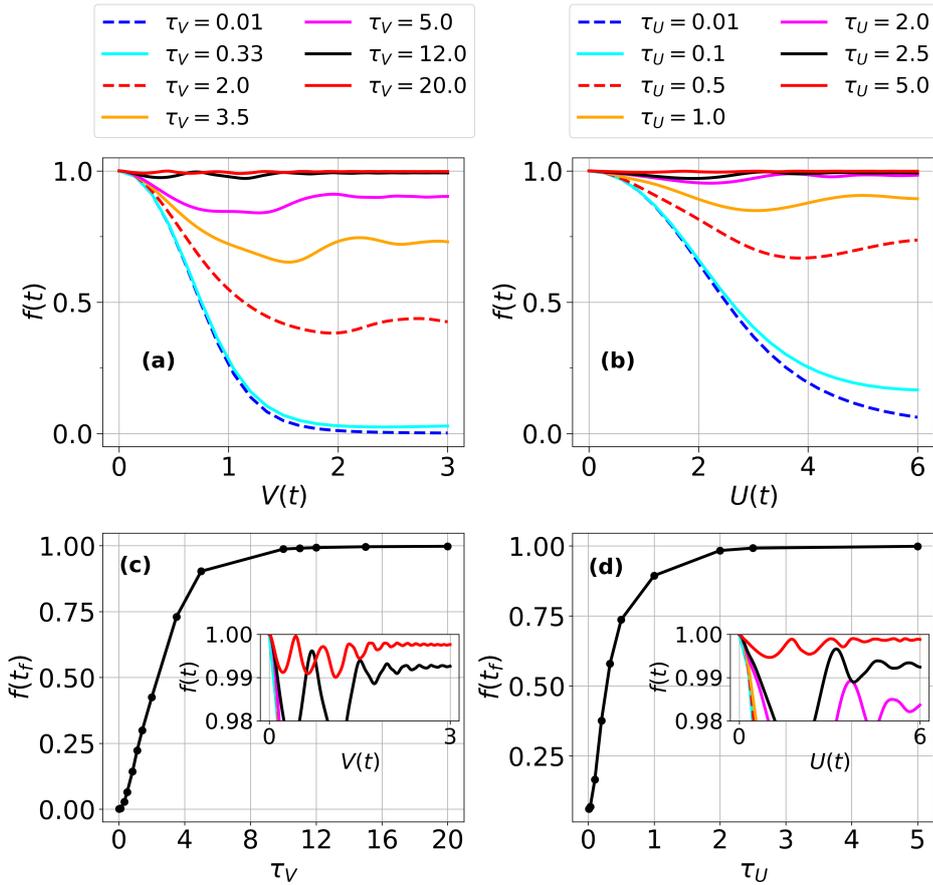


Figura 31 – Fidelidade $f(t)$ em função das interações (a) $V(t)$ e (b) $U(t)$ para os *quenches* em direção aos ordenamentos CDW e SDW, respectivamente. Nos painéis (c) e (d) estão os resultados para a fidelidade ao final do *quench* [$f(t_f)$] em função de τ_V e τ_U , respectivamente. Os painéis inseridos mostram o comportamento de $f(t)$ em função das interações $V(t)$ ou $U(t)$

Para valores τ_U ou τ_V no regime intermediário, inicialmente a fidelidade diminui com o ligamento das interações, adquirindo um comportamento oscilatório antes de estabilizar em valores finitos, indicando que o estado evoluído e o GS de equilíbrio não são ortogonais. Conforme a escala de tempo característica é aumentada, a fidelidade estabiliza em $f \approx 1$, caracterizando a evolução adiabática. Esse comportamento de $f(t)$ no regime intermediário pode ser entendido como uma consequência do *quench* iniciar na criticalidade. A proximidade com o ponto crítico implica um rápido decaimento de $f(t)$ no início do *quench*, que tende a um comportamento oscilatório à medida que o sistema evoluído afasta-se do ponto inicial da evolução. O comportamento da fidelidade ao final do *quench*, $f(t_f)$, em função de τ_V e τ_U é mostrado nos painéis (c) e (d) da Fig. 31, respectivamente. Nos *quenches* em direção ao ordenamento SDW [painéis (b) e (d)], o processo aproxima-se do regime adiabático em torno de $\tau_U = 2.0$, enquanto para $\tau_U = 2.5$ ele é adiabático [$f(t_f) = 0.992$]. Por outro lado, nos *quenches* em direção ao ordenamento CDW [painéis (a) e (c)], para $\tau_V = 5.0$ o sistema ainda está no regime intermediário.

A evolução torna-se adiabática somente a partir de $\tau_V = 12.0$ [$f(t_f) = 0.996$], como já apontado na subseção anterior ao discutirmos o comportamento do parâmetro de ordem.

Para o *quench* em direção ao ordenamento CDW, com $\tau_V = 12.0$, no início da evolução, a fidelidade está ligeiramente abaixo do valor estipulado para o critério adiabático definido para o instante t_f (0.99) [ver painel inserido na Fig. 31(c)]. Isso ocorre como uma consequência da alta excitação do sistema nas proximidades do ponto crítico no início da evolução. À medida que a evolução afasta-se do ponto inicial, as excitações são suprimidas e a fidelidade estabiliza em $f(t) > 0.99$. O mesmo comportamento é observado para $\tau_U = 2.5$ no *quench* em direção ao ordenamento SDW, como pode ser visto no painel inserido na Fig. 31(d). Para valores maiores de τ (ver resultados de $\tau_V = 20.0$ e $\tau_U = 5.0$), a fidelidade permanece acima de 0.99 durante toda a evolução. As diferenças entre as evoluções ao se ligar as interações no sítio e entre sítios vizinhos serão exploradas sob a ótica do emaranhamento na próxima subseção.

4.3.3 Entropia de emaranhamento

Para quantificar correlações não-locais entre subpartes do sistema ao longo do *quench*, avaliamos a entropia de emaranhamento, definida como $EE = -\sum_i \lambda_i \log_2 \lambda_i$, em que o conjunto $\{\lambda_i\}$ - denominado espectro de emaranhamento - é formado pelos autovalores da matriz densidade reduzida $\hat{\rho}_{A/B} = \text{Tr}_{B/A} |\Psi\rangle \langle \Psi|$. Consideramos um sistema bipartido em um subsistema A é formado pelos $(L-1)/2$ sítios mais à esquerda da cadeia, enquanto B é formado pelos $(L+1)/2$ sítios à direita. Embora as subpartes tenham comprimento $\sim L/2$, nos certificamos que o comportamento qualitativo de EE não muda para subsistemas com outros tamanhos.

A evolução de EE ao longo do *quench* em direção aos ordenamentos de carga e spin é mostrada na Fig. 29(c) e (d), respectivamente. Para comparação, o comportamento de EE previsto para o GS instantâneo de equilíbrio também é apresentado (linha verde tracejada). Para o equilíbrio, a presença de um ordenamento de carga ou spin está associado a um menor valor de EE em comparação ao estado inicial sem interações, como pode ser observado no comportamento de EE em função das interações para o GS, apresentado nos painéis (c) e (d) da Fig. 29. Esse resultado é esperado, visto que o fenômeno de localização da função de onda tende a diminuir o emaranhamento entre as subpartes do sistema.

Já na situação de não-equilíbrio, como esperado para o regime de impulso, para *quenches* abruptos ($\tau_U = \tau_V = 0.01$), o valor da entropia ao longo da evolução não muda com respeito ao seu valor inicial, correspondente a $U_0 = 0$ ou $V_0 = 0$. Por outro lado, o início do regime intermediário apresenta um resultado interessante para o *quench* em direção ao ordenamento CDW. Observamos um aumento de EE além do seu valor inicial para os valores $\tau_V = 0.33, 2.0, 3.5$ e 5.0 [linhas ciano, vermelha, laranja e magenta na Fig. 29(c), respectivamente]. Para $\tau_V = 0.33$, EE cresce monotonicamente com o ligamento

das interações. Para $\tau_V = 2.0$, o crescimento é monotônico até $V(t) \approx 1.8$ e grosseiramente satura em torno de $EE \approx 1.75$ - nesse caso o ordenamento CDW ainda não está bem formado, conforme indicado no pequeno valor de $|m_{CDW}|$ visto no painel (a). No caso de $\tau_V = 3.5$ e 5.0 , ocorre um pequeno aumento EE , o qual é rapidamente suprimido em direção aos valores de equilíbrio. Esses resultados para o regime intermediário indicam que durante o *quench* em direção ao ordenamento carga, antes da formação adiabática da CDW, o sistema visita estados excitados emaranhados. Em contraste, não ocorre um aumento significativo de EE além do seu valor inicial para formação do ordenamento SDW, como pode ser visto na Fig. 29(d). O aumento de EE nas proximidades de um ponto crítico também foi observado durante a dinâmica de não-equilíbrio produzida ao variar de forma controlada o campo aplicado em uma cadeia de Ising [79].

Como mencionado acima, nossos resultados mostram que, no regime intermediário, a dinâmica de não-equilíbrio do rearranjo de cargas utiliza estados excitados emaranhados. Esse regime é marcado por uma superposição entre os comportamentos do estado inicial com o estado com ordenamento CDW. Isso pode ser visualizado no quadro de $\tau_V = 2.0$ da Fig. 28(c), o qual apresenta as densidades locais ao final de um *quench* no regime intermediário. Nesse painel a distribuição de carga do sistema se aproxima de uma superposição das configurações de carga do estado inicial (em torno do centro da cadeia) e do estado com ordenamento CDW (em torno das extremidades da cadeia).

Ainda no regime intermediário, o comportamento de EE apresenta oscilações à medida que as interações aumentam - veja os resultados para $\tau_V = 3.5$ e $\tau_U = 1.0$ [linhas laranjas da Fig.29 (c) e (d)]. Essas oscilações tendem a ter menor amplitude e maior frequência conforme o sistema aproxima-se do regime adiabático. A aproximação é marcada por uma menor diferença entre os resultados de não-equilíbrio e os do GS de equilíbrio (linha verde). A presença de oscilações no comportamento de EE bem como de observáveis locais do sistema nas proximidades do regime adiabático foram observadas em cadeias magnéticas após cruzar de forma controlada a criticalidade [79, 110]. Esse comportamento pode ser atribuído à presença de estados excitados na dinâmica de não-equilíbrio.

4.3.4 Função desvio com respeito ao estado fundamental de equilíbrio

Para condensar as principais diferenças entre os *quenches* em direção aos ordenamentos CDW e SDW, definimos a função desvio para uma dada quantidade Θ da seguinte forma

$$\Delta\Theta = \frac{\sum |\Theta_t - \Theta_{GS}|}{\sum |\Theta_{GS}|}, \quad (4.7)$$

em que Θ_t e Θ_{GS} correspondem aos valores de Θ para o estado evoluído e para o GS de equilíbrio, respectivamente, sendo a soma realizada sobre o intervalo de tempo $0 \leq t \leq t_f$ - equivalente ao tempo total do *quench*. Na Fig. 32(a) apresentamos os resultados para o desvio dos parâmetros de ordem m_{CDW} e m_{SDW} como funções da escala de tempo

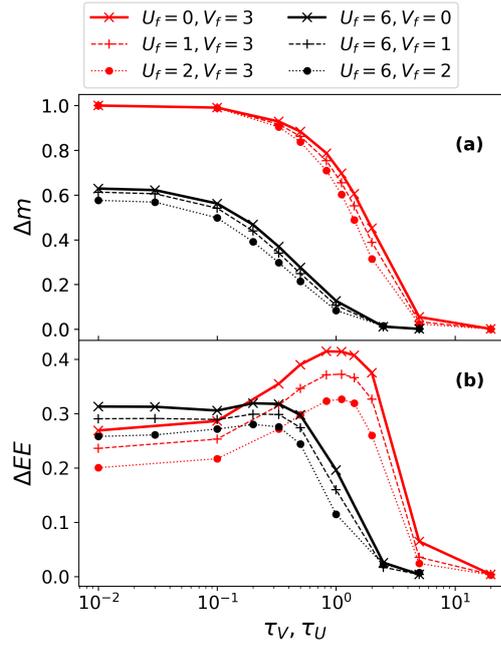


Figura 32 – Função desvio para os parâmetros de ordem (a) CDW e SDW e (b) para EE em função da escala de tempo característica, τ_V se o *quench* for em direção ao ordenamento CDW (curvas vermelhas) e τ_U se for em direção ao ordenamento SDW (curvas pretas).

característica: τ_V se o *quench* for em direção ao ordenamento CDW e τ_U se for em direção ao ordenamento SDW. Nesta subseção nos concentraremos nos casos em que somente uma das interações, U ou V , é ligada no *quench*, correspondentes às curvas contínuas mais grossas; os casos onde ambas as interações são ligadas serão tratados na próxima seção.

Por um lado, em ambas as direções de *quench* o desvio do parâmetro de ordem apresenta um decaimento monotônico com respeito ao aumento da escala de tempo característica. Contudo, para o *quench* em direção ao ordenamento SDW (curva preta) o desvio tende a zero para menores valores de τ em comparação ao *quench* em direção ao ordenamento CDW, enfatizando que o regime adiabático é mais rapidamente atingindo no primeiro. Por outro lado, o desvio de EE mostrado na Fig. 32(b) apresenta um comportamento não-monotônico para o *quench* em direção ao ordenamento CDW, com um aumento significativo além do seu valor inicial no regime intermediário, compatível com o comportamento de EE observado na Fig. 29(c). No caso do *quench* em direção ao ordenamento SDW, esse aumento é praticamente desprezível, o que está em conformidade com o resultados apresentados na Fig. 29(d). Comparando o comportamento das curvas contínuas de ΔEE em vermelho (CDW) e preto (SDW) temos, para o regime intermediário, mais uma evidência que enfatiza a presença de estados excitados emaranhados participando da dinâmica do rearranjo de cargas para formar o ordenamento CDW. Essa evidência justifica a maior escala de tempo característica necessária para o sistema entrar no regime adiabático.

4.4 Ligando U e V simultaneamente

Nesta seção discutimos o cenário onde ambas as interações são ligadas simultaneamente no *quench*. Para o cenário de equilíbrio, o modelo de Hubbard da eq. (4.1) com $U(t) = U_{eq} \neq 0$ e $V(t) = V_{eq} = 0$ é integrável e apresenta solução exata via *ansatz* de Bethe [111], porém a versão estendida ($V_{eq} \neq 0$) é não-integrável para um conjunto geral de parâmetros do sistema [112]. Para sistemas quânticos unidimensionais integráveis, após um *quench*, é previsto que haja relaxamento em direção ao estado de equilíbrio descrito pelo ensemble de Gibbs generalizado [113]. O mesmo não se aplica a modelos não-integráveis [114, 115]. Tal diferença nos motiva a investigar como a dinâmica de não-equilíbrio é afetada ao se quebrar a integrabilidade ligando as interações V no *quench* em direção ao ordenamento SDW, bem como os efeitos de se ligar U no *quench* em direção ao ordenamento CDW.

Na Fig. 32 apresentamos a função desvio para diferentes quantidades ao longo dos *quenches* realizados sobre os caminhos 2, 3, 4 e 5, indicados nos painéis (a) e (d) da Fig. 28, em que ambas as interações são ligadas em direção aos ordenamentos. Utilizamos os resultados dos *quenches* vertical e horizontal (caminhos #1 e #6) para contrastar com os efeitos de ligar simultaneamente ambas as interações. Para os *quenches* em direção ao ordenamento CDW (SDW), o ligamento de U (V) está associado a menores valores dos desvios do parâmetro de ordem e EE , que tendem a diminuir conforme aumentamos U_f (V_f). De modo geral, os três regimes - impulso, intermediário e adiabático - são observados como funções de τ considerando os casos em que U_f e V_f são diferentes de zero no *quench*. Na verdade, os resultados para o caso em que somente uma interação ou ambas as interações são ligadas são muito semelhantes, indicando que o comportamento do estado evoluído durante o *quench* de tempo-finito não depende da integrabilidade do modelo.

4.5 Dependência dos resultados com o tamanho do sistema

Para analisar como nossos resultados dependem do número de sítios da cadeia, selecionamos o *quench* com $U_f = 1, V_f = 3$ [caminho #2 na Fig. 28(a)], correspondente à formação do ordenamento CDW, e $U_f = 6, V_f = 1$ [caminho #5 na Fig. 28(d)], correspondente à formação do ordenamento SDW. Na Fig. 33, mostramos o desvio dos parâmetro de ordem e de EE como funções do tempo de *quench* para diferentes comprimentos L de cadeia. Como observado na figura, o aumento do número de sítios não afeta qualitativamente nossos resultados. Contudo, antes de atingir o comportamento adiabático, observamos que cadeias com um maior número de sítios apresentam um desvio maior para ambas as quantidades investigadas. De acordo com o teorema adiabático, a presença de um menor *gap* entre as energias do estado fundamental e do primeiro estado excitado leva a uma maior excitação do sistema durante o cruzamento da criticalidade. Considerando

que nosso sistema está inicialmente no ponto crítico e que aumentar o tamanho da cadeia implica um menor *gap* crítico [110], o aumento do desvio com o tamanho da cadeia no regime intermediário pode ser justificado pela maior excitação inicial do sistema. Além disso, o aumento do número de sítios da cadeia está associado a uma maior escala de tempo característica para entrar no regime adiabático, visto que o *quench* precisará ser mais lento para suprimir a maior excitação do sistema.

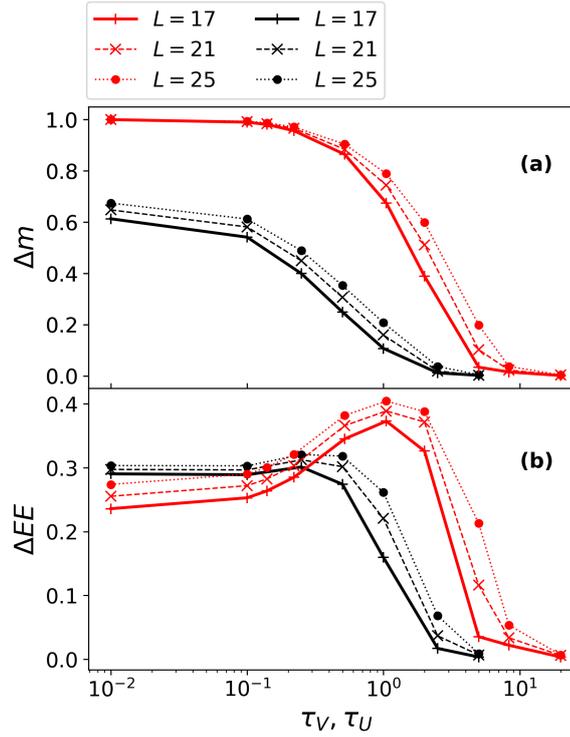


Figura 33 – Desvio dos (a) parâmetros de ordem e (b) de EE como funções da escala de tempo característica, τ_V ou τ_U , dependendo de se o *quench* é em direção ao ordenamento CDW (curvas vermelhas, com $U_f = 1, V_f = 3$ fixo) ou em direção ao ordenamento SDW (curvas pretas, com $U_f = 6, V_f = 1$). Os resultados mostrados são para cadeias com diferentes comprimentos L , incluindo $L = 17$, considerado nos gráficos apresentados anteriormente.

5 Conclusões Gerais e Perspectivas Futuras

Nesta tese utilizamos DMRG dependente do tempo para investigar a formação de não-equilíbrio dos ordenamentos CDW e SDW a partir de um estado inicial não-interagente. Estudamos a formação dessas fases no contexto do modelo de Hubbard estendido unidimensional, que apresenta os termos de interação no mesmo sítio, U , e o termo de interação entre primeiros vizinhos, V , além do termo de *hopping* relacionado à mobilidade eletrônica; no caso de semi-preenchimento e interações repulsivas, o diagrama de fases do modelo apresenta as fases isolantes CDW ($U < 2V$) e SDW ($U > 2V$), além de uma *bond order wave* em torno da origem da linha $U = 2V$ do diagrama de fases - está última não sendo considerada no estudo desta tese. Preparamos um estado inicial sem interação, posteriormente evoluindo-o (de forma controlada) sob ação de um Hamiltoniano interagente. Esse protocolo é comumente denominado *quench*. Neste trabalho consideramos um *quench* de tempo finito no qual o tempo em que as interações, U e/ou V , são ligadas pode ser controlado. Durante o *quench*, investigamos o comportamento dos parâmetros de ordem CDW e SDW, entropia de emaranhamento, fidelidade entre o estado evoluído e o estado fundamental de equilíbrio e quantidades locais, como densidades de carga e spin ao longo dos sítios da cadeia. Utilizamos essas quantidades para classificar os comportamentos de não-equilíbrio durante o *quench*.

Inicialmente, ligando somente uma das interações no *quench*, V ou U , para investigar a formação dos ordenamentos CDW e SDW, respectivamente, rastreamos três diferentes regimes para o *quench* - impulso, intermediário e adiabático - os quais dependem da escala de tempo em que as interações são ligadas, parametrizada por τ . No regime de impulso, que ocorre para valores suficientemente pequenos de τ , o sistema permanece “congelado” no seu estado inicial durante toda a evolução. No extremo oposto, para valores suficientemente grandes de τ , no regime adiabático, o estado evoluído segue o mesmo comportamento previsto para o estado fundamental de equilíbrio. No regime intermediário encontram-se os principais resultados deste trabalho. Nesse regime, observamos um aumento da entropia de emaranhamento no estado evoluído (além do seu valor inicial) nos *quenches* em direção ao ordenamento CDW, o qual não é observado nos *quenches* em direção ao ordenamento SDW. Isso sugere que o rearranjo de cargas para formação do ordenamento CDW precisa ser mais lento, para evitar que estados excitados emaranhados sejam acessados durante a dinâmica, ao contrário do rearranjo de spins para formar o ordenamento SDW. Essa característica do *quench* em direção ao ordenamento CDW faz com que o regime adiabático seja atingindo para uma escala de tempo maior, quando comparada à escala associada ao regime SDW. Em outra perspectiva, a maior excitação do sistema no *quench* em direção ao ordenamento CDW pode ser explicada olhando para como o estado inicial muda ao se

ligar as interações U ou V . Enquanto a mudança energética do rearranjo de spins para formar o ordenamento SDW a partir do estado inicial escala aproximadamente com o inverso de U - visto que para o caso de $V = 0$ o modelo é mapeado numa cadeia de Heisenberg antiferromagnética para U suficientemente grande com constante de troca $4J^2/U$ - o rearranjo de cargas para formar o ordenamento CDW escala linearmente com V . Essa diferença justifica parcialmente a maior excitação do sistema no *quench* em direção ao ordenamento CDW, que precisa ser mais lento para o sistema atingir o comportamento adiabático.

Analizamos também casos nos quais ambas as interações, U e V , são ligadas linearmente (com $U > 2V$ no caso de *quench* para formação do ordenamento de spin e $U < 2V$ quando estudamos a formação do ordenamento de carga). Nossos resultados mostram que a quebra de integrabilidade do sistema (quando $V \neq 0$ no *quench*), especialmente no caso da formação do ordenamento SDW, não muda o comportamento previsto pelo cenário onde somente uma das interações é ligada no *quench*. Como os cenários estudados neste trabalho estão no intervalo de tempo em que as interações são ligadas, acreditamos que na evolução livre (após o *quench*) a não-integrabilidade do sistema possa afetar a evolução, especialmente nos estados pertencentes aos regimes de impulso e intermediário, os quais estão excitados em $t = t_f$. Estes efeitos podem ser investigados em trabalhos futuros.

Perspectivas futuras incluem a investigação da evolução livre (após o *quench*) explorando novos parâmetros, como o fator de estrutura de spin e de carga, permitindo assim uma maior proximidade entre nossos resultados e dados experimentais. Nosso objetivo será analisar as respostas do fator de estrutura ao crescimento da entropia de emaranhamento no regime intermediário e, no pós-*quench*, avaliar possíveis assinaturas da formação de domínios de carga e spin prevista para *quenches* que cruzam o ponto crítico. Outro projeto futuro consiste em analisar a diferença entre um *quench* linear e um *quench* não-linear no ligamento das interações, identificando como isso afeta a formação dos ordenamentos de carga ou spin. Para *quenches* em modelos de spin, por exemplo, foi visto que a forma do *quench* pode alterar a velocidade das excitações produzidas [30]. Tal estudo pode oferecer subsídios teóricos para orientar implementações de estados localizados em redes óticas.

Em nosso grupo de pesquisa, o DMRG e sua extensão temporal foram anteriormente utilizados para estudar propriedades de equilíbrio e não-equilíbrio em sistemas unidimensionais. Com um código desenvolvido em MATLAB, diversos trabalhos foram publicados [25, 32, 116, 117]. Por outro lado, a complexidade do problema tratado nesta tese exigiu um passo adicional no contexto computacional, motivando a mudança para uma implementação mais robusta em C++. Nessa perspectiva, desenvolvemos todo o código em C++ utilizando o pacote ITensor [48]. Nosso código atual está disponível em <https://github.com/isaacarvalho7/t-DMRG> juntamente com seu *design document*

- que oferece orientações sobre a arquitetura do código e futuras implementações. Esse desenvolvimento constituiu um importante passo para o amadurecimento da metodologia em nosso grupo, visto a alta aplicabilidade do código em *cluster* de computadores, permitindo explorar problemas atuais de fronteira ligados aos fenômenos de equilíbrio e não-equilíbrio em sistemas unidimensionais.

Referências

- [1] Mott, N. F.: *The Basis of the Electron Theory of Metals, with Special Reference to the Transition Metals*. Proceedings of the Physical Society A, 62(7):416–422, jul 1949. Citado na página 9.
- [2] P. Coleman: *Introduction to many-body physics*. Cambridge University Press, 2015. Citado na página 10.
- [3] A. C. Hewson: *The Kondo problem to heavy fermions*, volume 2. Cambridge university press, 1997. Citado na página 9.
- [4] Bardeen, John, Leon N Cooper e John Robert Schrieffer: *Theory of superconductivity*. Phys. Rev., 108(5):1175, 1957. Citado na página 9.
- [5] McWhan, D. B., A. Menth, J. P. Remeika, W. F. Brinkman e T. M. Rice: *Metal-Insulator Transitions in Pure and Doped V₂O₃*. Phys. Rev. B, 7:1920–1931, Mar 1973. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.7.1920>. Citado na página 9.
- [6] Giamarchi, Thierry: *Quantum physics in one dimension*, volume 121. Clarendon press, 2003. Citado 5 vezes nas páginas 10, 12, 27, 28 e 66.
- [7] Auslaender, O. M., H. Steinberg, A. Yacoby, Y. Tserkovnyak, B. I. Halperin, K. W. Baldwin, L. N. Pfeiffer e K. W. West: *Spin-Charge Separation and Localization in One Dimension*. Science, 308(5718):88–92, 2005, ISSN 0036-8075. Citado na página 11.
- [8] Lorenz, T, M Hofmann, M Grüninger, A Freimuth, S Uhrig, G, M Dressel e M Dumm: *Evidence for spin-charge separation in quasi-one-dimensional organic conductor*. Nature, 418, 2002. Citado 2 vezes nas páginas 11 e 15.
- [9] Ishii, Hiroyoshi, Hiromichi Kataura, Hidetsugu Shiozawa, Hideo Yoshioka, Hideo Otsubo, Yasuhiro Takayama, Tsuneaki Miyahara, Shinzo Suzuki, Yohji Achiba, Masashi Nakatake, Takamasa Narimura, Mitsuharu Higashiguchi, Kenya Shimada, Hirofumi Namatame e Masaki Taniguchi: *Direct observation of Tomonaga-Luttinger-liquid state in carbon nanotubes at low temperatures*. Nature, 426:540–544, 2003. Citado 2 vezes nas páginas 11 e 15.
- [10] Wang, Yao, Zhuoyu Chen, Tao Shi, Brian Moritz, Zhi Xun Shen e Thomas P. Devereaux: *Phonon-Mediated Long-Range Attractive Interaction in One-Dimensional*

- Cuprates*. Phys. Rev. Lett., 127:197003, Nov 2021. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.127.197003>. Citado 2 vezes nas páginas 11 e 15.
- [11] Bertel, Erminald: *Physics in One Dimension*. European Journal of Physics Education, 4(1):58–77, 2017, ISSN 1309-7202. <http://eu-journal.org/index.php/EJPE/article/view/83>. Citado na página 11.
- [12] Keimer, B., S. A. Kivelson, M. R. Norman, S. Uchida e J. Zaanen: *From quantum matter to high-temperature superconductivity in copper oxides*. Nature, 518(7538):179–186, Feb 2015, ISSN 1476-4687. <https://doi.org/10.1038/nature14165>. Citado na página 11.
- [13] Si, Qimiao, Rong Yu e Elihu Abrahams: *High-temperature superconductivity in iron pnictides and chalcogenides*. Nature Reviews Materials, 1(4):16017, Mar 2016, ISSN 2058-8437. <https://doi.org/10.1038/natrevmats.2016.17>. Citado na página 11.
- [14] Zhou, Xingjiang, Wei Sheng Lee, Masatoshi Imada, Nandini Trivedi, Philip Phillips, Hae Young Kee, Päivi Törmä e Mikhail Erements: *High-temperature superconductivity*. Nature Reviews Physics, 3(7):462–465, Jul 2021, ISSN 2522-5820. <https://doi.org/10.1038/s42254-021-00324-3>. Citado na página 11.
- [15] Bussmann-Holder, Annette e Hugo Keller: *High-temperature superconductors: underlying physics and applications*. Zeitschrift für Naturforschung B, 75(1-2):3–14, oct 2019. Citado na página 11.
- [16] Yeomans, J.M.: *Statistical Mechanics of Phase Transitions*. Clarendon Press, 1992, ISBN 9780191589706. Citado na página 12.
- [17] White, Steven R: *Density matrix formulation for quantum renormalization groups*. Phys. Rev. Lett., 69(19):2863, 1992. Citado 9 vezes nas páginas 12, 40, 41, 48, 50, 51, 52, 54 e 56.
- [18] Schollwöck, Ulrich: *The density-matrix renormalization group in the age of matrix product states*. Ann. Phys., 326(1):96–192, 2011. Citado 9 vezes nas páginas 12, 16, 38, 40, 41, 43, 44, 62 e 90.
- [19] Eisert, J., M. Cramer e M. B. Plenio: *Colloquium: Area laws for the entanglement entropy*. Rev. Mod. Phys., 82:277–306, Feb 2010. <https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.82.277>. Citado 5 vezes nas páginas 13, 38, 40, 41 e 46.
- [20] Osterloh, A., Luigi Amico, G. Falci e Rosario Fazio: *Scaling of entanglement close to a quantum phase transition*. Nature, 416(6881):608–610, Apr 2002, ISSN 1476-4687. <https://doi.org/10.1038/416608a>. Citado na página 13.

- [21] Amico, Luigi, Rosario Fazio, Andreas Osterloh e Vlatko Vedral: *Entanglement in many-body systems*. Rev. Mod. Phys., 80:517–576, May 2008. <https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.80.517>. Citado 2 vezes nas páginas 13 e 14.
- [22] Canella, G. A. e V. V. França: *Mott-Anderson metal-insulator transitions from entanglement*. Phys. Rev. B, 104:134201, Oct 2021. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.104.134201>. Citado 3 vezes nas páginas 13, 14 e 33.
- [23] Mund, C., Ö. Legeza e R. M. Noack: *Quantum information analysis of the phase diagram of the half-filled extended Hubbard model*. Phys. Rev. B, 79:245130, Jun 2009. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.79.245130>. Citado 2 vezes nas páginas 13 e 14.
- [24] Iemini, Fernando, Thiago O. Maciel e Reinaldo O. Vianna: *Entanglement of indistinguishable particles as a probe for quantum phase transitions in the extended Hubbard model*. Phys. Rev. B, 92:075423, Aug 2015. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.92.075423>. Citado 2 vezes nas páginas 13 e 14.
- [25] Bragança, Helena, Eduardo Mascarenhas, G. I. Luiz, C. Duarte, R. G. Pereira, M. F. Santos e M. C. O. Aguiar: *Nonuniversality of entanglement convertibility*. Phys. Rev. B, 89:235132, Jun 2014. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.89.235132>. Citado 2 vezes nas páginas 13 e 76.
- [26] De Nicola, Stefano, Alexios A. Michailidis e Maksym Serbyn: *Entanglement View of Dynamical Quantum Phase Transitions*. Phys. Rev. Lett., 126:040602, Jan 2021. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.126.040602>. Citado na página 13.
- [27] Ronquillo, David C., Adu Vengal e Nandini Trivedi: *Signatures of magnetic-field-driven quantum phase transitions in the entanglement entropy and spin dynamics of the Kitaev honeycomb model*. Phys. Rev. B, 99:140413, Apr 2019. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.99.140413>. Citado na página 13.
- [28] White, Steven R e Adrian E Feiguin: *Real-time evolution using the density matrix renormalization group*. Phys. Rev. Lett., 93(7):076401, 2004. Citado 2 vezes nas páginas 13 e 62.
- [29] Feiguin, Adrian E e Steven R White: *Time-step targeting methods for real-time dynamics using the density matrix renormalization group*. Phys. Rev. B, 72(2):020404, 2005. Citado na página 13.
- [30] Schoenauer, Benedikt e Dirk Schuricht: *Finite-time quantum quenches in the XXZ Heisenberg chain*. Phys. Rev. B, 100:115418, Sep 2019. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.100.115418>. Citado 4 vezes nas páginas 13, 26, 28 e 76.

- [31] Manmana, Salvatore R., Stefan Wessel, Reinhard M. Noack e Alejandro Muramatsu: *Time evolution of correlations in strongly interacting fermions after a quantum quench*. Phys. Rev. B, 79:155104, Apr 2009. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.79.155104>. Citado 3 vezes nas páginas 13, 27 e 29.
- [32] Bragança, Helena, M. F. Cavalcante, R. G. Pereira e Maria C. O. Aguiar: *Quench dynamics and relaxation of a spin coupled to interacting leads*. Phys. Rev. B, 103:125152, Mar 2021. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.103.125152>. Citado 2 vezes nas páginas 13 e 76.
- [33] Sabetta, Thiago e Grégoire Misguich: *Nonequilibrium steady states in the quantum XXZ spin chain*. Phys. Rev. B, 88:245114, Dec 2013. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.88.245114>. Citado na página 13.
- [34] Pellegrini, Franco, Simone Montangero, Giuseppe E. Santoro e Rosario Fazio: *Adiabatic quenches through an extended quantum critical region*. Phys. Rev. B, 77:140404, Apr 2008. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.77.140404>. Citado na página 13.
- [35] Zhu, W., Zhoushen Huang, Yin Chen He e Xueda Wen: *Entanglement Hamiltonian of Many-Body Dynamics in Strongly Correlated Systems*. Phys. Rev. Lett., 124:100605, Mar 2020. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.124.100605>. Citado na página 13.
- [36] Tarruell, Leticia e Laurent Sanchez-Palencia: *Quantum simulation of the Hubbard model with ultracold fermions in optical lattices*. Comptes Rendus Physique, 19(6):365–393, 2018, ISSN 1631-0705. Citado 2 vezes nas páginas 14 e 15.
- [37] Bloch, Immanuel, Jean Dalibard e Sylvain Nascimbène: *Quantum simulations with ultracold quantum gases*. Nature Physics, 8:267–276, 2012. Citado 2 vezes nas páginas 14 e 19.
- [38] Gross, Christian e Immanuel Bloch: *Quantum simulations with ultracold atoms in optical lattices*. Science, 357(6355):995–1001, 2017. <https://www.science.org/doi/abs/10.1126/science.aal3837>. Citado 2 vezes nas páginas 14 e 19.
- [39] Schäfer, Florian, Takeshi Fukuhara, Seiji Sugawa, Yosuke Takasu e Yoshiro Takahashi: *Tools for quantum simulation with ultracold atoms in optical lattices*. Nature Reviews Physics, 2(8):411–425, 2020. Citado 4 vezes nas páginas 14, 15, 17 e 19.
- [40] Cheneau, Marc, Peter Barmettler, Dario Poletti, Manuel Endres, Peter Schauß, Takeshi Fukuhara, Christian Gross, Immanuel Bloch, Corinna Kollath e Stefan Kuhr: *Light-cone-like spreading of correlations in a quantum many-body system*. Nature, 481:484–487, Jan 2012. Citado 5 vezes nas páginas 14, 22, 23, 24 e 34.

- [41] Islam, Rajibul, Ruichao Ma, Philipp M. Preiss, M. Eric Tai, Alexander Lukin, Matthew Rispoli e Markus Greiner: *Measuring entanglement entropy in a quantum many-body system*. Nature, 528(7580):77–83, Dec 2015, ISSN 1476-4687. <https://doi.org/10.1038/nature15750>. Citado na página 14.
- [42] Ferreira, Diego L. B., Thiago O. Maciel, Reinaldo O. Vianna e Fernando Iemini: *Quantum correlations, entanglement spectrum, and coherence of the two-particle reduced density matrix in the extended Hubbard model*. Phys. Rev. B, 105:115145, Mar 2022. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.105.115145>. Citado na página 14.
- [43] Ueda, Masahito: *Quantum equilibration, thermalization and prethermalization in ultracold atoms*. Nature Reviews Physics, 2(12):669–681, 2020. Citado 2 vezes nas páginas 14 e 32.
- [44] Mitra, Aditi: *Quantum Quench Dynamics*. Annual Review of Condensed Matter Physics, 9(1):245–259, 2018. <https://doi.org/10.1146/annurev-conmatphys-031016-025451>. Citado 2 vezes nas páginas 14 e 32.
- [45] Riegger, L., G. Orso e F. Heidrich-Meisner: *Interaction quantum quenches in the one-dimensional Fermi-Hubbard model with spin imbalance*. Phys. Rev. A, 91:043623, Apr 2015. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.91.043623>. Citado na página 14.
- [46] Zawadzki, Krissia, Roberto M Serra e Irene D’Amico: *Work-distribution quantumness and irreversibility when crossing a quantum phase transition in finite time*. Physical Review Research, 2(3):033167, 2020. Citado na página 14.
- [47] Skelt, A H, K Zawadzki e I D’Amico: *Many-body effects on the thermodynamics of closed quantum systems*. Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical, 52(48):485304, nov 2019. <https://doi.org/10.1088/1751-8121/ab4fb6>. Citado na página 14.
- [48] Fishman, Matthew, Steven R. White e E. Miles Stoudenmire: *The ITensor Software Library for Tensor Network Calculations*, 2020. Citado 3 vezes nas páginas 15, 62 e 76.
- [49] Carvalho, Isaac M., Helena Bragança, Walber H. Brito e Maria C. O. Aguiar: *Formation of spin and charge ordering in the extended Hubbard model during a finite-time quantum quench*. Phys. Rev. B, 106:195405, Nov 2022. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.106.195405>. Citado na página 16.
- [50] Giannetti, Claudio, Massimo Capone, Daniele Fausti, Michele Fabrizio, Fulvio Parmigiani e Dragan Mihailovic: *Ultrafast optical spectroscopy of strongly correlated*

- materials and high-temperature superconductors: a non-equilibrium approach*. *Advances in Physics*, 65(2):58–238, 2016. Citado 2 vezes nas páginas 17 e 18.
- [51] Hellmann, S, T Rohwer, M Kalläne, K Hanff, C Sohrt, A Stange, A Carr, MM Murnane, HC Kapteyn, L Kipp *et al.*: *Time-domain classification of charge-density-wave insulators*. *Nature communications*, 3(1):1–8, 2012. Citado na página 18.
- [52] Torre, Alberto de la, Dante M. Kennes, Martin Claassen, Simon Gerber, James W. McIver e Michael A. Sentef: *Colloquium: Nonthermal pathways to ultrafast control in quantum materials*. *Rev. Mod. Phys.*, 93:041002, Oct 2021. <https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.93.041002>. Citado na página 18.
- [53] Fausti, D., R. I. Tobey, N. Dean, S. Kaiser, A. Dienst, M. C. Hoffmann, S. Pyon, T. Takayama, H. Takagi e A. Cavalleri: *Light-Induced Superconductivity in a Stripe-Ordered Cuprate*. *Science*, 331(6014):189–191, 2011. <https://www.science.org/doi/abs/10.1126/science.1197294>. Citado na página 18.
- [54] Mitrano, M., A. Cantaluppi, D. Nicoletti, S. Kaiser, A. Perucchi, S. Lupi, P. Di Pietro, D. Pontiroli, M. Riccò, S. R. Clark, D. Jaksch e A. Cavalleri: *Possible light-induced superconductivity in K_3C_{60} at high temperature*. *Nature*, 530(7591):461–464, Feb 2016. Citado na página 18.
- [55] Kogar, Anshul, Alfred Zong, Pavel E Dolgirev, Xiaozhe Shen, Joshua Straquadine, Ya Qing Bie, Xirui Wang, Timm Rohwer, I Tung, Yafang Yang *et al.*: *Light-induced charge density wave in $LaTe_3$* . *Nature Physics*, 16(2):159–163, 2020. Citado na página 19.
- [56] Bao, Changhua, Peizhe Tang, Dong Sun e Shuyun Zhou: *Light-induced emergent phenomena in 2D materials and topological materials*. *Nature Reviews Physics*, 4(1):33–48, 2022. Citado na página 19.
- [57] Kaiser, Stefan: *Light-induced superconductivity in high- T_c cuprates*. *Physica Scripta*, 92(10):103001, aug 2017. <https://doi.org/10.1088/1402-4896/aa8201>. Citado na página 19.
- [58] Iwai, S., M. Ono, A. Maeda, H. Matsuzaki, H. Kishida, H. Okamoto e Y. Tokura: *Ultrafast Optical Switching to a Metallic State by Photoinduced Mott Transition in a Halogen-Bridged Nickel-Chain Compound*. *Phys. Rev. Lett.*, 91:057401, Jul 2003. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.91.057401>. Citado na página 19.
- [59] Okamoto, H., H. Matsuzaki, T. Wakabayashi, Y. Takahashi e T. Hasegawa: *Photoinduced Metallic State Mediated by Spin-Charge Separation in a One-Dimensional*

- Organic Mott Insulator*. Phys. Rev. Lett., 98:037401, Jan 2007. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.98.037401>. Citado na página 19.
- [60] Uemura, Hirotaka, Hiroyuki Matsuzaki, Yukihiro Takahashi, Tatsuo Hasegawa e Hiroshi Okamoto: *Ultrafast Charge Dynamics in One-Dimensional Organic Mott Insulators*. Journal of the Physical Society of Japan, 77(11):113714, 2008. <https://doi.org/10.1143/JPSJ.77.113714>. Citado na página 19.
- [61] Okamoto, H., T. Miyagoe, K. Kobayashi, H. Uemura, H. Nishioka, H. Matsuzaki, A. Sawa e Y. Tokura: *Ultrafast charge dynamics in photoexcited Nd_2CuO_4 and La_2CuO_4 cuprate compounds investigated by femtosecond absorption spectroscopy*. Phys. Rev. B, 82:060513, Aug 2010. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.82.060513>. Citado na página 19.
- [62] Okamoto, H., T. Miyagoe, K. Kobayashi, H. Uemura, H. Nishioka, H. Matsuzaki, A. Sawa e Y. Tokura: *Photoinduced transition from Mott insulator to metal in the undoped cuprates Nd_2CuO_4 and La_2CuO_4* . Phys. Rev. B, 83:125102, Mar 2011. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.83.125102>. Citado na página 19.
- [63] Bloch, Immanuel: *Ultracold quantum gases in optical lattices*. Nature Physics, 1(1):23–30, 2005. Citado 2 vezes nas páginas 20 e 21.
- [64] Giamarchi, Thierry, Andrew J Millis, Olivier Parcollet, Hubert Saleur e Leticia F Cugliandolo: *Strongly Interacting Quantum Systems out of Equilibrium: Lecture Notes of the Les Houches Summer School: Volume 99, August 2012*, volume 99. Oxford University Press, 2016. Citado na página 21.
- [65] Eisert, Jens, Mathis Friesdorf e Christian Gogolin: *Quantum many-body systems out of equilibrium*. Nature Physics, 11(2):124–130, 2015. Citado na página 22.
- [66] Lieb, Elliott H e Derek W Robinson: *The finite group velocity of quantum spin systems*. Em *Statistical mechanics*, páginas 425–431. Springer, 1972. Citado na página 22.
- [67] Iyer, Deepak, Huijie Guan e Natan Andrei: *Exact formalism for the quench dynamics of integrable models*. Phys. Rev. A, 87:053628, May 2013. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.87.053628>. Citado na página 25.
- [68] Polkovnikov, Anatoli e Vladimir Gritsev: *Breakdown of the adiabatic limit in low-dimensional gapless systems*. Nature Physics, 4(6):477–481, 2008. Citado na página 25.

- [69] Ruutu, VMH, VB Eltsov, AJ Gill, TWB Kibble, M Krusius, Yu G Makhlin, B Placais, GE Volovik e Wen Xu: *Vortex formation in neutron-irradiated superfluid ^3He as an analogue of cosmological defect formation*. Nature, 382(6589):334–336, 1996. Citado na página 26.
- [70] Ulm, S, J Roßnagel, G Jacob, C Degünther, ST Dawkins, UG Poschinger, R Nigmatullin, A Retzker, MB Plenio, F Schmidt-Kaler *et al.*: *Observation of the Kibble–Zurek scaling law for defect formation in ion crystals*. Nature communications, 4(1):1–7, 2013. Citado na página 26.
- [71] Pyka, K, J Keller, HL Partner, R Nigmatullin, T Burgermeister, DM Meier, K Kuhlmann, A Retzker, Martin B Plenio, WH Zurek *et al.*: *Topological defect formation and spontaneous symmetry breaking in ion Coulomb crystals*. Nature communications, 4(1):1–6, 2013. Citado na página 26.
- [72] Campo, Adolfo del e Wojciech H. Zurek: *Universality of phase transition dynamics: Topological defects from symmetry breaking*. International Journal of Modern Physics A, 29(08):1430018, 2014. <https://doi.org/10.1142/S0217751X1430018X>. Citado 2 vezes nas páginas 25 e 26.
- [73] Braun, Simon, Mathis Friesdorf, Sean S Hodgman, Michael Schreiber, Jens Philipp Ronzheimer, Arnau Riera, Marco Del Rey, Immanuel Bloch, Jens Eisert e Ulrich Schneider: *Emergence of coherence and the dynamics of quantum phase transitions*. Proceedings of the National Academy of Sciences, 112(12):3641–3646, 2015. Citado na página 26.
- [74] Chen, David, Matthew White, Cecilia Borries e Brian DeMarco: *Quantum quench of an atomic Mott insulator*. Physical Review Letters, 106(23):235304, 2011. Citado na página 26.
- [75] Meinert, F., M. J. Mark, E. Kirilov, K. Lauber, P. Weinmann, A. J. Daley e H. C. Nägerl: *Quantum Quench in an Atomic One-Dimensional Ising Chain*. Phys. Rev. Lett., 111:053003, Jul 2013. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.111.053003>. Citado na página 26.
- [76] Takahashi, Minoru: *Thermodynamics of one-dimensional solvable models*. Thermodynamics of One-Dimensional Solvable Models, 2005. Citado na página 27.
- [77] Calabrese, Pasquale e John Cardy: *Time dependence of correlation functions following a quantum quench*. Physical review letters, 96(13):136801, 2006. Citado 2 vezes nas páginas 27 e 33.

- [78] Zurek, Wojciech H., Uwe Dorner e Peter Zoller: *Dynamics of a Quantum Phase Transition*. Phys. Rev. Lett., 95:105701, Sep 2005. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.95.105701>. Citado 2 vezes nas páginas 29 e 30.
- [79] Canovi, Elena, Elisa Ercolessi, Piero Naldesi, Luca Taddia e Davide Vodola: *Dynamics of entanglement entropy and entanglement spectrum crossing a quantum phase transition*. Phys. Rev. B, 89:104303, Mar 2014. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.89.104303>. Citado 3 vezes nas páginas 30, 31 e 71.
- [80] Messiah, A: *Quantum Mechanics, Two Volumes Bound as One, ch. 20, p. 875ff*, 1999. Citado 2 vezes nas páginas 31 e 62.
- [81] Gogolin, Christian, Markus P. Müller e Jens Eisert: *Absence of Thermalization in Nonintegrable Systems*. Phys. Rev. Lett., 106:040401, Jan 2011. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.106.040401>. Citado na página 32.
- [82] Moeckel, Michael e Stefan Kehrein: *Interaction Quench in the Hubbard Model*. Phys. Rev. Lett., 100:175702, May 2008. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.100.175702>. Citado na página 32.
- [83] Rigol, Marcos, Vanja Dunjko e Maxim Olshanii: *Thermalization and its mechanism for generic isolated quantum systems*. Nature, 452(7189):854–858, 2008. Citado na página 33.
- [84] Polkovnikov, Anatoli, Krishnendu Sengupta, Alessandro Silva e Mukund Vengalattore: *Colloquium: Nonequilibrium dynamics of closed interacting quantum systems*. Rev. Mod. Phys., 83(3):863, 2011. Citado na página 33.
- [85] Steinigeweg, R., A. Khodja, H. Niemeyer, C. Gogolin e J. Gemmer: *Pushing the Limits of the Eigenstate Thermalization Hypothesis towards Mesoscopic Quantum Systems*. Phys. Rev. Lett., 112:130403, Apr 2014. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.112.130403>. Citado na página 33.
- [86] Beugeling, W., R. Moessner e Masudul Haque: *Finite-size scaling of eigenstate thermalization*. Phys. Rev. E, 89:042112, Apr 2014. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevE.89.042112>. Citado na página 33.
- [87] Caux, Jean Sébastien e Jorn Mossel: *Remarks on the notion of quantum integrability*. Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment, 2011(02):P02023, feb 2011. <https://doi.org/10.1088/1742-5468/2011/02/p02023>. Citado na página 33.
- [88] Nielsen, M. e I. Chuang: *Quantum Computation and Quantum Information*. Cambridge University Press, New York, 2010, ISBN 978-1-107-00217-3. Citado na página 33.

- [89] Canella, GA, K Zawadzki e VV França: *Effects of temperature and magnetization on the Mott–Anderson physics in one-dimensional disordered systems*. Scientific Reports, 12(1):1–6, 2022. Citado na página 33.
- [90] Eisler, Viktor e Ingo Peschel: *Evolution of entanglement after a local quench*. Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment, 2007(06):P06005–P06005, jun 2007. Citado 3 vezes nas páginas 33, 36 e 37.
- [91] Langer, Stephan, Markus Heyl, Ian P. McCulloch e Fabian Heidrich-Meisner: *Real-time energy dynamics in spin- $\frac{1}{2}$ Heisenberg chains*. Phys. Rev. B, 84:205115, Nov 2011. Citado na página 34.
- [92] Calabrese, Pasquale e John Cardy: *Evolution of entanglement entropy in one-dimensional systems*. Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment, 2005(04):P04010, 2005. Citado na página 34.
- [93] Avella, Adolfo, Ferdinando Mancini *et al.*: *Strongly Correlated Systems*. Springer, 2012. Citado 2 vezes nas páginas 35 e 36.
- [94] Schuch, N, M M Wolf, K G H Vollbrecht e J I Cirac: *On entropy growth and the hardness of simulating time evolution*. New Journal of Physics, 10(3):033032, mar 2008. <https://doi.org/10.1088/1367-2630/10/3/033032>. Citado na página 38.
- [95] Orús, Román: *A practical introduction to tensor networks: Matrix product states and projected entangled pair states*. Annals of physics, 349:117–158, 2014. Citado 2 vezes nas páginas 38 e 43.
- [96] Banuls, Mari Carmen, Matthew B Hastings, Frank Verstraete e J Ignacio Cirac: *Matrix product states for dynamical simulation of infinite chains*. Physical review letters, 102(24):240603, 2009. Citado na página 38.
- [97] Wilson, Kenneth G.: *The renormalization group: Critical phenomena and the Kondo problem*. Rev. Mod. Phys., 47:773–840, Oct 1975. <https://link.aps.org/doi/10.1103/RevModPhys.47.773>. Citado na página 40.
- [98] Avella, Adolfo e Ferdinando Mancini: *Strongly Correlated Systems - Numerical Methods*, volume 176. Springer, 2013, ISBN 978-3-642-35105-1. Citado 3 vezes nas páginas 40, 54 e 58.
- [99] Ramos, Flávia Braga *et al.*: *Propriedades estáticas e dinâmicas de sistemas fortemente correlacionados*. 2017. Citado na página 42.
- [100] Souza Braganca, Helena de: *Emaranhamento, dinâmica de não-equilíbrio e supercondutividade em sistemas de elétrons fortemente interagentes*. 2018. Citado na página 42.

- [101] Bridgeman, Jacob C e Christopher T Chubb: *Hand-waving and interpretive dance: an introductory course on tensor networks*. Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical, 50(22):223001, may 2017. <https://doi.org/10.1088/1751-8121/aa6dc3>. Citado na página 43.
- [102] Peschel, Ingo: *Entanglement in solvable many-particle models*. Brazilian Journal of Physics, 42(3):267–291, 2012. Citado na página 45.
- [103] Daley, A J, C Kollath, U Schollwöck e G Vidal: *Time-dependent density-matrix renormalization-group using adaptive effective Hilbert spaces*. Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment, 2004(04):P04005, apr 2004. Citado na página 57.
- [104] Ejima, Satoshi e Satoshi Nishimoto: *Phase Diagram of the One-Dimensional Half-Filled Extended Hubbard Model*. Phys. Rev. Lett., 99:216403, Nov 2007. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.99.216403>. Citado 2 vezes nas páginas 59 e 63.
- [105] Tsuchiizu, M. e A. Furusaki: *Phase Diagram of the One-Dimensional Extended Hubbard Model at Half Filling*. Phys. Rev. Lett., 88:056402, Jan 2002. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.88.056402>. Citado na página 59.
- [106] Jeckelmann, Eric: *Ground-State Phase Diagram of a Half-Filled One-Dimensional Extended Hubbard Model*. Phys. Rev. Lett., 89:236401, Nov 2002. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.89.236401>. Citado na página 63.
- [107] Nakamura, Masaaki: *Tricritical behavior in the extended Hubbard chains*. Physical Review B, 61(24):16377, 2000. Citado na página 63.
- [108] Altland, Alexander e Ben D Simons: *Condensed matter field theory*. Cambridge university press, 2010. Citado na página 66.
- [109] Bauer, A, F Dorfner e F Heidrich-Meisner: *Temporal decay of Néel order in the one-dimensional Fermi-Hubbard model*. Physical Review A, 91(5):053628, 2015. Citado na página 67.
- [110] Pollmann, Frank, Subroto Mukerjee, Andrew G Green e Joel E Moore: *Dynamics after a sweep through a quantum critical point*. Physical Review E, 81(2):020101, 2010. Citado 3 vezes nas páginas 68, 71 e 74.
- [111] Lieb, Elliott H e FY Wu: *Absence of Mott Transition in an Exact Solution of the Short-Range, One-Band Model in One Dimension*. Em *Condensed Matter Physics and Exactly Soluble Models*, páginas 639–642. Springer, 2004. Citado na página 73.

- [112] Poilblanc, Didier, Timothy Ziman, Jean Bellissard, Frederic Mila e Gilles Montambaux: *Poisson vs. goe statistics in integrable and non-integrable quantum hamiltonians*. EPL (Europhysics Letters), 22(7):537, 1993. Citado na página 73.
- [113] Rigol, Marcos, Vanja Dunjko, Vladimir Yurovsky e Maxim Olshanii: *Relaxation in a completely integrable many-body quantum system: an ab initio study of the dynamics of the highly excited states of 1D lattice hard-core bosons*. Physical review letters, 98(5):050405, 2007. Citado na página 73.
- [114] D'Alessio, Luca, Yariv Kafri, Anatoli Polkovnikov e Marcos Rigol: *From quantum chaos and eigenstate thermalization to statistical mechanics and thermodynamics*. Advances in Physics, 65(3):239–362, 2016. Citado na página 73.
- [115] Kormos, Marton, Mario Collura, Gabor Takács e Pasquale Calabrese: *Real-time confinement following a quantum quench to a non-integrable model*. Nature Physics, 13(3):246–249, 2017. Citado na página 73.
- [116] Paula, A. L. de, H. Bragança, R. G. Pereira, R. C. Drumond e M. C. O. Aguiar: *Spinon and bound-state excitation light cones in Heisenberg XXZ chains*. Phys. Rev. B, 95:045125, Jan 2017. <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.95.045125>. Citado na página 76.
- [117] Paula, Alberto L de, Emmanuel Pereira, Raphael C Drumond e M C O Aguiar: *Energy current manipulation and reversal of rectification in graded XXZ spin chains*. Journal of Physics: Condensed Matter, 32(17):175403, jan 2020. <https://dx.doi.org/10.1088/1361-648X/ab6b8c>. Citado na página 76.

APÊNDICE A – DMRG tradicional

A.1 Parte infinita

O algoritmo DMRG inicia-se construindo uma cadeia com blocos da direita e da esquerda contendo cada um l sítios e dimensão $m = d^l$; o Hamiltoniano do super-bloco é em sequência resolvido por diagonalização exata, usando algoritmos de diagonalização interativa que forneçam o estado fundamental, como os métodos de Lanczos e Davidson [18]. Nesse ponto, H_{SupB} possui dimensão $(m \times d) \times (m \times d) = d^{2(l+1)}$. Em vista disso, é necessário que o tamanho da cadeia seja suficientemente razoável para que a solução seja numericamente viável.

Após obter o estado fundamental $|GS\rangle$, o próximo passo é calcular a matriz densidade reduzida do bloco aumentado à esquerda (ou direita), eliminando os graus de liberdade dos sítios do bloco aumentado à direita (esquerda):

$$\rho_{esq(dir)} = \text{Tr}_{dir(esq)} |GS\rangle \langle GS|. \quad (\text{A.1})$$

Os m primeiros auto-estados da matriz reduzida, $\rho_{esq(dir)}$, que correspondem aos maiores auto-valores, serão usados para renormalizar o bloco aumentado à esquerda (direita). Desta forma, a matriz de dimensão $m \times d$ do bloco aumentado será transformada numa matriz de dimensão m , conforme apresentado na Figura 34(a) e (b).

O bloco aumentado renormalizado corresponde, no próximo passo numérico, a um novo bloco de dimensão $B(l+1, m)$. Nesse passo, são acrescentados dois novos sítios livres à cadeia, em vermelho na Figura 34(c). Em seguida o Hamiltoniano do novo super-bloco é diagonalizado. Nesse momento ele possui $2(l+1) + 2$ sítios e dimensão $d^{2(l+1)}$, ou seja, o sistema cresceu sem crescer o espaço de Hilbert. Novamente são selecionados m auto-estados de maior peso na matriz densidade reduzida para renormalizar o novo bloco aumentado, produzindo, assim, o bloco do próximo passo, que terá $l+2$ sítios e dimensão m . Na sequência são acrescentados dois novos sítios para aumentar o tamanho da cadeia e o processo é repetido até obter-se o tamanho desejado da cadeia.

Em geral, a ideia é continuar crescendo a cadeia até que as flutuações de energia do estado fundamental estejam dentro de uma margem de tolerância predeterminada. Nesse caso, o algoritmo é utilizado para simular o limite termodinâmico, não sendo necessário complementá-lo com a parte finita do DMRG. Essa abordagem, no entanto, apresenta em geral muitos erros numéricos e não se aplica a cadeias que não possuem invariância translacional. O DMRG tem se mostrado, na maioria dos casos, mais preciso no tratamento de cadeias finitas, em que a parte infinita do algoritmo é utilizada para construir a cadeia

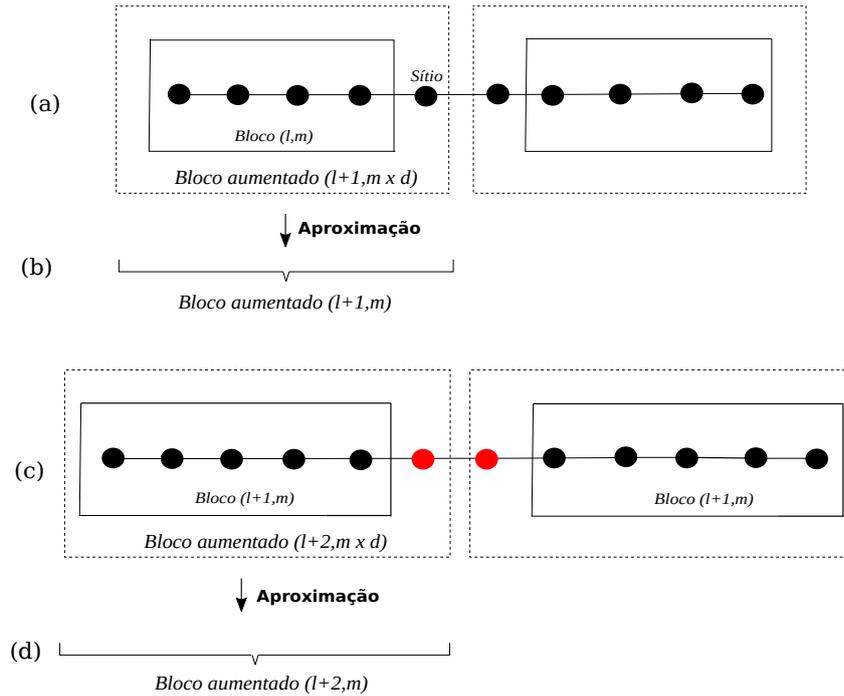


Figura 34 – Primeiros passos da parte infinita de DMRG.

até o tamanho desejado e a convergência do estado fundamental é alcançada por meio dos *sweeps* da parte finita, descritos na próxima subseção.

A.2 Parte finita - *sweeps*

Os *sweeps* são basicamente o nome dado ao processo de seleção inteligente dos estados mais relevantes para representar a função de onda de um dado sistema finito. Esse processo pode ser entendido como um aprimoramento da parte infinita do DMRG, pois otimiza a base de representação do estado alvo para uma truncagem de estados mais precisa.

O ponto inicial do algoritmo finito começa com processo iterativo da parte infinita até que o sistema tenha o tamanho e dimensão desejados. Para ilustrar esse cenário, seja o caso de uma cadeia de N sítios estruturados na forma de blocos, um à esquerda e outro à direita, ambos com dimensão m e $(N - 1)/2$ sítios, conectados por sítios livres, com apresentado na Figura 35. O processo de otimização na base de representação consiste em

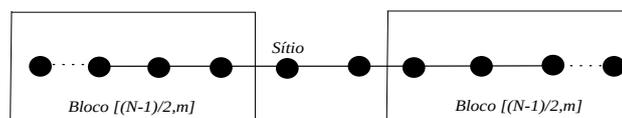


Figura 35 – Primeiros passos DMRG parte finita.

crescer o bloco à esquerda sem que haja adição de novos sítios na cadeia. Desta forma, enquanto no bloco à esquerda é adicionado um sítio, no bloco à direita é subtraído um sítio, como mostrado na Figura 36. O processo de renormalização é aplicado somente ao bloco

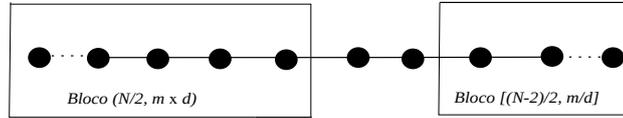


Figura 36 – Crescimento do bloco na parte finita do DMRG.

crescido, enquanto o bloco decrescido é representado na base utilizada na parte infinita do DMRG. Portanto é necessário que as representações da parte infinita sejam armazenadas, pois serão reutilizadas nesse passo para representar o bloco que decresce nesse processo. Novamente repete-se o procedimento de crescimento e renormalização do bloco à esquerda, bem como de decréscimo e reutilização da base no bloco à direita. Esse processo recebe o nome de varredura e termina quando o bloco à direita possuir um sítio. Nesse momento, o bloco à direita passa a crescer e é renormalizado, repetindo o procedimento anterior no sentido contrário, até que o bloco à esquerda contenha um sítio. Um ciclo completo, denominado *sweep*, termina quando os dois sítios livres estiverem localizados novamente em suas posições iniciais, como ilustrado na Figura 37.

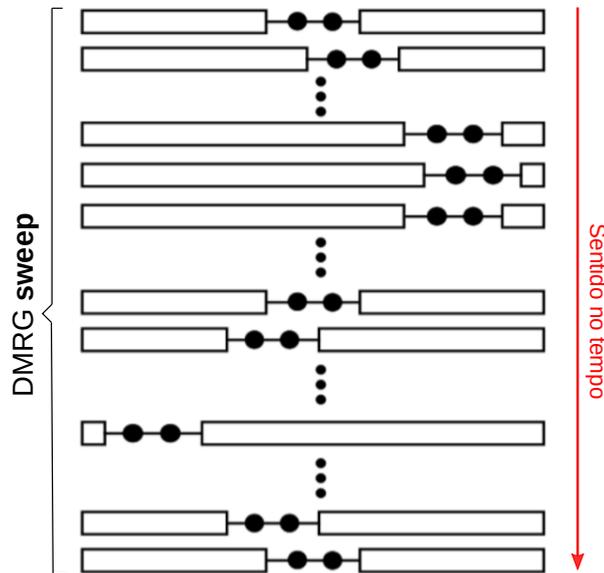


Figura 37 – Um *sweep* completo no cálculo DMRG.

A.3 Algoritmo t-DMRG

A evolução temporal usando a expansão de Suzuki-Trotter (S-T) consiste basicamente em sucessivas aplicações de evolução em pares de sítios. Como descrito na Subseção

3.4, a estratégia para mesclar esse método ao DMRG consiste em usar o operador de evolução temporal aos sítios livres ao longo dos *sweeps*, ao invés de diagonalizar o super-bloco. A implementação desse esquema é apresentada na Figura 38, em que pode ser resumido na seguinte sequência de passos:

- Inicia-se com um estado inicial, que pode ser obtido por DMRG.
- Introduce-se uma perturbação ao problema. Pode-se, por exemplo, alterar o Hamiltoniano ou adicionar algum termo extra ao estado. Caso a perturbação não seja inserida, ter-se-á uma evolução unitária dos estados quânticos.
- Inicia-se o processo de *sweep* da parte finita, porém adicionando as operações de evolução de S-T aos pares de sítios da seguinte forma: implementando, por exemplo, os *links* ímpares ao varrer da esquerda para direita e *links* pares ao varrer da direita para esquerda.
- Aplica-se uma normalização aos estados da matriz densidade dos estados evoluídos, semelhante à utilizada no DMRG estático. Desta forma, o espaço de Hilbert é atualizado a cada intervalo de tempo.
- Repete-se os dois passos anteriores até que evolução de tempo predeterminada seja atingida, ou seja, a cada ciclo (varredura de sítios pares e ímpares), o sistema evolui temporalmente δt , assim serão necessários $t/\delta t$ ciclos para atingir o tempo predeterminado.

Ao contrário do DMRG estático, em que a transformação da função de onda é feita para otimizar o cálculo, a evolução do estado no tempo é o principal objetivo de t-DMRG. Assim sendo, a função de onda evolui no tempo a cada *sweep*, e os estados mantidos na truncagem são ajustados para representá-la fielmente.

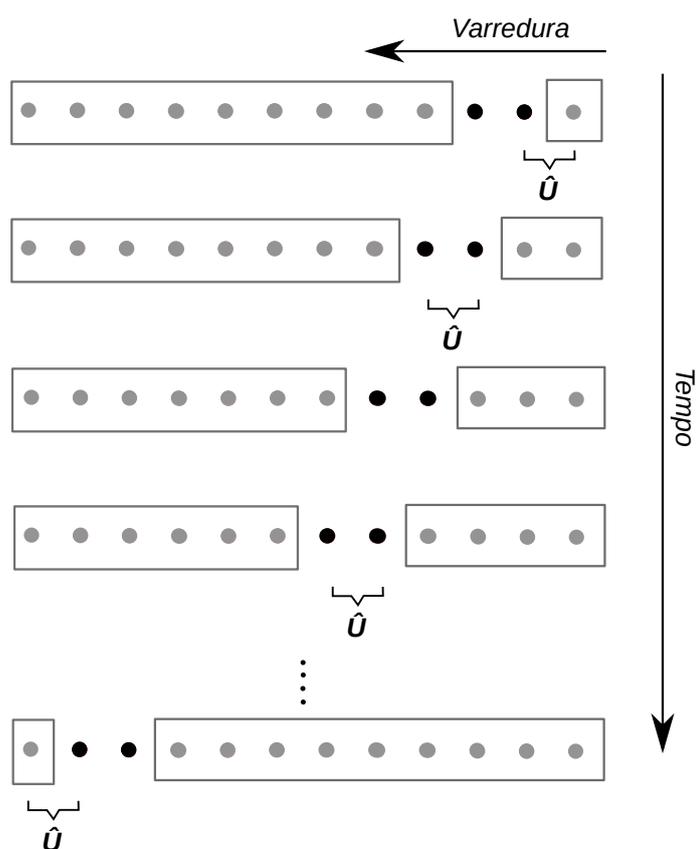


Figura 38 – Esquema de uma varredura durante a evolução temporal. O operador de evolução, \hat{U} , é aplicado somente aos links ímpares durante a varredura da direita para esquerda. Na varredura da esquerda para direita, somente os *links* pares estarão envolvidos.