

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

Maria Vitória Tiago Inocência

**FORMAÇÃO DE ORDENAMENTO DE CARGA E SPIN:
Evolução temporal após *quenches* em sistemas
interagentes unidimensionais**

Belo Horizonte
2024

Maria Vitória Tiago Inocêncio

FORMAÇÃO DE ORDENAMENTO DE CARGA E SPIN:

Evolução temporal após *quenches* em sistemas interagentes unidimensionais

Dissertação 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 Mestra em Física.

Orientadora: Maria Carolina de Oliveira Aguiar

Belo Horizonte

2024

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação (CIP)

I58f Inocêncio, Maria Vitória Tiago.

Formação de ordenamento de carga e spin: evolução temporal após quenches em sistemas interagentes unidimensionais / Maria Vitória Tiago Inocêncio. – 2024.

79 f. : il.

Orientadora: Maria Carolina de Oliveira Aguiar.

Dissertação (mestrado) – Universidade Federal de Minas Gerais, Departamento de Física.

Bibliografia: f. 75-79.

1. Sistemas em não-equilíbrio. 2. Emaranhamento. 3. Ondas. I. Título. II. Aguiar, Maria Carolina de Oliveira. III. Universidade Federal de Minas Gerais, Departamento de Física.

CDU – 531.31 (043)



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

A presente dissertação, intitulada “**Formação de ordenamento de carga e spin: evolução temporal após quenches em sistemas interagentes unidimensionais**” de autoria de **MARIA VITÓRIA TIAGO INOCÊNCIO**, submetida à Comissão Examinadora, abaixo-assinada, foi aprovada para obtenção do grau de **MESTRE EM FÍSICA** em 28 de agosto de 2024.

Belo Horizonte, 28 de agosto de 2024.

Profa. Maria Carolina de Oliveira Aguiar
Orientadora da aluna
Departamento de Física/UFMG

Prof. João Antônio Plascak
Departamento de Física/UFMG

Profa. Krissia de Zawadzki
Instituto de Física de São Carlos/USP



Documento assinado eletronicamente por **João Antonio Plascak, Membro**, em 29/08/2024, às 12:04, 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 02/09/2024, às 15:55, 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 **Krissia de Zawadzki, Usuário Externo**, em 03/09/2024, às 17:26, 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 **3505283** e o código CRC **FECC061F**.

*Para a minha mãe, que abriu mão de oportunidades
para que eu pudesse ter as minhas.*

AGRADECIMENTOS

Assim como no meu aniversário de 12 anos, gostaria de me entregar o primeiro pedaço de bolo. É uma celebração das escolhas que fiz até aqui — nem sempre as mais confortáveis, nem sempre as mais seguras — mas que me trouxeram ao presente momento.

Assinar um contrato com prazo de validade para ficar em um lugar te obriga a planejar mais as coisas. Foram muitos eventos familiares, reuniões e aniversários que passei longe da minha família, e por isso, gostaria de agradecer-los imensamente pela compreensão. Não é fácil estar distante, mas compensamos nos momentos certos. Sou grata à minha mãe, que superou o receio de viajar para outro estado para me visitar; aos meus irmãos, Felipe e Isaque, que seguram as pontas lá em São Paulo; e ao meu pai, que ainda precisa conhecer minha casinha.

Agradeço a todos que apoiaram minha decisão de vir para Beagá, uma escolha incerta até o último momento e cheia de reviravoltas. Em especial ao Antônio, amigo que me ajudou presencialmente durante o processo de inscrição, suportando todos os meus sustos, e à Lorena, uma das amigas com quem dividi vida em Viçosa, que sempre viu potencial em mim, me acompanhou de perto e incentivou essa escolha.

Agradeço imensamente ao meu orientador de monografia, Vagson, que me ensinou muito sobre pesquisa e sobre a vida. Essa lapiseira está me acompanhando em vários momentos importantes.

À cidade que me lembrou o que é a agitação de uma capital e, ao mesmo tempo, as oportunidades que é estar em uma — BH é nós. Principalmente ao meu namorado, César, que abriu sua casa para me receber, disposto a transformar sua casa em nossa casa e o seu gato em nosso gato. Sempre com muito amor e paciência, coisinha simples. Agradeço à minha família de BH, que me acolheu: Dulce, Renato, Michele, Dona Fiza, Caiçara, Alice e todos os outros.

À menina que conheci no banheiro, muito querida, que foi a ponte para eu entrar em contato com minha atual orientadora, no momento certo. Uma amizade que vai além do laboratório; uma pessoa companheira que virou minha irmã de pesquisa. Não sei se ela pensou nisso, mas acabamos de renovar nosso contrato — coisa séria.

Estou completamente grata à minha orientadora, Carol, cujo apoio e confiança me motivaram muito ao longo de todo o processo. Uma mulher incrível e essencial. Me acompanhou até aqui e aceitou continuar aguentando as minhas piadinhas por mais 4 anos.

A todos os colegas do laboratório, muito obrigada! Se em algum momento você

me ajudou a recuperar uma senha que eu havia esquecido, você tem um lugar guardado no meu coração, especialmente Vitor e Henrique, que até reinstalar sistema operacional cogitaram para me ajudar. À irmã mais velha, Nayara, sempre com ótimos conselhos e sempre me fazendo ler manuais, com toda a razão. Bárbara, Julia e Guilherme, que em qualquer situação garantiram boas risadas e compartilharam o desespero que é fazer um mestrado, sempre auxiliando no possível. Aos colegas do grupo GFSMC que não citei diretamente, mas que fizeram parte dessa jornada, incluindo os professores envolvidos no grupo, essenciais para o funcionamento e permanência dos projetos. Um agradecimento especial ao colega de laboratório com quem nunca convivi em laboratório, mas com quem tive a oportunidade de conviver em eventos, Isaac — uma pessoa incrível e querida, cheia de reflexões e conselhos. Sempre disposto a ajudar e com muitas histórias boas para contar. Agradeço à Helena, que foi essencial neste projeto e sempre se mostrou disponível para auxiliar onde fosse necessário. Aos colegas do café, dos gabinetes, dos corredores e de todas as matérias que participei. Obrigada por todas as conversas.

Preciso agradecer ao 515R, que me proporcionou um deslocamento de ônibus de 20 minutos do bairro Camargos até a UFMG — claro que isso inclui um trajeto de 20 minutos a pé, mas todo mundo precisa do cardio diário. Também agradeço aos combos 4031, 4033 e 5102, ao 402, metrô (que não é metrô) e ao 9502 pelo caminho até a Universidade, e ao de sempre 6350. Entre ônibus errados, pontos perdidos e muita raiva com o transporte público, eu cheguei.

Agradeço aos amigos que fiz pelo caminho. Que bom que somos da mesma área, pois isso garante que sempre haverá um evento para nos reencontrarmos. Em especial, aos que conheci nos ICTP's da vida: Marina, Stephany, João, Willdauany e Isaac — amizades quase instantâneas que será sempre um prazer reencontrar.

Além disso, agradeço a paciência nas comunicações via redes sociais, mesmo quando meu tempo de resposta no WhatsApp chegava a duas semanas. Desculpa pelo vácuo — deixei para responder depois, acabei esquecendo, e quando me dei conta, já tinha passado muito tempo.

Gostaria de agradecer a todas as agências de fomento, CNPq, CAPES, e em especial à FAPEMIG, que financiou minha bolsa de mestrado. Aos projetos que tornaram meu trabalho possível, o cluster do laboratório GFSMC, SINAPAD com o supercomputador Santos Dumont (SDumont), ao LCC CENAPAD-MG e ao CENAPAD-SP. Às instituições que me proporcionaram grandes experiências em eventos: UFMG, ICTP-SAIFR, ICTP-Trieste, USP, com fomento da FAPESP.

Um abraço a todos e até mais.

Há, no seio de uma ostra, um movimento — ainda que imperceptível. Qualquer coisa imiscuiu-se pela fissura, uma partícula qualquer, diminuta e invisível. Venceu as paredes lacradas, que se fecham como a boca que tem medo de deixar escapar um segredo. Venceu. E agora penetra o núcleo da ostra, contaminando-lhe a própria substância. A ostra reage, imediatamente. E começa a secretar o nácar. É um mecanismo de defesa, uma tentativa de purificação contra a partícula invasora. Com uma paciência de fundo de mar, a ostra profanada continua seu trabalho incansável, secretando por anos a fio o nácar que aos poucos se vai solidificando. É dessa solidificação que nascem as pérolas.

(...) As pérolas são, assim, o resultado de uma contaminação.

(...) É preciso continuar secretando o nácar, formar a pérola que talvez seja imperfeita, que talvez jamais seja encontrada e viva para sempre encerrada no fundo do mar. Talvez estas, as pérolas esquecidas, jamais achadas, as pérolas intocadas e, por isso, absolutas em si mesmas, guardem em si uma parcela faiscante da eternidade.

— **Heloísa Seixas, *Pérolas Absolutas***

RESUMO

Exploramos, nesta dissertação de mestrado, fenômenos de não-equilíbrio em sistemas de elétrons fortemente interagentes. Nosso foco principal está centrado na investigação do surgimento de ordenamentos de carga e spin em sistemas em uma dimensão espacial sob condições fora do equilíbrio. Partindo de um estado não-interagente inicialmente desordenado, acompanhamos sua evolução temporal sob um Hamiltoniano interagente - esse protocolo é denominado *quench* quântico. Especificamente, concentramo-nos no desenvolvimento dos ordenamentos de carga e spin dentro do modelo de Hubbard estendido unidimensional com semipreenchimento, caracterizado por interações repulsivas e apresentando as fases *charge density wave* (CDW) e *spin density wave* (SDW). Simulamos a progressão do estado inicial sob o Hamiltoniano do modelo citado, considerando que as interações eletrônicas escalonam progressivamente durante um intervalo de tempo finito, atingindo valores correspondentes à fase CDW ou SDW. A dinâmica fora do equilíbrio é examinada usando a extensão temporal do método de grupo de renormalização de matriz densidade (t-DMRG, do inglês *time-dependent density matrix renormalization group*), implementado a partir do software *ITensor*. Inspirado em diagramas de tensor, o *ITensor* facilita simulações numéricas eficientes e precisas, permitindo análises abrangentes da evolução temporal do sistema sob diferentes graus de interações eletrônicas. Após reproduzir resultados obtidos no nosso grupo de pesquisa para a evolução durante o *quench*, avançamos na investigação da evolução livre pós-*quench*. Analisando os parâmetros de ordem das fases CDW e SDW, identificamos três regimes temporais para os *quenches*: instantâneo, intermediário e adiabático. O sistema que alcançou o regime adiabático durante o *quench* permaneceu estável na análise pós-*quench*. O sistema sujeito ao regime instantâneo durante o *quench* não convergiu para o estado fundamental no pós-*quench*, apresentando um aumento significativo da entropia. No caso do regime intermediário, após atingir um pico durante o *quench*, os parâmetros exibiram um comportamento oscilatório que também foi observado em cadeias maiores.

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

ABSTRACT

In this master's dissertation, we explore non-equilibrium phenomena in strongly interacting electron systems. Our main focus is on investigating the emergence of charge and spin orderings in one-dimensional systems under non-equilibrium conditions. Starting from an initially disordered non-interacting state, we track its time evolution under an interacting Hamiltonian—a protocol known as a quantum *quench*. Specifically, we concentrate on the development of charge and spin orderings within the half-filled one-dimensional extended Hubbard model, characterized by repulsive interactions and exhibiting the charge density wave (CDW) and spin density wave (SDW) phases. We simulate the progression of the initial state under the Hamiltonian of the mentioned model, considering that the electronic interactions progressively scale up over a finite time interval, eventually reaching values corresponding to the CDW or SDW phase. The non-equilibrium dynamics are examined using the time-dependent extension of the density matrix renormalization group (t-DMRG) method, implemented through the *ITensor* software. Inspired by tensor diagrams, *ITensor* facilitates efficient and accurate numerical simulations, enabling comprehensive analyses of the system time evolution under different degrees of electronic interactions. After reproducing results obtained in our research group for the evolution during the *quench*, we proceed to investigate the post-*quench* free evolution. Analyzing the order parameters of the CDW and SDW phases, we identify three temporal regimes for the *quenches*: instantaneous, intermediate, and adiabatic. The system that achieved the adiabatic regime during the *quench* remained stable in the post-*quench* analysis. The system subject to the instantaneous regime during the *quench* did not converge to the ground state in the post-*quench*, exhibiting a significant increase in entropy. In the case of the intermediate regime, after reaching a peak during the *quench*, the parameters exhibited oscillatory behavior which was also observed in larger chains.

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

Sumário

1	INTRODUÇÃO	11
2	REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	15
2.1	Átomos frios em redes ópticas	15
2.2	Modelo de Hubbard	18
2.2.1	Modelo de Hubbard Estendido	22
2.3	Protocolo <i>Quench</i>	24
2.4	Entropia de Emaranhamento	30
2.5	Resultados motivacionais	33
3	METODOLOGIAS	37
3.1	Grupo de Renormalização da Matriz Densidade (DMRG)	38
3.1.1	DMRG - algoritmo infinito	39
3.1.2	DMRG - algoritmo finito	41
3.2	MPS	42
3.2.1	SVD - Decomposição em Valores Singulares	42
3.2.2	Representação de estados como MPS	45
3.2.3	Operações com MPS	49
3.3	DMRG via MPS	52
3.4	t-DMRG	55
4	RESULTADOS	58
4.1	Reprodução de resultados	58
4.2	Resultados preliminares do presente trabalho	65
5	CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS	73
	REFERÊNCIAS	75

1 Introdução

A investigação das interações entre um número extremamente grande de partículas, da ordem de 10^{23} , desempenha um papel crucial na compreensão das propriedades eletrônicas de materiais fortemente interagentes. Esta investigação é especialmente relevante em sistemas de baixa dimensionalidade, como materiais bidimensionais e unidimensionais, onde os efeitos das interações são amplificados. Nessas condições, as interações entre partículas podem gerar novos estados quânticos da matéria, além de fases metálicas, isolantes e semicondutoras [1].

Em seu trabalho intitulado *More is Different* [2], P.W. Anderson argumenta que a complexidade de sistemas com muitos componentes interagentes não pode ser completamente compreendida pela análise isolada de suas partes constituintes. À medida que exploramos as características individuais desses componentes, observamos que as propriedades coletivas que emergem são substancialmente distintas das propriedades dos elementos isolados. Fenômenos e estados de matéria novos podem surgir devido a essas interações, enfatizando a importância de abordagens teóricas e experimentais que considerem as interações entre partículas para uma compreensão mais profunda desses sistemas complexos. Exemplos disso incluem a supercondutividade de alta temperatura e fases eletrônicas complexas, como a transição de fase metal-isolante induzida por interação, conhecida como transição de Mott. Esses exemplos ilustram como as interações entre os componentes individuais resultam em fenômenos coletivos únicos e não triviais [3].

Materiais fortemente correlacionados desafiam a descrição convencional da teoria de bandas, onde os elétrons são considerados independentes e com interações insignificantes. Uma maneira de identificar esses materiais é procurar por elementos de transição com orbitais atômicos mais localizados (orbitais d ou f). O diagrama de Kmetko-Smith [4], apresentado na Figura 1, reorganiza os metais de transição conforme o grau de localização de seus orbitais eletrônicos, dos menos localizados (em azul) aos mais localizados (em vermelho). Elementos ao redor da diagonal principal do diagrama ilustram a competição entre elétrons localizados (devido à interação elétron-elétron) e elétrons delocalizados, que possuem um caráter itinerante. Em alguns casos, essa intensa interação eletrônica pode suprimir completamente a mobilidade eletrônica no sistema, levando à transição metal-isolante de Mott [5].

A investigação de sistemas complexos também depende da dimensionalidade. Em sistemas tridimensionais ou bidimensionais, o paradigma do líquido de Fermi é amplamente aplicado para descrever o comportamento de sistemas de elétrons. No entanto, em sistemas unidimensionais complexos, como nanoestruturas ou materiais de baixa dimensionalidade,

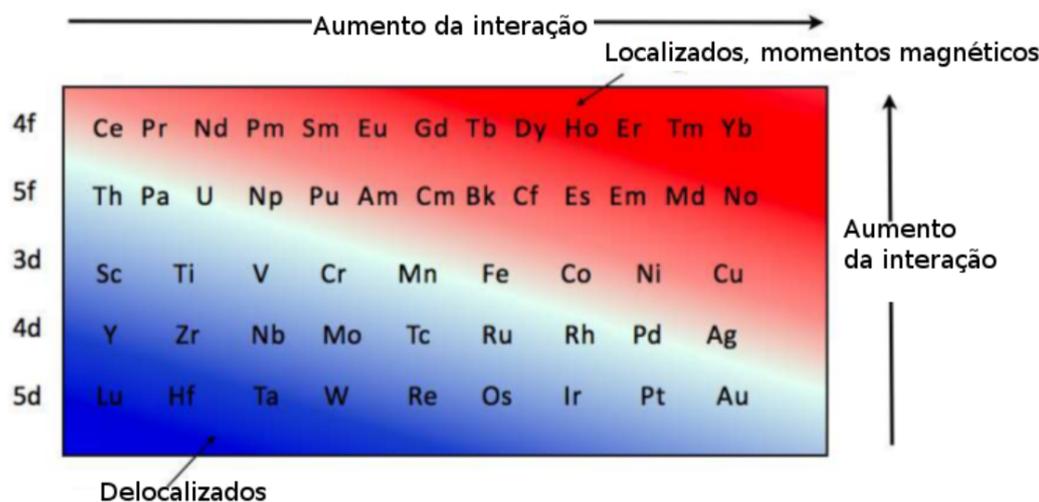


Figura 1 – Diagrama de Kmetko-Smith mostrando uma tabela periódica reorganizada dos elementos de transição, actinídeos e terras raras, organizados de elementos delocalizados (em azul) aos mais localizados (em vermelho) de acordo com seus orbitais d ou f . Figura retirada de [4].

o líquido de Fermi não é aplicável devido à natureza coletiva das interações entre as partículas. Nesse contexto, o líquido de Luttinger surge como um conceito essencial para descrever as propriedades coletivas das partículas em sistemas 1D complexos. A teoria do líquido de Luttinger descreve que qualquer alteração em uma partícula afeta coletivamente toda a cadeia de partículas, destacando a importância de uma abordagem especializada para compreender os comportamentos únicos e as propriedades emergentes em sistemas unidimensionais complexos. Em geral, baixas dimensionalidades potencializam efeitos de muitos corpos [1].

Em sistemas de baixa dimensionalidade, como cadeias unidimensionais ou superfícies, as interações entre as partículas são mais significativas devido à restrição imposta pela dimensionalidade reduzida, favorecendo a formação de fases ordenadas como *Charge Density Wave* (CDW) e *Spin Density Wave* (SDW) [1]. Na fase CDW, ocorre uma organização periódica da densidade de carga, resultando em uma distorção na estrutura eletrônica com regiões de alta e baixa densidade de carga. Essa variação cria um potencial periódico que gera um *gap* de energia na estrutura de bandas, levando a um comportamento isolante. Já na fase SDW, os spins dos elétrons se organizam periodicamente, criando uma estrutura magnética que pode afetar a mobilidade dos elétrons e também abrir um *gap* na estrutura de bandas, resultando em comportamento isolante. Essas fases ordenadas demonstram como a baixa dimensionalidade influencia significativamente as propriedades eletrônicas e magnéticas dos materiais.

Em particular, o modelo de Hubbard tem sido fundamental para entender a formação de ordenamentos em sistemas físicos, como CDW e SDW [1]. No contexto do

modelo de Hubbard, o Hamiltoniano descreve a energia total do sistema de elétrons em uma rede cristalina, considerando tanto o termo de energia cinética (*hopping*) quanto termos de interação entre elétrons. Essa descrição simples, mas poderosa, permite investigar como as propriedades eletrônicas emergentes surgem das interações entre elétrons e da estrutura da rede. Ao considerar o modelo de Hubbard em diferentes regimes, como o limite de forte acoplamento ou o limite de baixa densidade, é possível obter uma compreensão mais profunda dos fenômenos físicos que ocorrem em sistemas de baixa dimensionalidade.

No modelo de Hubbard estendido, consideram-se duas interações principais: a interação local entre elétrons no mesmo sítio, representada por U , e a interação entre elétrons em sítios adjacentes, representada por V . Essas interações são cruciais para o ordenamento de carga e spin do na presença de uma forte interação V ele tende a ter um ordenamento CDW, enquanto na presença de uma forte interação U há a tendência de um ordenamento SDW. No nosso trabalho, estudamos um sistema descrito pelo modelo de Hubbard estendido que é submetido a um *quench* quântico. O protocolo de *quench* envolve uma mudança dependente do tempo nos parâmetros do sistema, como U ou V . Ao realizar um *quench*, é possível estudar como o sistema evolui durante e após a perturbação. Essa abordagem permite explorar como as interações U e V afetam a formação e a dinâmica dos estados CDW e SDW, revelando o impacto dessas interações na evolução do sistema fora do equilíbrio.

Mesmo os modelos mais simplificados para problemas de muitos corpos não possuem solução trivial, mas podem ser resolvidos e aproximados por métodos numéricos. A ideia principal é considerar os graus de liberdade mais relevantes, simplificando o problema para torná-lo controlável. O Grupo de Renormalização da Matriz Densidade (DMRG, do inglês *Density Matrix Renormalization Group*) é um método variacional que descreve sistemas interagentes unidimensionais, utilizando truncagens “inteligentes”. Para avançar na investigação teórica sobre a relação de dependência entre os mecanismos elementares que geram situações de não equilíbrio com ordenamento de carga e/ou spin ao longo do tempo, utilizamos a extensão temporal do DMRG (t-DMRG) para explorar a formação não-equilíbrio dos ordenamentos CDW e SDW a partir de um estado inicial metálico sem ordenamento.

Esta dissertação está estruturada para apresentar os conceitos essenciais necessários para a reprodução dos resultados associados à tese [6] e ao artigo [7] de Isaac Martins Carvalho, que serviram de motivação para o presente trabalho. Para descrever a formação dos ordenamentos CDW e SDW, o autor partiu de um estado inicial desordenado e deixou o sistema evoluir seguindo um protocolo de *quench* em que as interações eletrônicas (U ou V) aumentam linearmente no tempo. Essa alteração foi realizada em diferentes taxas, identificando três regimes temporais distintos: impulso, intermediário e adiabático [7]. Esses regimes dependem da taxa inversa em que as interações são ativadas, parametrizada

por τ . Entre os principais resultados desse trabalho, destaca-se o regime intermediário, no qual observa-se um aumento da entropia de emaranhamento do estado evoluído nos *quenches* em direção ao ordenamento CDW, fenômeno que não ocorre no caso do SDW. Essa característica do *quench* em relação ao ordenamento CDW faz com que o regime adiabático seja identificado em uma taxa inversa τ maior em comparação ao regime associado ao SDW. Esses resultados foram reproduzidos na presente Dissertação. Além disso, foi realizada uma análise para cadeias de tamanho par, diferentemente do estudo anterior em que se considerou cadeias com um número ímpar de sítios. Utilizamos o código disponibilizado pelo autor em sua página do *GitHub* [8] para obter resultados comparáveis aos já publicados na literatura [7].

Como continuidade do trabalho acima, nesta Dissertação, investigamos a evolução do sistema após o fenômeno de *quench*, explorando os parâmetros previamente analisados. No regime adiabático, observamos uma evolução trivial, como esperado, já que o sistema segue o estado de equilíbrio durante o *quench*. No entanto, a situação difere significativamente no regime intermediário. Nele, encontramos que os parâmetros não convergem para os valores do estado fundamental correspondente ao Hamiltoniano final, mas oscilam no tempo entre o valor final do *quench* e um que parece se aproximar do estado fundamental. Essas oscilações podem estar relacionadas ao tamanho do sistema. Para investigar isso, obtivemos os resultados preliminares para cadeias maiores, além do tamanho de 17 sítios (mesmo valor utilizado no artigo [7]), considerando cadeias com 21 e 25 sítios. No caso dos *quenches* abruptos, em que o sistema fica "congelado" no estado inicial durante o *quench*, há uma evolução no pós-*quench*, mas com os parâmetros assumindo valores ainda distantes dos correspondentes ao estado fundamental de equilíbrio.

A Dissertação está estruturada em diversos capítulos. No Capítulo 2, apresentamos uma revisão da literatura sobre resultados experimentais e teóricos que motivaram a investigação das propriedades de não-equilíbrio em sistemas de muitos corpos interagentes. No Capítulo 3, discutimos os métodos DMRG e t-DMRG no formalismo do produto de matrizes, utilizados na implementação do código para este estudo. No Capítulo 4, reproduzimos os resultados principais de Isaac Carvalho e apresentamos os resultados preliminares do presente trabalho, referentes ao estudo após o *quench*. As conclusões e perspectivas são discutidas ao final da Dissertação.

2 Revisão Bibliográfica

Neste capítulo, realizaremos uma revisão dos conceitos fundamentais para a compreensão dos resultados apresentados. Na seção 2.1, abordaremos átomos frios e redes ópticas, destacando sua relevância como motivação experimental para esta pesquisa. Na seção 2.2, apresentaremos o modelo teórico considerado nesta tese e exemplos de sua implementação. Nas seções 2.3 e 2.4, discutiremos o protocolo de *quench* adotado e o conceito de entropia de emaranhamento. Por fim, na seção 2.5, descreveremos os resultados do trabalho de inspiração que estamos continuando, destacando os principais achados e sua contribuição para o avanço do conhecimento na área.

2.1 Átomos frios em redes ópticas

Durante o desenvolvimento de uma pesquisa, frequentemente nos deparamos com problemas inicialmente considerados intratáveis. No entanto, avanços tecnológicos têm possibilitado a criação de dispositivos que facilitam a resolução desses desafios. Um exemplo significativo é o estudo de sistemas de muitos corpos, onde atualmente podemos simular “sólidos artificiais” para investigações complexas, utilizando átomos frios em redes ópticas, por exemplo. Os simuladores quânticos (do inglês, *quantum simulators*) são sistemas físicos controlados e projetados para reproduzir o comportamento de sistemas quânticos complexos, como moléculas, átomos e a dinâmica de sistemas de muitos corpos.

A operação de um simulador quântico envolve a preparação de um estado inicial controlado, a aplicação de operações quânticas específicas para simular a evolução do sistema e a medição dos resultados para extrair informações relevantes. Esta abordagem permite explorar propriedades quânticas emergentes, como emaranhamento, superposição e coerência quântica, fundamentais para a compreensão de fenômenos quânticos complexos. Utilizando técnicas experimentais avançadas de controle e manipulação de sistemas quânticos, é possível desenvolver implementações com diferentes graus de liberdade, empregando gases ultrafrios de átomos ou íons aprisionados em redes ópticas. Essas técnicas são frequentemente utilizadas para analisar a dinâmica de sistemas de muitos corpos em estados de não-equilíbrio [9].

O estudo das estruturas cristalinas é fundamental na área da matéria condensada, uma vez que os sólidos cristalinos exibem uma organização periódica dos átomos que influencia suas propriedades físicas, ópticas e eletrônicas. Com isso, estamos interessados nas partículas que compõem esses cristais e a influência que a interação entre eles resulta no sistema. O estudo dessas estruturas em sistemas reais apresenta uma série de complicações,

como defeitos, vibrações da rede e acoplamento entre múltiplas bandas. Portanto, torna-se interessante utilizar arranjos experimentais que representem uma versão idealizada do cristal. Isso é viável graças ao avanço experimental alcançado com a técnica de armadilhas de redes ópticas, que permite a simulação de sistemas bosônicos e fermiônicos em “sólidos artificiais”.

A simulação de sistemas de muitos corpos em redes ópticas se apresenta como uma alternativa promissora para a investigação de fenômenos emergentes. Esses sistemas isolados são caracterizados por não interagirem com o ambiente externo, o que permite um controle preciso sobre os parâmetros associados e a criação de condições ideais para o estudo de fenômenos específicos. Dado que é um problema não trivial, as redes ópticas viabilizam a descrição eficiente de sistemas de muitos corpos, mesmo com o aumento dos graus de liberdade ao aumentar o número de partículas.

Átomos frios

Átomos frios referem-se a átomos que foram resfriados a temperaturas próximas do zero absoluto, a fim de estabilizá-los em redes ópticas. Para representar elétrons em uma rede cristalina, é comum utilizar isótopos como ${}^6\text{Li}$ ou ${}^{40}\text{K}$, que obedecem ao princípio de exclusão de Pauli, permitindo a investigação de fenômenos quânticos associados a partículas fermiônicas. Já para representar sistemas bosônicos são utilizados isótopos como ${}^{87}\text{Rb}$ ou ${}^{23}\text{Na}$, que seguem as estatísticas de Bose-Einstein. Na referência [10], encontramos uma descrição mais detalhada sobre os estados hiperfinos dos átomos, associados aos spins dos átomos resfriados.

Uma característica dos experimentos com átomos frios é que são essencialmente isolados, o que permite explorar a dinâmica de sistemas quânticos fechados em longas escalas de tempo. Dessa forma, podemos investigar a evolução desses sistemas após uma perturbação, o que contrasta com os materiais reais, cuja dinâmica é logo amortecida pelo acoplamento com o banho térmico. O elevado nível de controlabilidade observado nesses sistemas está associado à ressonância de Feshbach presente na interação entre átomos frios em gases quânticos. Essa ressonância possibilita a modificação da interação entre os átomos, permitindo ajustes na força e no alcance dessa interação. Assim, a capacidade de ajustar a interação entre átomos em redes ópticas por meio da ressonância de Feshbach não apenas reforça o isolamento necessário para explorar dinâmicas quânticas, mas também permite a investigação de uma variedade de fenômenos quânticos complexos, como condutividade quântica, transporte de informações quânticas e propriedades de emaranhamento em sistemas de rede [11].

Redes ópticas

Redes ópticas são estruturas criadas a partir da sobreposição de feixes de laser que formam padrões de interferência, resultando em potenciais ópticos periódicos para

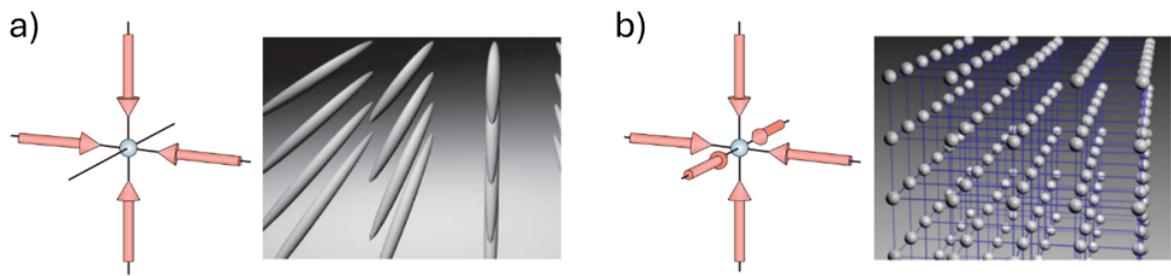
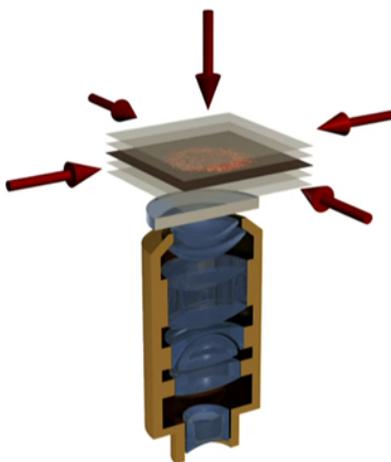


Figura 2 – Potencial óptico formado pela superposição de feixes estacionários. O painel (a) mostra uma rede de tubos que correspondem a um de potencial unidimensional. Em (b) a superposição resulta numa rede cúbica tridimensional. Figura adaptada de [12].

átomos. Essas redes atuam como uma espécie de estrutura cristalina artificial que confina os átomos em posições bem definidas, simulando uma rede cristalina real. Átomos podem ser aprisionados em tais campos de luz periódicos devido à sua polarizabilidade induzida pelo campo elétrico alternado produzido pela luz do laser.

Essas redes ópticas são muito versáteis e podem assumir diferentes propriedades: não apenas a geometria, dimensionalidade, desordem e profundidade da rede podem ser controladas, como também podem ser projetadas redes que carregam campos magnéticos efetivos centenas de vezes mais fortes do que os campos magnéticos mais fortes criados em laboratórios de estado sólido [12].

Quantum gas microscope ^{87}Rb



Reconstrução de ocupação para cada sitio da rede, $a = 532 \text{ nm}$

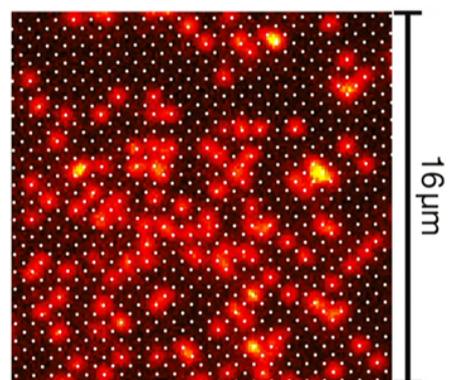


Figura 3 – Esquema de um microscópio de gás quântico, com a imagem correspondente obtida pelo equipamento. Figura adaptada de [13].

Uma visão esquemática dessas implementações é apresentada na Figura 2. Superpondo lasers em diferentes ângulos, é possível produzir redes de diferentes geometrias.

Isso se deve à interferência entre dois lasers idênticos orientados em sentidos opostos, o que produz ondas estacionárias. Para a produção de potenciais periódicos em uma, duas ou três dimensões, deve-se considerar a interferência de múltiplos lasers. Esses arranjos experimentais funcionam como “sólidos artificiais” e permitem simular sistemas bosônicos e fermiônicos, que imitam estruturas cristalinas em uma, duas ou três dimensões [14, 15]. Em comparação com o estudo de fenômenos emergentes em materiais reais, que requer cuidados com defeitos na estrutura cristalina e vibrações de rede, os experimentos em redes ópticas são desenvolvidos selecionando-se determinados graus de liberdade, como a intensidade, a fase e a polarização da luz, para investigar um fenômeno específico.

Redes ópticas permitem criar potenciais locais controláveis independentemente em cada sítio, facilitando a investigação de fenômenos de muitos corpos na física da matéria condensada. Na Figura 3, o esquema à esquerda mostra uma rede óptica de átomos frios e o esquema de uma análise via microscópio de gás quântico que resulta na imagem à direita. A detecção de alta resolução permite visualizar os átomos como pontos brilhantes em uma imagem de fluorescência, cada ponto representando um átomo em um local específico da rede [13].

As perspectivas para simulações quânticas no contexto de sistemas quânticos de muitos corpos fechados e fora do equilíbrio são extremamente promissoras e abrangentes. Experimentos com átomos ultrafrios e íons aprisionados têm demonstrado ser ferramentas poderosas para investigar a dinâmica de equilíbrio e termalização desses sistemas¹.

2.2 Modelo de Hubbard

A descrição da interação entre elétrons em um sólido frequentemente recorre ao modelo de Hubbard, um pilar na compreensão dos sistemas de muitos corpos na física da matéria condensada. Proposto por John Hubbard na década de 1960 [16], esse modelo visa esclarecer fenômenos complexos, tais como supercondutividade e magnetorresistência, em sistemas nos quais as interações entre elétrons não podem ser desconsideradas.

Para abordar sistemas fortemente correlacionados, o modelo de Hubbard o Hamiltoniano é expresso por

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} (c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + H.c.) + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}, \quad (2.1)$$

em que J é a amplitude de *hopping* entre primeiros vizinhos. Os operadores de criação e

¹A termalização refere-se ao processo de atingir o equilíbrio térmico em um sistema físico, enquanto a equilíbrio envolve a busca por um estado de equilíbrio dinâmico, mesmo em sistemas fora do equilíbrio termodinâmico. Esses conceitos são fundamentais para compreender a evolução e o comportamento de sistemas físicos em diferentes condições.

aniquilação de partículas no sítio i com spin $\sigma = \uparrow, \downarrow$ (*up, down*) são denotados por $c_{i\sigma}^\dagger$ e $c_{i\sigma}$, respectivamente. Esses operadores atuam sobre o estado de um sistema para adicionar e remover uma partícula desse estado, respectivamente. Eles satisfazem relações de comutação e anticomutação específicas, sendo que, para férmions, os operadores anticomutam enquanto, para bósons, os operadores comutam entre si. A amplitude de *hopping* representa a energia necessária para um elétron saltar de um átomo para outro, sendo que um valor menor indica menos mobilidade das partículas, enquanto um valor maior indica mais mobilidade dos portadores.

O termo U está diretamente associado à repulsão ou atração local entre elétrons no mesmo sítio, ou seja, à interação de Coulomb entre partículas no mesmo sítio (*on-site*) de um retículo cristalino. Esse termo é essencial para capturar os efeitos de correlação entre partículas. A densidade de carga para um spin σ no sítio j é avaliada por $n_{j\sigma} = c_{j\sigma}^\dagger c_{j\sigma}$, enquanto $n_j = n_{j,\uparrow} + n_{j,\downarrow}$ representa a densidade total.

Assim, uma análise detalhada desses termos e de sua influência mútua é crucial para uma compreensão abrangente do comportamento dos sistemas fortemente correlacionados. No entanto, para abordar ainda mais complexidades e fenômenos físicos, é necessário considerar extensões do modelo de Hubbard que incorporem outros efeitos, proporcionando uma visão mais completa e realista dos sistemas de muitos corpos na física da matéria condensada. Isso permite a investigação de uma variedade de fenômenos emergentes e a compreensão de novos regimes de comportamento quântico.

A técnica de átomos frios em redes ópticas, citada anteriormente, oferece amplas possibilidades para a análise do modelo de Hubbard. Os ajustes experimentais necessários estão associados à mobilidade das partículas entre sítios vizinhos (*hopping*), que pode ser controlada variando-se a profundidade do poço óptico da rede; além disso, a interação local U (que surge quando dois elétrons ocupam o mesmo sítio) pode ser ajustada por meio de um campo externo que modula a ressonância de Feshbach [17]. A Figura 4 apresenta um esquema de um potencial periódico gerado por lasers, onde átomos simulam elétrons em uma rede cristalina, sujeitos ao *hopping* e à interação *onsite*.

A presença de dois férmions ocupando o mesmo sítio em uma rede cristalina caracteriza a dupla ocupação. A dupla ocupação está intimamente ligada à relação U/J e ao tipo de comportamento eletrônico que o sistema exhibe, refletindo a competição entre a energia de interação e a energia de tunelamento. Em sistemas com baixa dupla ocupação, sugere-se que os férmions evitam ocupar os mesmos estados quânticos devido a fortes interações repulsivas. Esse fenômeno ocorre em regimes onde a energia de interação é significativamente maior do que a energia de tunelamento ($U \gg J$), resultando na formação de um estado isolante de Mott. Isso leva à localização dos elétrons e à formação de um *gap* de energia proibida, devido à forte interação entre os elétrons no material, mesmo que sua estrutura eletrônica preveja que ele deveria ser um condutor. Por outro lado, em sistemas

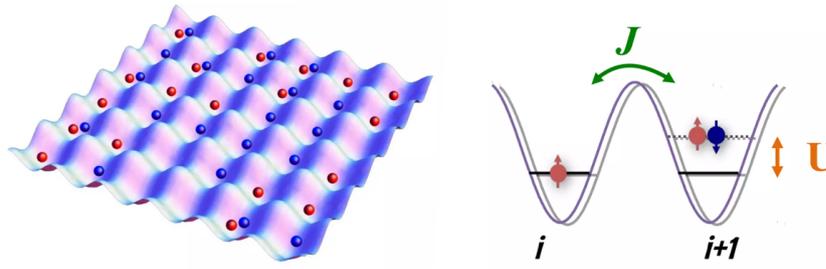


Figura 4 – Figura esquemática à esquerda, representado uma rede óptica. No diagrama à direita temos a representação dos termos do modelo de Hubbard: J , que descreve o salto de um átomo do sítio i para o sítio $i + 1$, e U , que é a energia para que dois átomos ocupem o mesmo sítio da rede. Figura retirada de [18].

com alta dupla ocupação ($U \ll J$), pode-se indicar que as interações entre os férmions são menos significativas em relação ao tunelamento, favorecendo a mobilidade dos férmions e o comportamento metálico.

Muitos trabalhos na literatura demonstram que sistemas de muitos corpos podem ser simulados utilizando “sólidos artificiais”, tanto em sistemas bosônicos [12, 13, 15, 19] quanto em fermiônicos [17, 20–22]. A seguir, selecionamos e discutimos alguns exemplos que servem como motivação para os estudos numéricos apresentados nesta dissertação.

Utilizando o modelo de Hubbard, um trabalho publicado por Robert Jördens e colaboradores em 2010 relatou a primeira observação de um isolante de Mott em um gás de férmions, uma realização até então alcançada apenas com gases de bósons [17]. O experimento foi realizado utilizando um potencial óptico tridimensional para aprisionar átomos de ^{40}K , previamente resfriados por evaporação, em um sistema parcialmente preenchido. Observou-se que, para $U \gg J$, a ocupação de cada sítio permaneceu mais estável e menos sujeita a mudanças abruptas. Isso resultou em uma redução significativa na dupla ocupação dos sítios, indicando átomos localizados devido às fortes interações repulsivas.

Além disso, o artigo analisa a influência do aumento de partículas no sistema, onde foi acrescentado um potencial químico na equação 2.1, para que se possa variar o preenchimento na rede. Analisando a ocupação da rede em cada sítio, verificou-se que o aumento de partículas levou ao aumento da dupla ocupação, eventualmente levando o sistema a um estado incompressível. Foi identificado um modo excitado com um *gap* de energia característico de um isolante de Mott [17]. As interações intensas entre os átomos criam um estado altamente correlacionado, onde as propriedades emergentes, como a supressão da condutividade, não podem ser bem descritas pelas teorias tradicionais de equilíbrio termodinâmico. Essas teorias assumem um estado de equilíbrio com propriedades uniformes, mas falham em capturar a complexidade das interações dinâmicas presentes em sistemas fortemente correlacionados, como o isolante de Mott.

Além disso, o artigo analisa a influência do aumento de partículas no sistema, onde foi acrescentado um potencial químico na equação 2.1, para que se possa variar o preenchimento na rede. Analisando a ocupação da rede em cada sítio, verificou-se que o aumento de partículas levou ao aumento da dupla ocupação, eventualmente levando o sistema a um estado incompressível. Foi identificado um modo excitado com um *gap* de energia característico de um isolante de Mott [17]. As interações intensas entre os átomos criam um estado altamente correlacionado, onde as propriedades emergentes, como a supressão da condutividade, não podem ser bem descritas pelas teorias tradicionais de equilíbrio termodinâmico, como a teoria do gás ideal e a teoria de bandas. Essas teorias assumem um estado de equilíbrio com propriedades uniformes, mas falham em capturar a complexidade das interações entre partículas presentes em sistemas fortemente correlacionados, como o isolante de Mott.

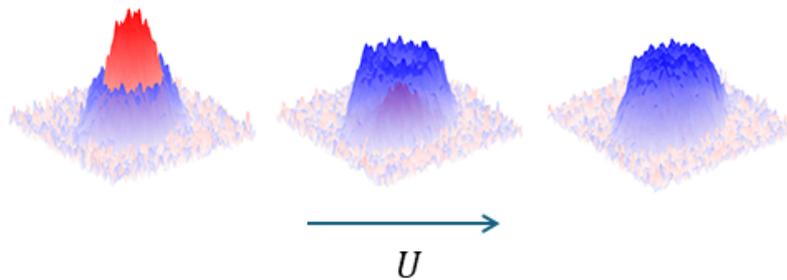


Figura 5 – Imagens da densidade local de um gás atômico de Fermi-Hubbard 2D em um potencial de rede óptica, detectando separadamente locais de ocupação simples (azul) e dupla (vermelho). A interação U aumenta da esquerda para a direita. Figura adaptada de [23].

O artigo desenvolvido por Eugenio Cocchi e colaboradores em 2015 [20] discute a detecção e caracterização de estados de ocupação dupla e simples em um modelo de Hubbard bidimensional com átomos fermiônicos ultrafrios em uma rede óptica. Utilizando técnicas de espectroscopia de frequência de rádio e imagens de absorção, os pesquisadores conseguiram detectar e analisar a distribuição de densidades nos sítios, identificando átomos ocupando sítios individualmente e também com a ocupação dupla. Para valores elevados de U em relação a J , o sistema passa por uma transição de fase para um isolante de Mott. A partir de imagens da densidade local do sistema (Figura 5), podemos identificar sítios com ocupação simples (em azul) e com ocupação dupla (em vermelho). À medida que a interação U aumenta, o sistema tende a exibir propriedades de isolante de Mott, resistindo à condução de cargas.

2.2.1 Modelo de Hubbard Estendido

Esta seção explora uma extensão do modelo de Hubbard que incorpora interações entre primeiros vizinhos. Ao incluir tais interações, o modelo estendido oferece uma descrição mais detalhada dos fenômenos observados experimentalmente, permitindo uma exploração mais abrangente dos comportamentos emergentes e uma compreensão mais aprofundada dos regimes de comportamento quântico.

Para estender o modelo de Hubbard e considerar a interação entre primeiros vizinhos, é necessário adicionar um termo ao Hamiltoniano original (equação 2.1). A equação que incorpora esse termo de interação estendida de Hubbard é definida como

$$H = -J \sum_{i,\sigma} (c_{i\sigma}^\dagger c_{i+1\sigma} + h.c.) + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} + V \sum_i n_i n_{i+1}. \quad (2.2)$$

O termo V reflete a interação entre partículas nos sítios próximos da rede cristalina, influenciando a energia do sistema.

Em uma abordagem unidimensional de rede fermiônica, podemos ilustrar os efeitos dessas interações na cadeia. Na Figura 6, J representa a amplitude de *hopping*, descrevendo o movimento das partículas entre os sítios. O termo U , conhecido como interação *on-site*, indica a energia necessária para a ocupação dupla de um sítio. Por outro lado, a interação V reflete a energia requerida para a ocupação dos primeiros vizinhos no sistema (*nearest neighbors*).

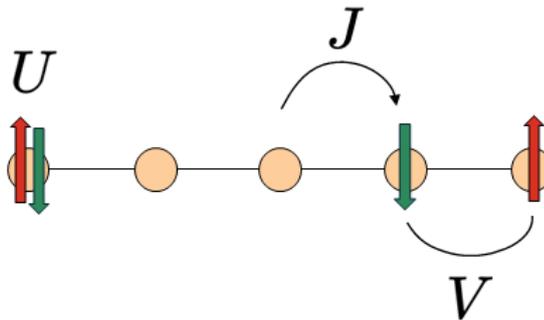


Figura 6 – Esquema de ocupações numa cadeia, onde os círculos representam os sítios da rede e as setas o spin equivalente

: J representa o movimento das partículas; U é a energia para dupla ocupação; e V é a energia para ocupação entre primeiros vizinhos.

Podemos citar o trabalho de Xiqiao Wang e colaboradores [22], que analisa uma possível nova classe de redes artificiais projetadas para simular o modelo de Fermi-Hubbard estendido em materiais fortemente correlacionados, que considera a interação entre partículas em sítios vizinhos além do termo local. A proposta do estudo envolve o

uso de uma rede bidimensional de pontos quânticos dopantes em silício, construída de forma precisa átomo por átomo com microscopia de tunelamento por varredura (STM, do inglês *Scanning Tunneling Microscopy*).

O Hamiltoniano que descreve a energia total do sistema é dado por $H = H_\mu + H_J + H_U$. H_μ representa a energia local, incluindo o potencial químico no sítio e interações elétron-íon fixas; H_J descreve o *hopping* de elétrons entre os sítios, utilizando a tensão V_{DS} que permite a movimentação de elétrons através do dispositivo; e H_U inclui os termos de energia U (*on site*) e V (*nearest neighbors*), controlados por tensão aplicada na amostra. A configuração dos *gates* ($V_{G1,G2}$) pode influenciar os valores de U e V ao alterar a energia de ligação dos elétrons e a distribuição de carga, modificando as interações entre os pontos quânticos. Essa formulação do Hamiltoniano permite modelar e simular propriedades físicas como condutividade, formação de bandas de Hubbard e outras características do modelo de Fermi-Hubbard estendido.

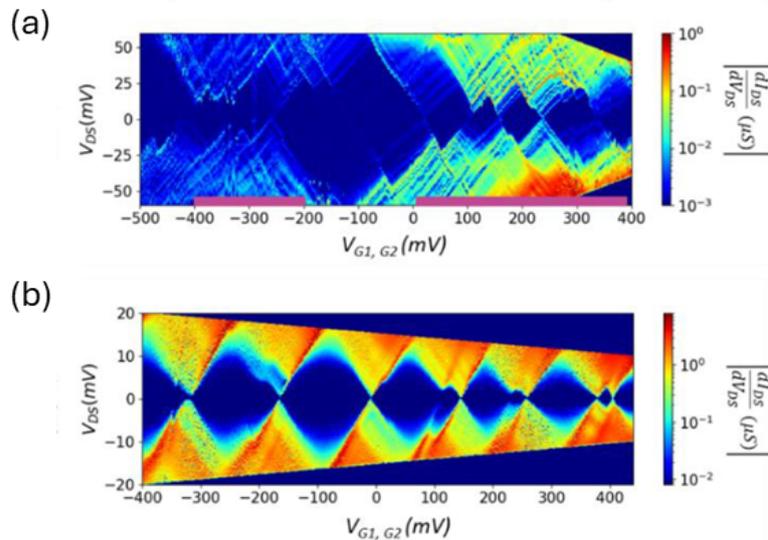


Figura 7 – Condutância diferencial a $T = 10$ mK mostrando a transição para comportamento mais metálico com constante de rede reduzida, (a) $a_1 = 6.6 \pm 0.3$ nm e (b) $a_2 = 4.1 \pm 0.3$ nm. Figura retirada de [22].

Os pesquisadores investigaram como a condutância e o comportamento eletrônico variam com a alteração da constante de rede a do sistema. A análise revela diferentes comportamentos eletrônicos conforme as dimensões são ajustadas. Os painéis (a) e (b) da Figura 7 mostram como a condutância de um sistema varia em função das tensões aplicadas. No diagrama (b), a presença de diamantes de Coulomb² bem definidos que se fecham em tensões pequenas indica um comportamento metálico. Além disso, a distribuição

²Os diamantes de Coulomb são regiões em um gráfico de condutância que representam estados de carga estáveis em sistemas de pontos quânticos. Cada diamante corresponde a um número fixo de elétrons no sistema, e a borda do diamante indica as condições de tensão em que a adição ou remoção de um elétron se torna energeticamente favorável. A forma dos diamantes é influenciada por interações elétricas e pela

quase contínua de estados sugere uma fase metálica, caracterizada por maior liberdade de movimento dos elétrons. Por outro lado, no painel (a), a forma irregular dos diamantes de Coulomb e a presença de grupos de pequenos diamantes separados por grandes diamantes (esses últimos correspondem a um análogo do *gap* de Mott) indica uma fase isolante onde a mobilidade dos elétrons é limitada. Dessa forma, o principal resultado está associado à capacidade dos pontos quânticos em simular o comportamento de sistemas fermiônicos fortemente correlacionados, como os descritos pelo modelo de Fermi-Hubbard.

2.3 Protocolo *Quench*

O entendimento dos sistemas de muitos corpos é crucial para descrever fenômenos complexos que surgem das interações coletivas entre inúmeras partículas. Esses sistemas exibem características emergentes que podem ser exploradas sob diferentes condições. Enquanto os sistemas em equilíbrio são bem compreendidos e descritos por operadores quânticos e suas médias em estados estacionários estáveis, os sistemas fora do equilíbrio enfrentam perturbações que podem levar a comportamentos dinâmicos complexos. Estes incluem transições de fase, respostas não lineares a estímulos externos e a formação de estados metastáveis. Além disso, os sistemas fora do equilíbrio frequentemente exibem propriedades emergentes como dissipação de energia, auto-organização espontânea e a criação de gradientes de temperatura ou concentração [24].

Os avanços experimentais têm impulsionado o estudo desses sistemas, especialmente com a capacidade de manipular e controlar sistemas quânticos complexos em laboratórios, como átomos frios e íons aprisionados, permitindo a simulação direta de sistemas quânticos isolados fora do equilíbrio [25]. Simultaneamente, o desenvolvimento de técnicas teóricas avançadas, como a teoria da informação quântica e a termodinâmica quântica, tem proporcionado novas perspectivas para entender os processos dinâmicos em sistemas de muitos corpos [26, 27].

Um *quench* quântico refere-se a uma mudança nos parâmetros de um sistema, como seu Hamiltoniano ou as interações associadas. Esse protocolo é conhecido como uma perturbação dependente do tempo, na qual uma situação de não-equilíbrio é induzida a partir dessas perturbações, revelando propriedades emergentes e comportamentos não triviais.

Para esse processo, preparamos inicialmente um sistema em um estado qualquer de um Hamiltoniano H . No caso dessa dissertação o estado preparado será o fundamental $|\psi_0\rangle$ de um Hamiltoniano H_0 . Durante o protocolo de *quench*, o sistema evoluirá de acordo com um novo Hamiltoniano H , aplicado devido à alteração de um parâmetro. Essa propagação

configuração do sistema, refletindo a presença de bloqueios de Coulomb, onde a adição de um elétron é impedida por repulsões elétricas.

pode ser influenciada por diversos fatores, como a natureza do *quench*, as propriedades do Hamiltoniano e as condições iniciais do sistema. A resposta ao *quench* pode ocorrer em taxas significativamente diferentes, dependendo do número de átomos e da complexidade das interações no sistema [28]. A aplicação do *quench* também pode ser definida pelo período de tempo em que a perturbação ocorre. No caso de um *quench* instantâneo, descreve-se uma mudança praticamente instantânea nas condições do sistema. Um *quench* finito refere-se a uma mudança gradual nas condições de um sistema ao longo de um intervalo de um τ curto em relação a outras taxas inersas associadas. Temos também um *quench* adiabático, um processo em que um sistema físico é alterado de forma lenta o suficiente para que ele permaneça em seu estado fundamental durante toda a evolução.

O estudo de *quenches* é interessante devido à sua capacidade de investigar a dinâmica de não equilíbrio de sistemas, permitindo a exploração de transições de fase quânticas, a compreensão de comportamentos universais em pontos críticos, a análise da dinâmica quântica e a revelação de fenômenos emergentes em sistemas complexos. Por meio de *quenches*, é possível explorar fenômenos não triviais, como a evolução de estados quânticos, interferência e emaranhamento, fornecendo *insights* valiosos sobre a complexidade da física de muitos corpos em regimes de não equilíbrio.

A função de onda de um sistema fechado se propaga no tempo de acordo com $|\psi(t)\rangle = e^{iHt} |\psi_0\rangle$. No caso de um *quench* finito, H pode ser dependente do tempo, apresentando uma situação mais complexa [29]. Além disso, o *quench* pode ser classificado como global ou local, dependendo de a alteração afeta todo o sistema ou apenas uma pequena região. Os *quenches* são utilizados como ferramentas experimentais e teóricas para estudar a dinâmica de equilíbrio, termalização e transições de fase, sendo fundamentais para avançar nosso conhecimento sobre a dinâmica de sistemas complexos e suas propriedades [25].

Para estudar a dinâmica de não equilíbrio e o transporte em uma simulação do modelo de Hubbard, Ulrich Schneider e colaboradores prepararam um estado fermiônico de átomos de ^{40}K em uma rede tridimensional [30]. O *quench* foi realizado alterando o valor da interação U , permitindo que os átomos se movessem livremente na rede óptica. Com essa alteração, os átomos puderam reagir às variações na densidade e interagir entre si, resultando em uma dinâmica complexa de transporte de excitações durante seu movimento.

O resultado do experimento revelou que a dinâmica da expansão é praticamente a mesma, independente do sinal da interação entre os átomos, seja ela repulsiva ou atrativa. A presença de interações entre átomos, mesmo que pequenas, transforma a expansão em um processo bimodal, com uma redução significativa na velocidade de expansão em comparação com o caso de átomos não interagentes, que exibem um transporte balístico. Essa descoberta sugere uma simetria dinâmica para sistemas repulsivos e atrativos, dependendo apenas do módulo da interação, mas não de seu sinal. A simetria em relação a valores de U positivos

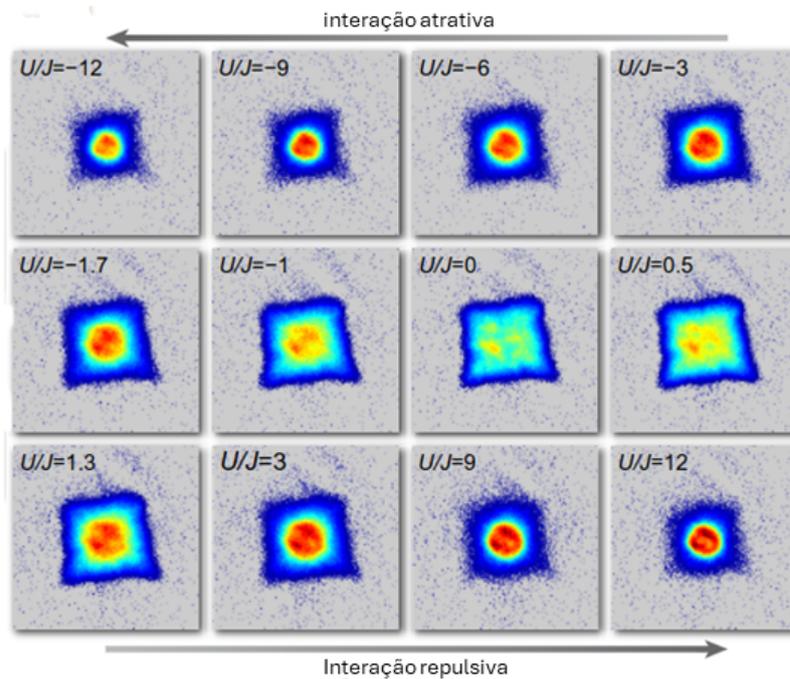


Figura 8 – Medidas da densidade local dos átomos fermiônicos na rede óptica 25 ms após a retirada do potencial de confinamento, para diferentes valores de interação. A escala de cores em vermelho representa uma alta dupla ocupação no sistema e azul uma alta ocupação simples. Figura adaptada de [30].

e negativos pode ser observada na Figura 8.

Podemos observar um exemplo de um trabalho experimental em cadeias bosônicas [31], onde foi analisada a evolução temporal das correlações espaciais após a profundidade da rede ter sido abruptamente reduzida (seta à direita na Figura 9 (a)). Isso corresponde a uma diminuição da relação U/J de um valor inicial no regime de Mott para um valor mais próximo do valor crítico, levando o sistema a uma condição de não equilíbrio. Assim, após o *quench* quântico, foi observado que uma função de correlação segue um cone de luz efetivo em função do tempo e da posição (Figura 9 (b)). Os autores desse estudo discutem a evolução temporal do sistema a partir da formação de dois tipos de quase-partículas: holon e doublon, que correspondem à ausência de partícula e à dupla ocupação no sítio, respectivamente. Essas quase-partículas são representadas pelos círculos azuis e vermelhos, respectivamente, na Figura 9 à esquerda.

Essas quase-partículas emergem emaranhadas e se propagam em direções opostas ao longo da cadeia, introduzindo novas correlações no sistema. É possível observar que as quase-partículas transportam correlações com uma velocidade finita através do sistema, resultando no cone de luz efetivo. Isso demonstra a existência de uma velocidade máxima de propagação de correlações, descrita pelo limite de Lieb-Robinson [31], que impõe restrições à rapidez com que as correlações podem se espalhar em sistemas de muitos corpos com interações de curto alcance. Esse limite fornece uma estrutura para entender a dinâmica e

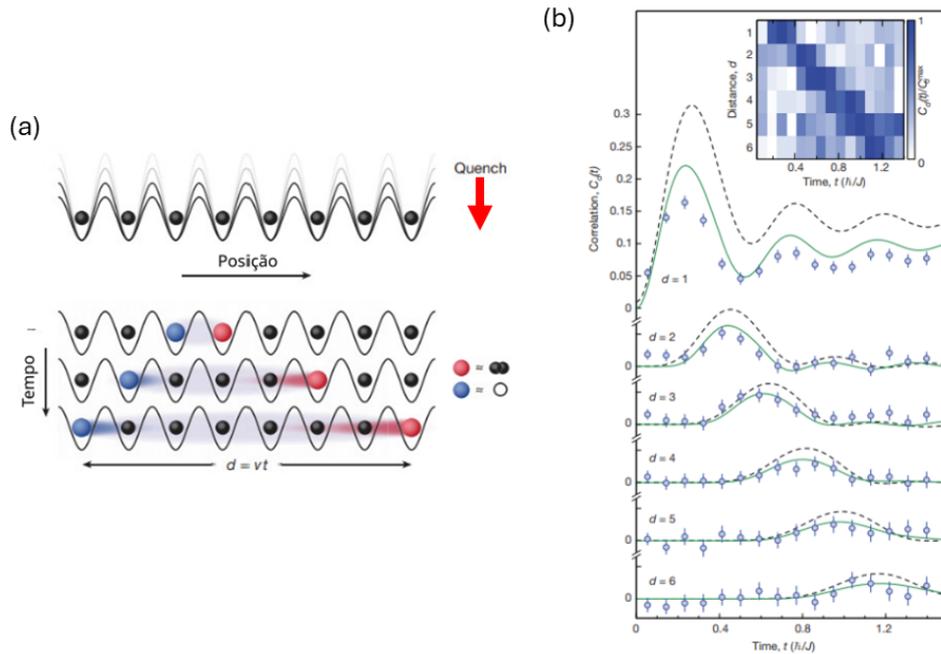


Figura 9 – (a) Esquema da criação de propagação de quase-partículas: doublon (bola vermelha) e holon (bola azul). (b) Gráfico da função correlação paridade do número de ocupação entre sítios a uma distância d , relacionada à propagação das duas quase-partículas; vemos um pico na função correlação que se propaga para distâncias maiores conforme o tempo evolui, seguindo um cone de luz efetivo. Resultados experimentais e numéricos são identificados pela bola azul e linha contínua verde, respectivamente. As linhas pretas tracejadas são resultados de um modelo analítico e reproduzem qualitativamente a dinâmica.

Figura adaptada de [31].

a propagação de informações em sistemas complexos.

Embora as excitações de quase-partículas induzam correlações adicionais no sistema, sua propagação nem sempre se manifesta de maneira a caracterizar um cone de luz efetivo. Isso pode ser observado no exemplo de um sistema unidimensional com semipreenchimento de férmions sem spin [32], descrito por um modelo mais simples que o dado na equação 2.2, onde escolhemos um dos spins (por exemplo, pela aplicação de um campo magnético), implicando que o grau de liberdade de spin não precisa ser considerado; assim, o modelo contém os termos de energia cinética, proporcional ao hopping J , e de interação entre primeiros vizinhos V . Nesse caso, após um *quench* abrupto cruzando a criticalidade não se observa necessariamente a estrutura de um cone de luz [32], como observado no caso interior.

O sistema descrito acima apresenta uma transição de fase quântica quando o termo de interação V alcança $V_c = 2$ (com unidade de energia $J = 1$), indo de um regime metálico ($V < V_c$) para um regime com ordenamento CDW (*Charge Density Wave*), que ocorre com a aplicação de um *quench* para um valor $V > V_c$ [32]. Durante essa transição, a

simetria translacional da rede é espontaneamente quebrada, resultando em uma distorção na distribuição de densidade de carga ao longo da rede. A presença da fase CDW no sistema modelado está relacionada à interação repulsiva entre os férmions que atinge o valor crítico V_c , influenciando significativamente as propriedades do sistema.

No caso da dinâmica após um *quench* quântico para o modelo acima [32], a função de correlação de densidade de carga

$$C_{i,j}(t) = \langle n_i(t)n_j(t) \rangle - \langle n_i(t) \rangle \langle n_j(t) \rangle \quad (2.3)$$

está representada na Figura 10 (escala de cores) em função da distância $|i - j|$ entre os sítios e do tempo t . Nesse painel, não é possível identificar um horizonte de eventos relacionado à propagação das quase-partículas produzidas pelo *quench*. Os círculos brancos destacados no painel caracterizam a formação de paredes de domínio, que são melhor identificados ao se olhar para a distribuição local $\langle n_i \rangle$, que é mostrada na Figura 10 (b) para $t = 5$. Podemos observar, pelas setas vermelhas, que as paredes de domínio, em que sítios vizinhos têm ocupações próximas, são formadas nas extremidades da cadeia. Nesse contexto, mesmo que o sistema não atinja completamente a fase CDW devido à rapidez do *quench*, ele pode apresentar domínios de densidade de carga e a formação de paredes de domínio.

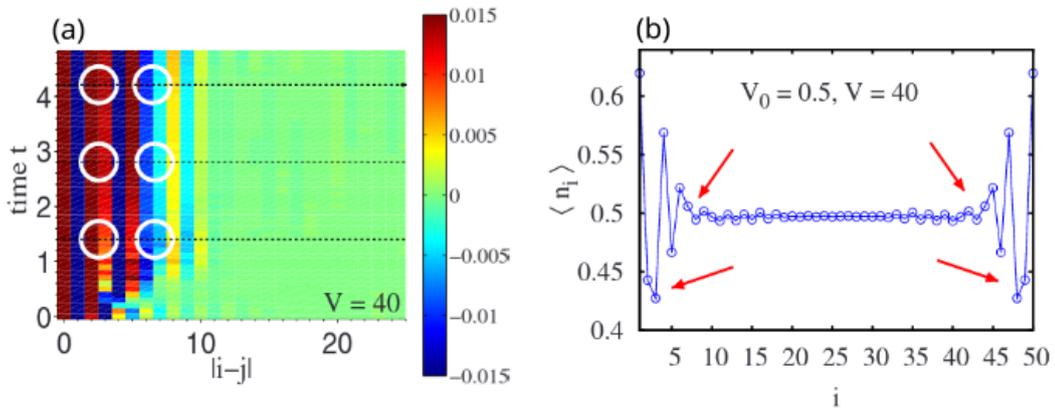


Figura 10 – Resultados para um sistema preparado com $V_o = 0.5$, sujeito a um *quench* abrupto para $V = 40$. O painel (a) mostra a evolução temporal das funções de correlação, enquanto o painel (b) exhibe a distribuição das densidades locais em $t = 5/t_h$. Os círculos em branco em (a) indicam as *phase slips*, correspondentes às paredes de domínio discutidas. As setas vermelhas em (b) apontam para as paredes de domínio que separam modulações diferentes do regime CDW. Figura adaptada de [32].

Experimentalmente a influência das interações entre primeiros vizinhos V em um gás de Férmions 2D no modelo 1D tV foi investigada a partir de um *quench* em que

essas interações não-locais foram alteradas [33]. Utilizando uma rede óptica, foi possível manipular as interações entre os átomos, que só podem se mover ao longo do eixo x , ou seja, os átomos estão “congelados” nas outras direções, como representado no esquema da Figura 11. Foi também aplicado um campo magnético forte de modo a selecionar os spins dos átomos.

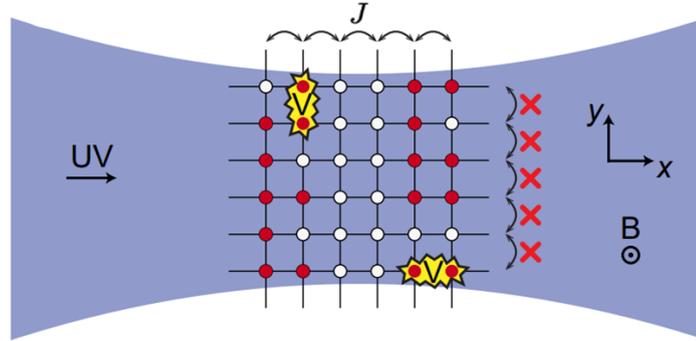


Figura 11 – Representação de montagem experimental de rede óptica com interação não-local entre os átomos. Um feixe no eixo x provoca uma separação efetiva em cadeias unidimensionais. Figura adaptada de [33].

Para a descrição da dinâmica deste sistema de gás de Fermi com fortes interações não-locais, os autores utilizaram o modelo de férmions sem spin, considerando o *hopping* J e interações entre elétrons em sítios vizinhos V , de acordo com os graus de liberdade do sistema. O sistema foi preparado em um estado CDW e, em seguida, o *quench* foi aplicado ao sistema, alterando a intensidade das interações entre os átomos, o que perturbou o equilíbrio do sistema, levando-o a evoluir dinamicamente. Podemos observar na Figura 12 o perfil da densidade evoluindo ao longo do tempo para diferentes valores finais da interação V . Após o *quench* observou-se uma mudança na dinâmica da onda de densidade de carga. Podemos ver que com a diminuição de V há um “derretimento” do perfil característico da fase CDW, que por sua vez é observado quando V é grande.

O resultado principal do estudo é que para fortes interações não-locais a decadência do ordenamento CDW desacelera, e o sistema retém uma memória de seu estado inicial por mais tempo, demonstrando a influência crucial dessas interações na evolução da dinâmica do sistema fora do equilíbrio, para a compreensão de fenômenos de relaxamento. Logo, esse estudo experimental fornece uma base para futuras investigações de dinâmica fora do equilíbrio de sistemas quânticos com interações não-locais.

Utilizando *quenches* quânticos, podemos estudar fenômenos emergentes presentes em sistemas bosônicos e fermiônicos, onde excitações de quase-partículas induzem correlações adicionais no sistema [31], mas com uma propagação que nem sempre se manifesta como um cone de luz [32]. Vimos que, para analisar a dinâmica do sistema devido a um *quench*, é interessante observar o que ocorre no caso *pós-quench*, focando nos fenômenos

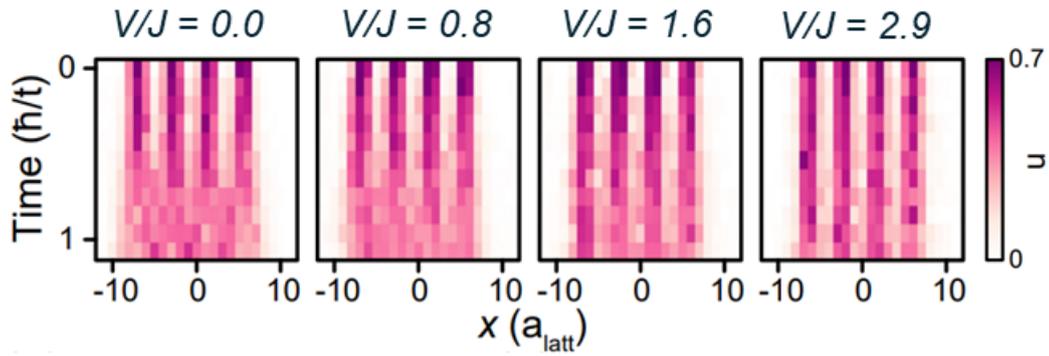


Figura 12 – Evolução no tempo do perfil de densidade de carga (escala de cores) ao longo da posição espacial x após um *quench* realizado a partir de um estado inicial com ordenamento CDW. Imagem retirada de [33].

emergentes que surgem em consequência da perturbação [30]. Com a análise *pós-quench*, podemos entender como o processo de relaxamento do sistema ocorre de acordo com as interações presentes [33] e também auxiliar na detecção de transições de fase em sistemas de átomos frios [34]. Este entendimento é crucial para avançar na criação e manipulação de estados quânticos complexos.

2.4 Entropia de Emaranhamento

A entropia de emaranhamento é uma medida fundamental que quantifica o grau de correlação quântica entre subsistemas de um sistema quântico bipartido. Em particular, ela é definida a partir da matriz de densidade reduzida [35]. Essa quantidade desempenha um papel crucial na compreensão de transições de fases quânticas, pois sua dinâmica pode revelar informações sobre a estrutura de correlações e a natureza do estado quântico do sistema. Durante processos de *quench*, onde os parâmetros do Hamiltoniano são alterados, a entropia de emaranhamento pode exibir comportamentos distintos, refletindo diferentes regimes de evolução, como o instantâneo, finito e adiabático. A análise da entropia de emaranhamento, portanto, não apenas fornece *insights* sobre a dinâmica de sistemas quânticos, mas também serve como uma ferramenta poderosa para investigar fenômenos universais, como o mecanismo de Kibble-Zurek³, que descreve como sistemas quânticos se comportam ao atravessar pontos críticos.

Na [35] a evolução do emaranhamento no modelo de Ising em um campo transversal [35], descrito por

³A teoria de Kibble Zurek descreve como sistemas quânticos podem produzir defeitos topológicos quando são levados a atravessar um ponto crítico durante uma variação temporal dos parâmetros do Hamiltoniano [35].

$$H(t) = -\frac{1}{2} \sum [S_i^z S_{i+1}^z + h(t) S_i^x], \quad (2.4)$$

onde

$$h(t) = h_i + \text{sgn}(h_f - h_i) \frac{t}{\tau}, \quad (2.5)$$

sendo τ a taxa inversa característica do *quench* e $t \in [0, t_f]$, com $t_f = |h_f - h_i| \tau$. Este modelo consiste em uma cadeia unidimensional de spins interagindo com seus vizinhos e influenciados por um campo magnético h aplicado perpendicularmente ao plano dos spins. Os autores analisaram *quenches* que transicionam o sistema de uma fase paramagnética para uma fase ferromagnética. Durante esse processo de *quench*, foi avaliada a evolução da entropia de emaranhamento, que é descrita por

$$S(t) = -\sum_n \lambda_n(t) \log_2 \lambda_n(t), \quad (2.6)$$

sendo $\{\lambda_n(t)\}$ o conjunto de autovalores da matriz densidade reduzida do sistema evoluído, formada por dois subsistemas engloba metade dos sítios da cadeia.

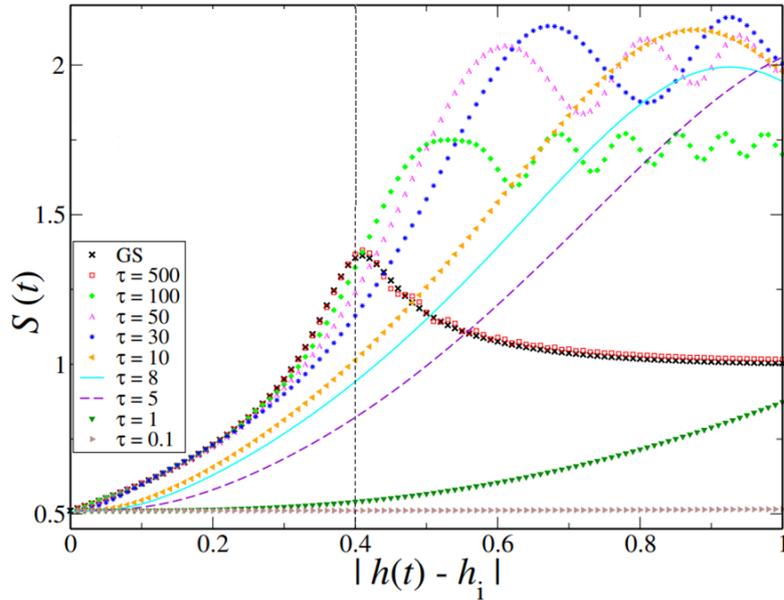


Figura 13 – Dinâmica da entropia de emaranhamento para $h_i = 1.4$ e $h_f = 0.4$. Para diferentes valores de τ (linha tracejada identifica a posição do ponto crítico). Figura adaptada de [35].

O gráfico da Figura 13 apresenta os resultados para a entropia de emaranhamento para diferentes taxas inversas τ . Podemos comparar os resultados de $S(t)$ com aqueles para

o estado fundamental instantâneo de equilíbrio ⁴, descrito pela curva GS. Para um *quench* instantâneo ($\tau = 0.01$), os resultados de $S(t)$ permanecem “congelados” em seu valor inicial, como esperado. À medida que o valor de τ aumenta, a entropia de emaranhamento cresce além de seu valor inicial, assumindo um comportamento oscilatório após cruzar a criticidade (linha vertical no gráfico), a entropia alterna entre máximos e mínimos com frequência variável. Para tempos suficientemente longos ($\tau = 500$), observa-se um caráter adiabático na evolução, pois $S(t)$ segue a curva GS. A variação linear do campo magnético h ao longo do tempo, com diferentes taxas inversas τ , resulta em três regimes distintos observados pela entropia de emaranhamento [35].

Podemos ilustrar como a entropia de emaranhamento se desenvolve em cenários de *quench* global e *quench* local. Embora esses resultados não possam ser generalizados, eles podem ser contrastados para destacar suas diferenças. Vamos considerar um estudo em que os autores investigam a evolução temporal da entropia de emaranhamento após um *quench* global sobre uma cadeia de spin em um campo transversal h . Em um *quench* global como esse, a perturbação afeta todos os sítios da rede simultaneamente. Conforme mostrado na Figura 14, após o *quench*, a entropia de emaranhamento aumenta linearmente com o tempo e eventualmente satura em um valor proporcional à intensidade do campo final [36].

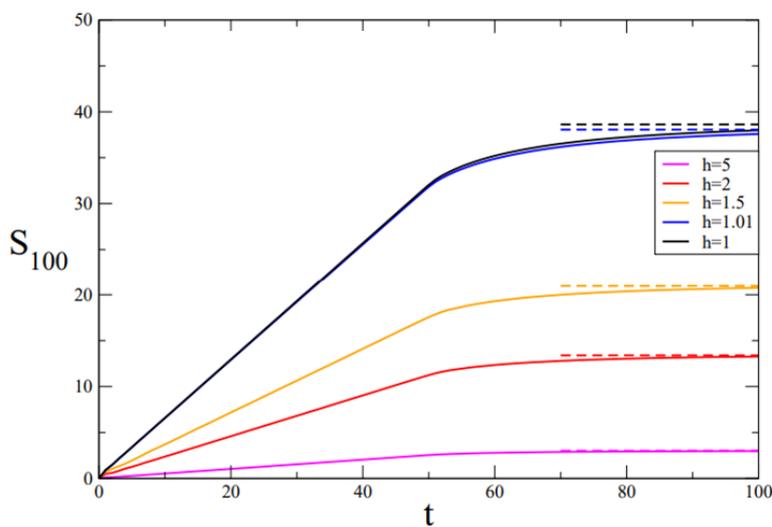


Figura 14 – Gráfico da evolução temporal da entropia de emaranhamento após um *quench* global, para um subsistema com $l = 100$ sítios, após uma mudança abrupta do campo h . As linhas pontilhadas representam os resultados assintóticos para $t \rightarrow \infty$. Figura adaptada de [36].

A evolução do emaranhamento em um sistema de férmions após um *quench* local é ilustrada na Figura 15. Neste estudo considera-se um sistema formado por elétrons

⁴Para cada instante de tempo e seu respectivo valor de h , podemos encontrar o estado fundamental correspondente, ao qual nos referimos por estado fundamental instantâneo de equilíbrio.

livres em uma cadeia infinita com preenchimento parcial, inicialmente contendo um defeito na forma de uma ligação enfraquecida. Analisa-se a evolução temporal da entropia de emaranhamento de uma seção da cadeia que inclui o defeito em seu interior ou em sua fronteira, após a remoção do defeito. O *quench* local, a entropia de emaranhamento segue a forma $S(t) \sim \ln(t)/t$ ao longo do tempo, alcançando um valor máximo proporcional ao tamanho da partição considerada (l), $S_{\max} \sim \ln(l)$ [37]. Após atingir S_{\max} , como observado na Figura 15, ocorre um longo período de relaxamento do emaranhamento em direção ao valor esperado para um sistema não perturbado, em contraste com o *quench* global do exemplo anterior, onde a entropia de emaranhamento atinge uma saturação aproximando-se dos valores assintóticos para $t \rightarrow \infty$.

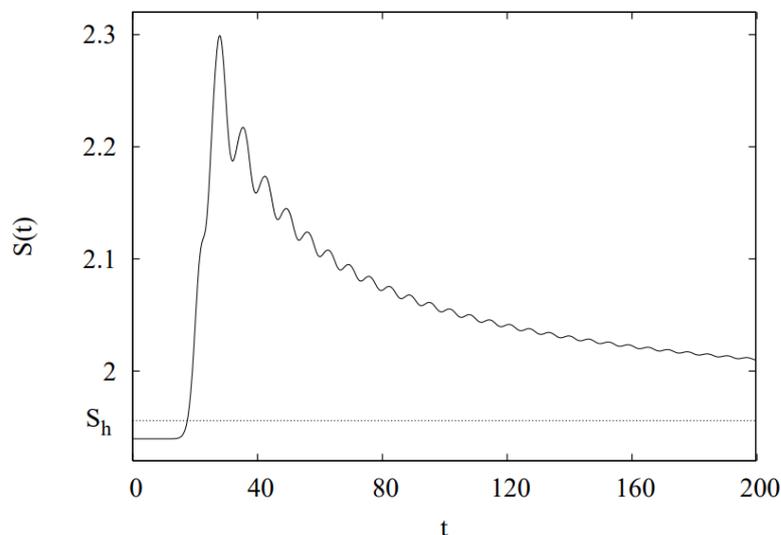


Figura 15 – Evolução temporal da entropia de emaranhamento em um *quench* local. A entropia de emaranhamento foi calculada para um subsistema de tamanho $l = 40$ sítios. Observa-se um aumento abrupto seguido por um lento relaxamento em direção ao valor de equilíbrio para um sistema homogêneo. Figura retirada de [37].

2.5 Resultados motivacionais

Para o desenvolvimento desta dissertação, tivemos como principal referência os resultados obtidos em 2022 por Isaac Martins Carvalho para sua tese de doutorado, *Quenches em sistemas interagentes unidimensionais: formação de ordenamentos de carga e spin* [6]. Esses resultados também deram origem a um artigo publicado na *Physical Review B* [7]. Com isso, nesta seção apresentaremos os resultados mais relevantes para a continuidade do trabalho, considerando que maiores detalhes serão apresentados nos capítulos de Metodologia e de Resultados.

O modelo estudado é o de Hubbard estendido unidimensional, dado na equação 2.2 submetido a *quenches* interagentes. O modelo de Hubbard estendido dependente do tempo é descrito por um Hamiltoniano que possui contribuições de *hopping* entre primeiros vizinhos com amplitude J e interações no sítio $U(t)$ e entre primeiros vizinhos $V(t)$, ambas dependentes do tempo. O artigo analisa a evolução temporal do sistema durante o *quench* de tempo finito nas interações, levando o sistema a estados finais com fases correlacionadas de densidade de spin (SDW) ou de densidade de carga (CDW). O estudo investiga a transição para os estados ordenados SDW ou CDW a partir de um estado inicial não interagente ($U_0 = V_0 = 0$) analisando a evolução em diferentes regimes temporais: instantâneo, intermediário e adiabático. Mais especificamente, os autores consideraram que as interações aumentam no tempo, ou seja, $V(t) = V_o + \text{sgn}(V_f - V_o) \frac{t}{\tau_V}$ e $U(t) = U_o + \text{sgn}(U_f - U_o) \frac{t}{\tau_U}$, sendo τ_V e τ_U as taxas inversas de variação nas interações V e U , respectivamente. Mais informações estão destacadas na seção 4.1.

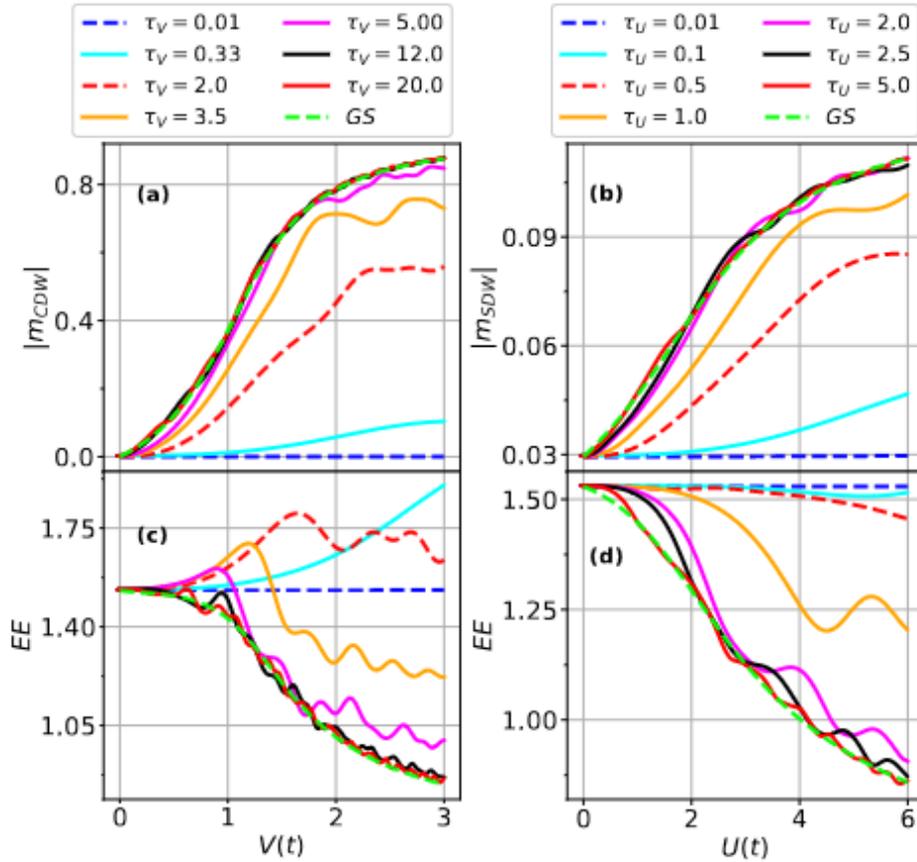


Figura 16 – Parâmetros de ordem (a) CDW e (b) SDW e entropia de emaranhamento nos painéis (c) e (d), em função das interações $V(t)$ ou $U(t)$, dependendo se o *quench* é direcionado ao ordenamento CDW ou SDW, respectivamente. Imagem retirada de [7].

Utilizando os parâmetros de ordem $m_{CDW} = \frac{1}{L} \sum_i (-1)^i (\langle n_i \rangle - 1)$ para o ordena-

mento CDW e $m_{SDW} = \frac{1}{L} \sum_i (-1)^i \langle s_i^z \rangle$ para o ordenamento SDW, é possível analisar quão próximo do ordenamento esperado o sistema está. Na Figura 16 (a) e (b), são apresentados os parâmetros de ordem calculados em função das interações $V(t)$ e $U(t)$, para diferentes taxas inversas τ_V ou τ_U (dadas em unidade de hopping^{-1}) de perturbação, sendo $V_f = 3$ e $U_f = 6$. As linhas tracejadas verdes representam os parâmetros de ordem do estado fundamental (GS) correspondente ao Hamiltoniano instantâneo de equilíbrio, com $V_{eq} = V(t)$ e $U_{eq} = U(t)$, para cada t . Ao comparar as diferentes curvas em (a), é possível concluir que para $\tau_V = 12.0$ o m_{CDW} calculado a partir do estado evoluído se aproxima da curva do estado fundamental de equilíbrio, indicando que é necessário $\tau_V \geq 12.0$ para que o sistema alcance o regime adiabático. Em contraste, para $\tau_V = 0.01$, o *quench* é instantâneo e o estado não evolui praticamente. Também é possível observar o regime intermediário nos *quenches* com $0.01 < \tau_V < 12.0$, onde o parâmetro de ordem aumenta, mas não segue o valor do estado fundamental, indicando que o estado evoluído inclui estados excitados.

A evolução temporal geral de m_{SDW} na Figura 16 (b) é semelhante à de m_{CDW} . Porém, $\tau_U = 2.5$ já é suficiente para garantir o regime adiabático nesse segundo caso. Uma análise do perfil de carga e spin ao longo dos *quenches* quânticos pode explicar qualitativamente essas diferenças de tempo. Na Figura 17, observamos o comportamento dos valores médios do spin local $\langle s_i^z \rangle$ e da carga $\langle n_i \rangle$ em função dos sítios i da cadeia, exibidos para diferentes taxas inversas τ_V e τ_U . Para comparação, são apresentados os perfis de spin e carga correspondentes ao estado fundamental de $H(t = 0)$ e $H(t = t_f)$. Para valores de τ pequenos, correspondentes aos *quenches* instantâneos, os perfis de carga e spin se mantêm congelados, semelhantes ao estado inicial. Nos *quenches* adiabático, observamos perfis que seguem o estado fundamental de equilíbrio com V_f ou U_f , característicos das fases CDW e SDW, respectivamente. O rearranjo de cargas em direção ao ordenamento CDW é dominado pela interação de vizinhos mais próximos V , resultando em uma periodicidade na ocupação de sítios com uma dupla ocupação e um sítio vazio. Como consequência, os *quenches* em direção ao ordenamento CDW precisam ser mais lentos do que aqueles em direção ao ordenamento SDW, para que as excitações produzidas pelos rearranjos de carga sejam suprimidas.

Para quantificar como as correlações não-locais entre partes do sistema evoluem ao longo dos *quenches* aplicados, foi avaliada a entropia de emaranhamento ($EE = S(t)$) entre bipartições de tamanhos semelhantes. A evolução é apresentada na Figura 16 (c) e (d). Nos casos instantâneos, a entropia não evolui a partir dos valores iniciais. Nos *quenches* para a fase CDW, observamos que a entropia aumenta para $\tau_V = 0.33$, $\tau_V = 2.0$, $\tau_V = 3.5$ e $\tau_V = 5.0$. No primeiro caso, a entropia aumenta monotonicamente, no segundo caso aumenta até um valor máximo e estabiliza e nos dois últimos casos, há um aumento menor, seguido por uma diminuição repentina em direção ao estado fundamental. Dessa forma, esses resultados sugerem que, durante um *quench* no regime de tempo intermediário, antes de se aproximar do ordenamento CDW, os sistemas acessam

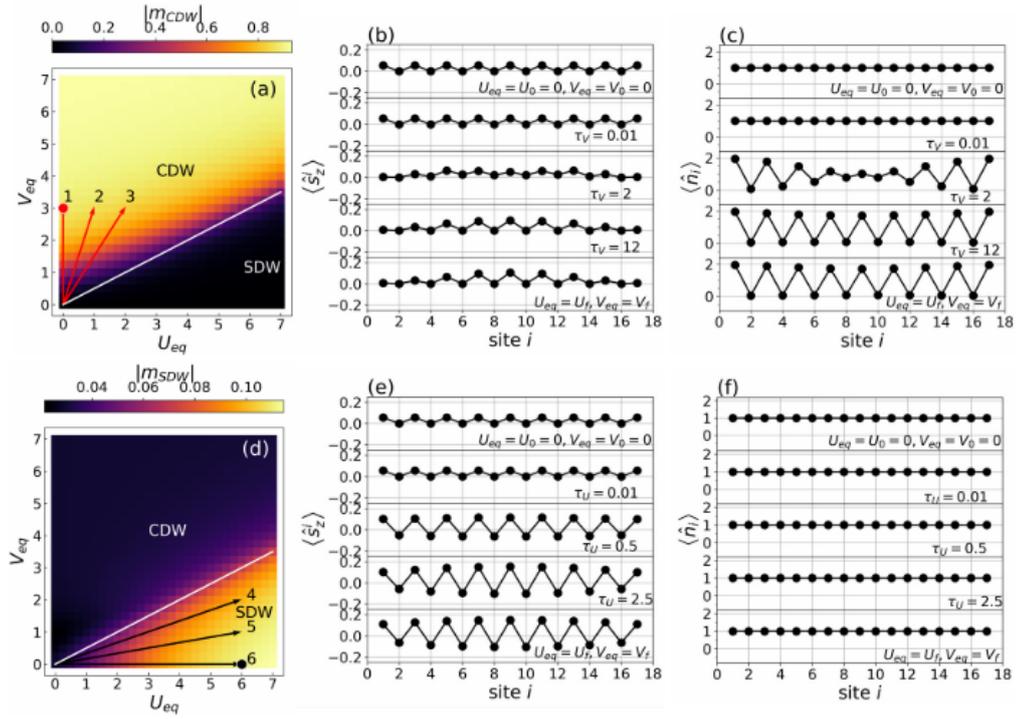


Figura 17 – Valores de equilíbrio (em cores) para os parâmetros de ordem (a) CDW e (d) SDW. A magnetização local e a densidade de carga em função do sítio da rede i correspondentes ao estado final do *quench* #1 são mostradas nos painéis (b) e (c), enquanto o comportamento do estado final do *quench* #6 é representado nos painéis (e) e (f). Além de resultados referentes ao estado final para *quenches* com diferentes taxas inversas (τ_V e τ_U), também podemos observar os perfis correspondentes aos estados inicial e final, que são de equilíbrio. Imagem retirada de [7].

estados excitados [35]. Por outro lado, não foi encontrado nenhum aumento significativo da entropia de emaranhamento durante a formação da fase SDW. Essas observações sugerem que a formação do ordenamento CDW ao longo de um *quench* linear requer um rearranjo maior do sistema do que a formação da SDW.

Os resultados obtidos neste estudo evidenciam a transição do sistema para as fases de ordenamento de carga (CDW) e de ordenamento de spin (SDW) no contexto do modelo de Hubbard estendido. Além disso, a análise da entropia de emaranhamento ao longo do *quench* revela um comportamento complexo do sistema durante sua evolução temporal. A diminuição do emaranhamento conforme o sistema se aproxima do regime adiabático destaca a relação entre a entropia e a transição do sistema de um estado metálico para um estado isolante ordenado. Novas investigações são abordadas nesta dissertação, onde queremos responder quão robusta é a fase atingida imediatamente após o *quench*. Para isso nos concentramos em uma análise mais detalhada do comportamento da entropia em sistemas quânticos *pós-quench*, bem como nos parâmetros de ordem associados.

3 Metodologias

A descrição física de um sistema está intrinsecamente ligada às suas interações, possibilitando uma análise direcionada de fenômenos específicos sem comprometer a generalidade. Em materiais sólidos, onde as partículas apresentam um arranjo ordenado, surgem propriedades emergentes, tais como transições de fase e supercondutividade, quando as interações entre as partículas não podem ser desprezadas. Em situações onde tais interações são minimizadas, um modelo de partículas independentes pode oferecer uma descrição eficaz dos fenômenos. No entanto, soluções para sistemas de muitos corpos interagentes não podem ser obtidas por meio de análises de partículas isoladas; elas requerem modelos efetivos que conectem os graus de liberdade às condições de interesse.

Para uma análise abrangente do comportamento do sistema, é essencial realizar um rastreamento do espectro de energia, calculando as contribuições de todas as configurações possíveis. O operador Hamiltoniano, que descreve a energia total de um sistema, desempenha um papel crucial nesse processo, que está diretamente relacionado com a determinação de seus autovalores e autovetores. Comumente, utiliza-se um modelo para Hamiltoniano e sua diagonalização exata pode se tornar altamente complexa em sistemas de grande escala devido à multiplicidade de interações e variáveis envolvidas. Portanto, métodos computacionais, como simulações numéricas, são frequentemente empregados para obter esses valores eficientemente.

À medida que o tamanho do sistema aumenta, a descrição do estado quântico torna-se progressivamente mais complexa devido ao rápido crescimento do espaço de Hilbert. Por exemplo, em modelos simples, como o da cadeia de spin $1/2$, as matrizes utilizadas possuem dimensões de 2^L , onde L é o comprimento da cadeia. Para modelos com mobilidade eletrônica, como no modelo de Hubbard unidimensional, a dimensão do espaço de Hilbert é geralmente expressa como 4^L . De modo geral, o espaço de Hilbert escala com d^L , onde d é a dimensão local associada ao número de configurações possíveis por sítio. Consequentemente, as manipulações computacionais lidam, em princípio, com matrizes de tamanho $d^L \times d^L$, evidenciando a complexidade à medida que o sistema se expande. Além disso, à medida que novos parâmetros de interação são incorporados ao modelo, a complexidade das matrizes aumenta ainda mais, exigindo abordagens computacionais cada vez mais sofisticadas para análises precisas.

Para resolver essa questão, são usados métodos que exploram as simetrias dos sistemas quânticos. Além disso, as metodologias numéricas empregam aproximações específicas para solucionar problemas. Em particular, para obter com alta precisão o estado fundamental de sistemas unidimensionais (1D), é utilizado o grupo de renormalização da

matriz densidade (DMRG, do inglês *Density Matrix Renormalization Group*). Um método variacional que a partir de truncagens seletivas do espaço de Hilbert que reduz a carga computacional dos cálculos.

Nesta dissertação, estudamos o comportamento de um sistema unidimensional isolado ou desacoplado do banho térmico no limite de temperatura zero, descrito pelo modelo de Hubbard estendido. Para determinar os resultados de equilíbrio, utilizamos o método DMRG para encontrar o estado fundamental do sistema. Para investigar o cenário de não-equilíbrio gerado pelo *quench*, aplicamos o t-DMRG que descreve a evolução temporal no DMRG e apresenta maior complexidade numérica devido à necessidade de lidar com estados excitados.

Este capítulo é dividido em várias seções. A seção 3.1 realiza uma análise do algoritmo DMRG, explorando o desenvolvimento matemático de MPS. Em seguida, na seção 3.2, discutimos o algoritmo DMRG via MPS. A seção 3.3 aborda a aplicação dos métodos para a otimização do problema. Finalmente, na seção 3.4, abordamos a análise dinâmica do sistema.

3.1 Grupo de Renormalização da Matriz Densidade (DMRG)

O método DMRG é uma abordagem numérica eficaz para resolver problemas de autovalores, amplamente utilizada na simulação de sistemas quânticos fortemente correlacionados, especialmente em cadeias unidimensionais. Sua principal vantagem é lidar com a enorme dimensão do espaço de Hilbert necessário para descrever esses sistemas. O DMRG consegue isso ao crescer o tamanho do sistema e rastrear uma base de representação para a função de onda, concentrando os pesos de probabilidade em poucos elementos da base, minimizando assim a perda de informação.

Naturalmente, surge a questão de quais informações descartar para simplificar nosso cálculo, decidindo quais estados da base manter para representar o estado fundamental. Na descrição original do método [38], a aproximação ocorre pela truncagem através da renormalização baseada nos autoestados da matriz densidade reduzida, formada pelas bipartições do sistema, que descreve o estado quântico do sistema físico. Esses autoestados permitem selecionar uma base de representação que minimiza a perda de aspectos físicos importantes do sistema.

A precisão do método DMRG pode ser ajustada considerando o crescimento do emaranhamento entre as bipartições do sistema, diretamente relacionado à quantidade de correlação quântica presente. A lei de área [39] estabelece que o emaranhamento entre regiões do sistema é limitado e não cresce de forma extensiva com o tamanho do sistema, especialmente em sistemas unidimensionais com interações de curto alcance. Esse

limite superior implica que a informação dos estados físicos relevantes está concentrada em pequenas porções do espaço de Hilbert, independentemente do tamanho do sistema, representado no gráfico da esquerda na Figura 18 . Podemos rastrear o emaranhamento entre bipartições com o DMRG e reduzi-lo ainda mais, gráfico à direita da Figura 18 , visando obter uma representação eficiente de um dado estado quântico. Assim, a análise e o controle do emaranhamento entre as partes do sistema desempenham um papel crucial na otimização da precisão e eficiência do método DMRG.

O DMRG, em sua formulação original [38], pode ser dividido em duas etapas: o algoritmo para sistemas infinitos e o algoritmo para sistemas finitos, que serão apresentados nas seções a seguir.

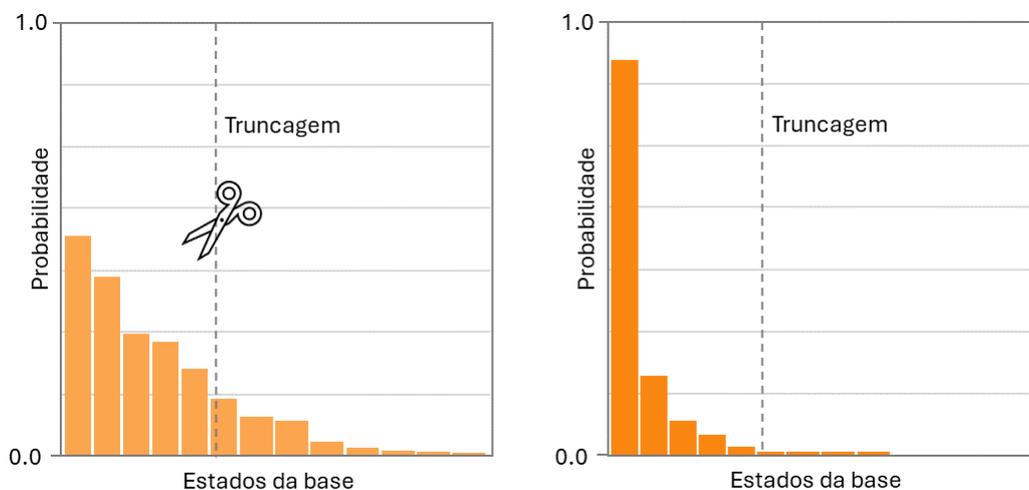


Figura 18 – Ilustração representando um processo ideal de truncagem, onde ocorre uma mudança de base na representação da função de onda. Essa mudança visa concentrar os pesos de probabilidade em poucos estados da base, reduzindo ao mínimo a perda de informação após a truncagem. A mudança de base é ilustrada da esquerda para a direita.

3.1.1 DMRG - algoritmo infinito

A abordagem fundamental do DMRG envolve começar com um sistema reduzido que pode ser resolvido de forma exata. À medida que o sistema é expandido, o espaço de Hilbert correspondente também cresce. No entanto, para manter a computação viável, é necessário truncar esse espaço de Hilbert em um tamanho limite. Esse processo de truncagem é iterativo e continua até que o tamanho desejado do sistema seja alcançado. Examinaremos mais de perto esse conceito de expansão do sistema.

Podemos analisar o algoritmo utilizado para duas iterações do DMRG para sistemas infinitos na Figura 19. Considerando o formalismo original, uma cadeia é inicialmente dividida em dois subgrupos, bloco A e bloco B como ilustrado em (a), ambos de tamanho

finito e descritos por uma base bem definida. O próximo passo está relacionado com a adição gradual de um de sítio a cada bloco, ilustrado em (b), aumentando o tamanho do sistema. A união desses grupos constrói um superbloco, agrupamento (c), cujo estado fundamental $|\Psi\rangle$ inclui todos os estados do bloco à direita e todos os estados do bloco à esquerda.

Após a adição de sítios e a formação dos superblocos, é necessário ajustar a base de representação para a matriz densidade do superbloco. Dessa forma, os maiores autovalores são selecionados para renormalizar os novos blocos, assim limita-se o crescimento do espaço de Hilbert enquanto a cadeia cresce. Esse ajuste é realizado através da truncagem, onde um número específico de estados com os maiores autovalores é mantido, preservando assim a descrição essencial do sistema. Como resultado, embora o sistema tenha aumentado, a base que descreve os estados é mantida em seu tamanho original. O superbloco é dividido em dois novos blocos para a próxima iteração, conforme ilustrado na etapa (d) da Figura 19.

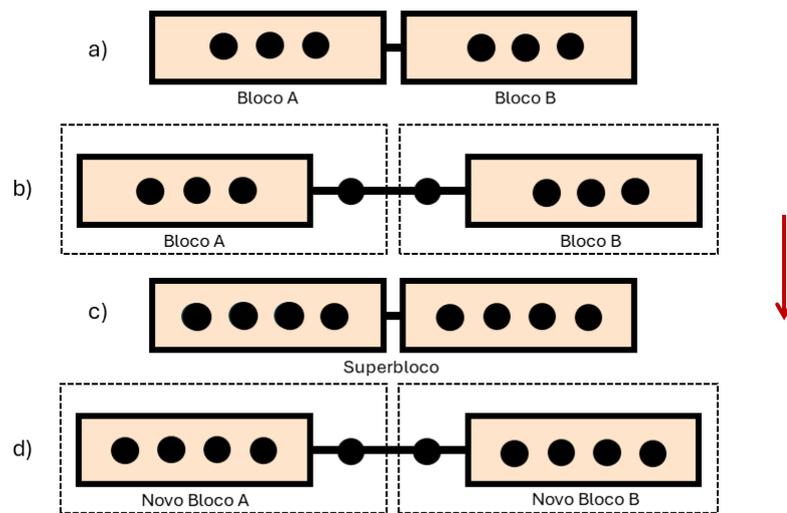


Figura 19 – A representação esquemática ilustra o processo iterativo do algoritmo infinito do DMRG. (a) Inicia-se com os blocos A e B; (b) dois sítios são adicionados; (c) resultando no superbloco que terá a sua base truncada; (d) repetição do processo de adição de dois sítios.

O algoritmo associado ao sistema infinito é projetado para expandir progressivamente o sistema a cada iteração, enquanto mantém constante o número de estados que descrevem o bloco. Isso nos permite aumentar a cadeia até atingir o tamanho desejado para analisar as correlações no sistema.

3.1.2 DMRG - algoritmo finito

No algoritmo DMRG finito, adotamos as mesmas etapas do algoritmo infinito, conforme detalhado na seção 3.1.1. Nesse contexto, o sistema cresce até atingir um tamanho pré-definido, representado por L . Quando o superbloco atinge essa magnitude, dá-se início ao processo finito, o qual compreende uma varredura sobre todos os tamanhos dos blocos (mantendo o tamanho do sistema constante), realizando assim uma renormalização a cada etapa [40].

Ao empregar o procedimento do DMRG infinito, no qual os blocos aumentam de tamanho ao adicionar um sítio a cada um deles, podemos estabelecer que o Superbloco adquira o tamanho desejado de sítios no sistema. Em contraste, no algoritmo finito, que mantém o tamanho da cadeia constante ao longo do processo, um bloco se expandirá a partir de um sítio cedido pelo bloco adjacente, que diminuirá, Figura 20. A cada alteração de tamanho é realizada a renormalização ao bloco crescido, enquanto o bloco decrescido é representado na base utilizada no algoritmo infinito do DMRG. Assim, torna-se crucial salvar e armazenar os autoestados no algoritmo infinito para uma maior eficiência computacional.

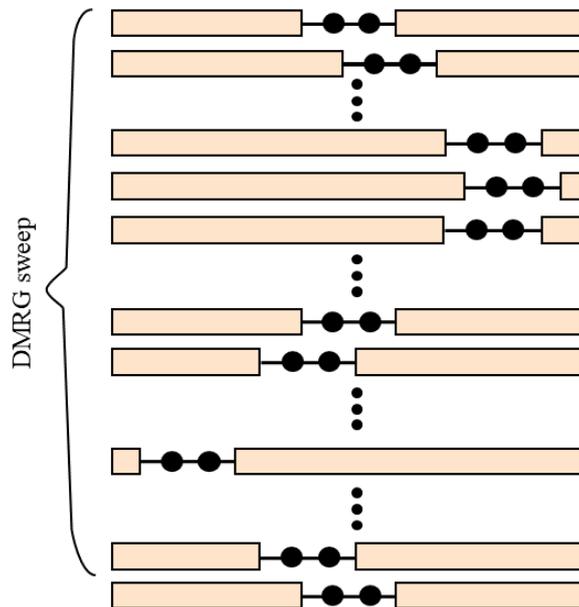


Figura 20 – Esquema de um processo de varredura no método DMRG finito. Figura adaptada de [40].

Esse processo continuará até que o bloco da direita alcance o tamanho mínimo, de um único sítio, prosseguirá no outro sentido, até que o bloco esquerdo alcance o tamanho mínimo, e finalizará quando os sítios livres retornarem ao ponto inicial, conforme

representado na Figura 20.

Denominado *sweep*, este processo deve ser repetido até que a convergência do sistema seja alcançada, ou seja, quando não houver mais redução entre um *sweep* e outro. É necessário analisar a convergência considerando o tamanho da cadeia e o método utilizado, sendo a quantidade de *sweeps* sugerida diferente para cada caso. Para mais informações, consulte a referência [41].

3.2 MPS

O formalismo original do DMRG baseia-se na matriz densidade reduzida para a renormalização do sistema. Uma versão mais recente utiliza representação dos estados por um produto de matrizes (MPS, do inglês *Matrix Product States*) [40] para parametrizar eficientemente o espaço de Hilbert, superando o crescimento exponencial do espaço de Hilbert com o comprimento do sistema. Essa abordagem permite lidar com sistemas de muitos corpos eficientemente, utilizando recursos numéricos modestos.

Nesta seção faremos uma breve apresentação da Decomposição em Valores Singulares (SVD, do inglês *Single Value Decomposition*), importante para a construção de estados MPS. Associaremos essa representação com a decomposição de Schmidt (SD, do inglês *Schmidt Decomposition*), chegando em uma representação geral e simplificada dos MPS e uma representação dos operadores por produto de matrizes (MPO, do inglês *Matrix Product Operator*), incluindo também uma representação esquemática dos tensores associados ao método. Para uma visão completa recomendamos as referências [6, 40].

3.2.1 SVD - Decomposição em Valores Singulares

A Decomposição em Valores Singulares (SVD) é uma técnica fundamental em álgebra linear que permite a fatoração de uma matriz na forma de um produto de matrizes. Esta metodologia é amplamente utilizada em diversas áreas, incluindo *machine learning* e ciências de dados, devido à sua capacidade de simplificar problemas complexos e extrair características essenciais das matrizes.

Considerando uma matriz retangular M , podemos utilizar a SVD para fatorá-la em um produto de matrizes ortonormais e uma matriz diagonal, conforme ilustrado na Figura 21. Essa técnica permite que uma matriz M de dimensões $m \times n$ seja expressa por

$$M = USV^\dagger, \quad (3.1)$$

que também pode ser representada em termos dos elementos de matriz como

$$M_{m,n} = \sum_{\sigma} U_{m,\sigma} S_{\sigma,\sigma} (V^\dagger)_{\sigma,n}, \quad (3.2)$$

sendo $U_{m,\sigma}$ e $V_{\sigma,n}^\dagger$ matrizes que possuem, respectivamente, colunas e linhas ortonormais, que satisfazem a relação $U^\dagger U = U U^\dagger = \mathbb{1}$ e $V^\dagger V = \mathbb{1}$, e S é uma matriz singular diagonal que representa os valores singulares da matriz M , normalmente organizados em ordem decrescente $s_1 \geq s_2 \geq \dots \geq s_r > 0$, em que r corresponde ao *rank* da matriz.



Figura 21 – A matriz resultante de uma SVD possui uma matriz diagonal S que é puramente não-negativa. Figura retirada de [40].

Uma aplicação prática da utilização da SVD é possibilitar uma representação eficiente de uma matriz M de *rank*- r por uma matriz M' de *rank*- r' , onde $r > r'$. Nessa redução do *rank*, os valores singulares de menor peso são descartados (por isso os valores singulares são ordenados do maior para o menor), de modo que as propriedades da matriz original sejam preservadas ao máximo após a aproximação [42]. Isso é particularmente útil para reduzir a dimensionalidade dos dados, simplificar cálculos e melhorar a eficiência computacional.

Como visto na seção 3.1, o emaranhamento é uma característica crucial para o desempenho do método DMRG. Dessa forma podemos usufruir do método de decomposição de Schmidt (SD), que corresponde a uma representação mais compacta do estado, conectada com a quantidade de emaranhamento entre as bipartições.

Nosso objetivo é obter uma representação compacta dos estados quânticos relacionada à quantidade de emaranhamento entre bipartições, para simplificar a aplicação do método DMRG. Para alcançar isso, utilizamos a SVD em conjunto com o método de SD.

Dado um sistema quântico no estado $|\Psi\rangle$, para parametrizá-lo conforme a SD, consideramos as bipartições A e B e escrevemos na forma matricial

$$|\Psi\rangle = \sum_{m,n} M_{m,n} |\Psi_m^A\rangle |\Psi_n^B\rangle, \quad (3.3)$$

em que $|\Psi_m^A\rangle$ e $|\Psi_n^B\rangle$ representam bases ortonormais que descrevem o estado dos subsistemas A e B. A matriz $M_{m,n}$ é geralmente retangular; no entanto, através da decomposição SVD, podemos obter uma matriz com valores diagonais, como ilustrado nas equações 3.1 e 3.2. Dessa maneira, podemos expressar o estado como

$$|\Psi\rangle = \sum_{m,n,\sigma} U_{m,\sigma} S_{\sigma,\sigma} (V^\dagger)_{\sigma,n} |\Psi_m^A\rangle |\Psi_n^B\rangle. \quad (3.4)$$

Combinamos os vetores da base $|\Psi_m^A\rangle$ com a matriz U e os vetores da base $|\Psi_n^B\rangle$ com a matriz V^\dagger

$$|\Psi\rangle = \sum_{\sigma} \left(\sum_m U_{m,\sigma} |\Psi_m^A\rangle \right) s_{\sigma} \left(\sum_n (V^\dagger)_{\sigma,n} |\Psi_n^B\rangle \right), \quad (3.5)$$

onde $S_{\sigma,\sigma} = s_{\sigma}$. Substituindo $|\Phi_{\sigma}^A\rangle = \sum_m U_{m,\sigma} |\Psi_m^A\rangle$ e $|\Phi_{\sigma}^B\rangle = \sum_n V_{\sigma,n} |\Psi_n^B\rangle$ na equação 3.5, podemos expressar o estado $|\Psi\rangle$ do sistema utilizando a decomposição de Schmidt, escrita como:

$$|\Psi\rangle = \sum_{\sigma}^r s_{\sigma} |\Phi_{\sigma}^A\rangle |\Phi_{\sigma}^B\rangle. \quad (3.6)$$

A representação dos estados na equação 3.6 corresponde à decomposição de Schmidt de estados bipartidos, onde as bases $|\Phi_{\sigma}^A\rangle$ e $|\Phi_{\sigma}^B\rangle$ são ortonormais dos subsistemas A e B.

A entropia de emaranhamento de von Neumann entre as bipartições pode ser expressa em termos do *rank-r* de Schmidt

$$S_{A|B}(|\Psi\rangle) = - \sum_{\sigma}^r s_{\sigma}^2 \log_2 s_{\sigma}^2, \quad (3.7)$$

onde s_{σ} é o número de valores singulares [43]. Os casos limites são: $s_1 = 1$, onde $s_{\sigma} = 0$ para $\sigma > 1$, o que implica em um caso não emaranhado que pode ser representado como um produto dos estados associados aos dois subsistemas; e $s_{\sigma} = \lambda$ para todos os valores de σ , ou seja, todos os termos possuem o mesmo peso, e portanto é uma situação de máximo emaranhamento.

Da mesma forma, podemos obter a matriz densidade reduzida que descreve o estado de um subconjunto de um sistema quântico maior. Sendo a matriz densidade $\rho = |\Psi\rangle \langle\Psi|$ e a representação de um estado $|\Psi\rangle$ a partir da SD dada pela equação 3.6, obtemos a matriz densidade reduzida da subdivisão A através do traço sobre os graus de liberdade da subdivisão B [43]

$$\begin{aligned} \rho_{A|B} &= Tr_{B|A} |\Psi\rangle \langle\Psi| \\ &= \sum_{\sigma}^r s_{\sigma}^2 |\Phi_{\sigma}^{A|B}\rangle \langle\Phi_{\sigma}^{A|B}|. \end{aligned} \quad (3.8)$$

Temos que a representação da matriz reduzida em seu formato diagonal oferece uma base de representação compacta para sistemas quânticos com bipartições.

Ao considerar o estado quântico de sistemas de muitos corpos, os quais estão diretamente associados a um extenso espaço de Hilbert, é possível realizar aproximações

através da SVD ao truncar o *rank* da representação. Dessa forma, podemos descartar os valores singulares de menor peso, permitindo-nos controlar a qualidade do truncamento. A qualidade da aproximação pode ser avaliada comparando a diferença entre a norma de Frobenius do estado original e do estado truncado e mostrou-se satisfatória [44].

3.2.2 Representação de estados como MPS

Uma técnica eficiente está relacionada com a representação do estado quântico na forma de um produto de matrizes, especialmente no caso de sistemas com muitas partículas. Essa representação é construída a partir de uma série de tensores conectados de maneira específica.

A representação por MPS consiste em expressar um estado de muitos corpos como um produto de matrizes locais. Por exemplo, em uma cadeia de spins com L sítios, um dado estado $|\Psi\rangle$ pode ser escrito como $|\Psi\rangle = \sum_{\sigma_1 \dots \sigma_L} c_{\sigma_1 \dots \sigma_L} |\sigma_1 \dots \sigma_L\rangle$, onde σ_i representa o spin no sítio i (o produto de Kronecker está omitido pela representação $|\sigma_1 \dots \sigma_L\rangle = |i_1\rangle \otimes |i_2\rangle \dots |i_L\rangle$). Realizando-se uma série de SVDs, é possível reescrever os coeficientes na forma de um produto

$$c_{\sigma_1 \dots \sigma_L} = \sum_{b_1, \dots, b_{L-1}} A_{b_1}^{\sigma_1} A_{b_1, b_2}^{\sigma_2} \dots A_{b_{L-2}, b_{L-1}}^{\sigma_{L-1}} A_{b_{L-1}}^{\sigma_L}, \quad (3.9)$$

ou, de forma mais compacta

$$c_{\sigma_1 \dots \sigma_L} = A^{\sigma_1} A^{\sigma_2} \dots A^{\sigma_{L-1}} A^{\sigma_L}, \quad (3.10)$$

absorvendo a soma dos índices que se repetem. Existem três principais abordagens para executar esse processo, as quais são descritas abaixo:

1. **Forma canônica à esquerda para decomposição MPS:** O *ansatz* MPS consiste em remodelar d^L (d é a dimensão, enquanto L representa o número de sítios) coeficientes $c_{\sigma_1 \dots \sigma_L}$ como entradas de uma matriz Ψ com dimensão $d \times d^{L-1}$, na qual realizamos uma SVD dessa matriz

$$c_{\sigma_1 \dots \sigma_L} = \Psi_{\sigma_1, (\sigma_2, \dots, \sigma_L)} = \sum_{b_1}^{r_1} U_{\sigma_1, b_1} S_{b_1, b_1} (V^\dagger)_{b_1, (\sigma_2 \dots \sigma_L)}, \quad (3.11)$$

sendo a matriz U com dimensão $(d \times d)$, V^\dagger com dimensão $(d \times d^{L-1})$ e S uma matriz diagonal de dimensão $(d \times d)$. Sendo os valores singulares não negativos, o número $r_1 \leq d$ de valores singulares fornece o *rank* de Schmidt da matriz $\Psi_{\sigma_1, (\sigma_2, \dots, \sigma_N)}$. Note que essa propriedade da matriz S permite que as matrizes U , S e V sejam substituídas por matrizes de dimensão $(d \times r_1)$, $(r_1 \times r_1)$ e $(r_1 \times d^{L-1})$, respectivamente.

A matriz U é decomposta em uma coleção de d vetores linhas com entradas $U_{\sigma_1, b_1} = L_{b_1}^{\sigma_1}$ e dimensão efetiva $(1 \times r_1)$, enquanto o produto $SV = \Psi_{b_1, (\sigma_2, \dots, \sigma_L)}$ é reorganizado na forma de uma matriz $\Psi_{(b_1 \sigma_2), (\sigma_3, \dots, \sigma_L)}$, logo

$$\Psi_{\sigma_2, \dots, \sigma_L}^{\sigma_1} = \sum_{b_1}^{r_1} E_{1, b_1}^{\sigma_1} \Psi_{(b_1 \sigma_2), (\sigma_3, \dots, \sigma_L)}. \quad (3.12)$$

A matriz $\Psi_{(b_1 \sigma_2), (\sigma_3, \dots, \sigma_L)}$ é então submetida a uma nova SVD, fornecendo

$$\Psi_{\sigma_3, \dots, \sigma_L}^{\sigma_1 \sigma_2} = \sum_{b_1}^{r_1} \sum_{b_2}^{r_2} E_{1, b_1}^{\sigma_1} E_{b_1, b_2}^{\sigma_2} \Psi_{(b_2 \sigma_3), (\sigma_4, \dots, \sigma_L)}. \quad (3.13)$$

O processo é repetido iterativamente até que $\Psi^{\sigma_1 \sigma_2 \dots \sigma_L}$ seja completamente descrita na forma de um produto de matrizes

$$\begin{aligned} c_{\sigma_1 \dots \sigma_L} &= \Psi^{\sigma_1 \sigma_2 \dots \sigma_L} = \sum_{b_1, \dots, b_{L-1}} E_{1, b_1}^{\sigma_1} E_{b_1, b_2}^{\sigma_2} \dots E_{b_{L-2}, b_{L-1}}^{\sigma_{L-1}} E_{b_{L-1}, 1}^{\sigma_L} \\ &\Psi^{\sigma_1 \sigma_2 \dots \sigma_L} = E^{\sigma_1} E^{\sigma_2} \dots E^{\sigma_{L-1}} E^{\sigma_L}. \end{aligned} \quad (3.14)$$

Podemos observar que a dimensão das matrizes E^{σ_l} aumenta em direção ao centro da cadeia. Mais especificamente, as dimensões de $E^{\sigma_1} E^{\sigma_2} \dots E^{\sigma_{L/2}} E^{\sigma_{L/2+1}} \dots E^{\sigma_{L-1}} E^{\sigma_L}$ são $(1 \times d)$, $(d \times d^2)$, \dots , $(d^{N/2-1} \times d^{N/2})$, $(d^{N/2} \times d^{N/2-1})$, \dots , $(d^2 \times d)$, $(d \times 1)$, porém as dimensões efetivas são dadas por $(1 \times r_1)$, $(r_1 \times r_2)$, \dots , $(r_{N/2-1} \times r_{N/2})$, $(r_{N/2} \times r_{N/2-1})$, \dots , $(r_2 \times r_1)$, $(r_1 \times 1)$, com $r_l \leq d^l$. Assim, as dimensões das matrizes E^{σ_l} diminuem quando os ranks de Schmidt diminuem. O *rank* da matrix $\Psi_{(b_{l-1}, \sigma_l), (\sigma_{l+1}, \dots, \sigma_L)}$ depende do emaranhamento do sistema bipartido, dividido no sítio l . Assim a eficiência da representação de um estado por MPS depende da quantidade de emaranhamento entre as subpartes do sistema; quanto menor o emaranhamento mais eficiente é a representação (menor a dimensão das matrizes E^σ).

Assim, a função de onda da equação 3.6 pode ser descrita via o *ansatz* MPS da seguinte forma:

$$|\Psi\rangle = \sum_{\sigma_1 \sigma_2 \dots \sigma_L} E^{\sigma_1} E^{\sigma_2} \dots E^{\sigma_{L-1}} E^{\sigma_L} |\sigma_1 \sigma_2 \dots \sigma_L\rangle. \quad (3.15)$$

Os estados representados na forma de MPS possuem representações gráficas simples. As representações das matrizes E^σ das bordas e do centro da cadeia, assim como de um MPS completo, podem ser vistas na Figura 22(a) e 22(b), respectivamente.

Inicialmente, os d^L coeficientes $c_{\sigma_1 \sigma_2 \dots \sigma_L}$ da função de onda são considerados um tensor com L índices, relacionados aos sítios l da cadeia, representados por linhas com extremidades livres rotuladas por $\sigma_1, \dots, \sigma_L$ como representado na Figura 23 (a). A aplicação de uma SVD introduz uma nova linha conectando as partições do

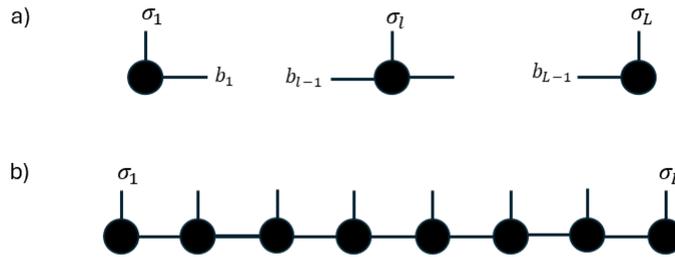


Figura 22 – (a) Representação de tensores $E_{1,b_1}^{\sigma_1}$, $E_{b_{l-1},b_l}^{\sigma_l}$ e $E_{b_{L-1},1}^{\sigma_L}$. Os círculos sólidos correspondem a sítios da rede, linhas verticais indicam índices físicos e linhas horizontais indicam índices auxiliares. (b) Representação gráfica de um estado por MPS. As linhas conectadas representam somatórios sobre os índices correspondentes. Figura adaptada de [40].

tensor, representado na Figura 23 (b). Esse processo é repetido dos sítios à esquerda para os sítios à direita, até que o estado quântico seja completamente descrito como um produto de matrizes multidimensionais, representadas pelos círculos, como na equação 3.15.

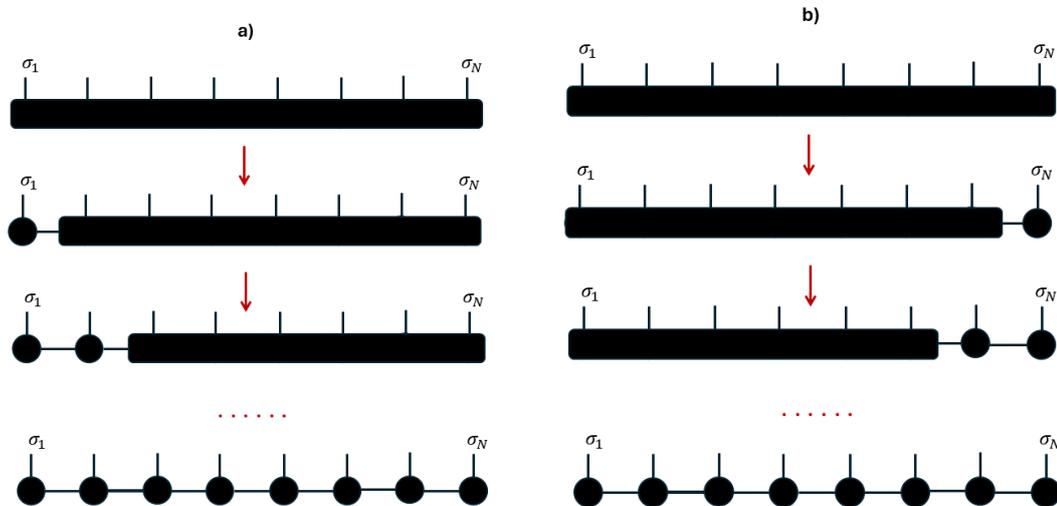


Figura 23 – Decomposição à esquerda (painel (a)) e à direita (painel (b)). A decomposição ocorre de cima para baixo, focando nos elementos mais à esquerda e mais à direita do sistema, respectivamente. Figura adaptada de [40].

Um aspecto crucial da representação MPS é sua representação conhecida como forma canônica, na qual os tensores são organizados em uma cadeia linear, e cada tensor está conectado apenas aos seus vizinhos imediatos. Essa organização é particularmente útil para sistemas unidimensionais, como cadeias de spins ou partículas em uma cadeia.

2. **Forma canônica à direita para decomposição MPS:** O processo de decompo-

sição MPS, alternativamente ao caso anterior, pode começar à direita. Nesse caso teríamos

$$\begin{aligned}
\Psi'_{(\sigma_1, \dots, \sigma_{L-1}), \sigma_L} &= \sum_{b_{L-1}} U_{(\sigma_1 \dots \sigma_{L-1}), b_{L-1}} S_{b_{L-1}, b_{L-1}} (V^\dagger)_{b_{L-1}, \sigma_L} \\
\Psi'^{\sigma_L}_{\sigma_1, \dots, \sigma_{L-1}} &= \sum_{b_{L-1}} \Psi'_{(\sigma_1, \dots, \sigma_{L-2}), (\sigma_{L-1}, b_{L-1})} D_{b_{L-1}, 1}^{\sigma_L} \\
\Psi'^{\sigma_L}_{\sigma_1, \dots, \sigma_{L-1}} &= \sum_{b_{L-1}} \sum_{b_{L-2}} U_{(\sigma_1 \dots \sigma_{L-2}), b_{L-2}} S_{b_{L-2}, b_{L-2}} (V^\dagger)_{b_{L-2}, (\sigma_{L-1} b_{L-1})} D_{b_{L-1}, 1}^{\sigma_L} \\
\Psi'^{\sigma_L, \sigma_{L-1}}_{\sigma_1, \dots, \sigma_{L-2}} &= \sum_{b_{L-1}} \sum_{b_{L-2}} \Psi'_{(\sigma_1, \dots, \sigma_{L-3}), (\sigma_{L-2}, b_{L-2})} D_{b_{L-2}, b_{L-1}}^{\sigma_{L-1}} D_{b_{L-1}, 1}^{\sigma_L} \\
&\dots \\
c_{\sigma_1 \dots \sigma_L} &= \Psi'^{\sigma_1 \sigma_2 \dots \sigma_L} = \sum_{b_1, \dots, b_{L-1}} D_{1, b_1}^{\sigma_1} D_{b_1, b_2}^{\sigma_2} \dots D_{b_{L-2}, b_{L-1}}^{\sigma_{L-1}} D_{b_{L-1}, 1}^{\sigma_L}.
\end{aligned} \tag{3.16}$$

Esse processo é repetido até que o estado $|\Psi\rangle$ seja completamente descrito em termos de D , como na forma abaixo:

$$|\Psi\rangle = \sum_{\sigma_1 \sigma_2 \dots \sigma_L} D^{\sigma_1} D^{\sigma_2} \dots D^{\sigma_{L-1}} D^{\sigma_L} |\sigma_1 \sigma_2 \dots \sigma_L\rangle. \tag{3.17}$$

A representação gráfica da decomposição MPS na forma canônica à direita é apresentada na Figura 23. A decomposição SVD começa do sítio à direita e avança em direção ao sítio à esquerda. Após completar o processo, o estado quântico é expresso como um produto de matrizes multidimensionais, simbolizadas na figura, que estão associadas às matrizes D da equação 3.17.

3. **Forma canônica mista para decomposição MPS:** É possível combinar as representações canônicas à direita e à esquerda de um estado quântico em uma abordagem mista. Por exemplo, podemos aplicar a decomposição à esquerda (equação ??) até um determinado sítio l na cadeia. Dessa forma,

$$c_{\sigma_1 \dots \sigma_L} = (E^{\sigma_1} \dots E^{\sigma_l}) S_{b_l, b_l} (V^\dagger)_{b_l, (\sigma_{l+1} \dots \sigma_L)}. \tag{3.18}$$

Em seguida, podemos remodelar a matriz V^\dagger e utilizá-la como entrada da decomposição na forma canônica à direita, dada na equação 3.16. Nesse caso, a decomposição conterá os termos dos $L - l$ sítios restantes. Podemos reescrever os coeficientes da equação 3.18 como

$$c_{\sigma_1 \dots \sigma_L} = (E^{\sigma_1} \dots E^{\sigma_l}) S_{b_l, b_l} (D^{\sigma_{l+1}} \dots D^{\sigma_L}). \tag{3.19}$$

Dessa forma, o sistema decomposto de forma canônica mista pode ser apresentado como:

$$|\Psi\rangle = \sum_{\sigma_1 \sigma_2 \dots \sigma_L} (E^{\sigma_1} \dots E^{\sigma_l}) S_{b_l, b_l} (D^{\sigma_{l+1}} \dots D^{\sigma_L}) |\sigma_1 \sigma_2 \dots \sigma_L\rangle. \quad (3.20)$$

Temos a representação diagramática na Figura 24, onde o diamante representa a matriz singular S_{b_l, b_l} e separa as decomposições em termos das matrizes E e D ; os índices b_l estão associados às linhas que conectam o diamante aos círculos.

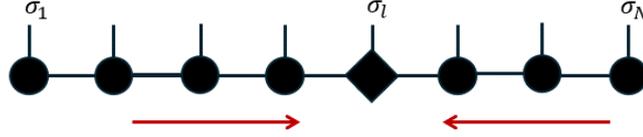


Figura 24 – Na representação diagramática da decomposição mista do MPS, o diamante representa a matriz singular no índice l . Figura adaptada de [40].

A partir da decomposição mista, temos a derivação direta da decomposição de Schmidt entre bipartições A e B englobadas. Podemos escrever para as bipartições A e B

$$\begin{aligned} |b_l\rangle_A &= \sum_{\sigma_1 \dots \sigma_l} (E^{\sigma_1} E^{\sigma_2} \dots E^{\sigma_l})_{1, b_l} |\sigma_1 \dots \sigma_l\rangle \\ |b_l\rangle_B &= \sum_{\sigma_{l+1} \dots \sigma_L} (D^{\sigma_{l+1}} D^{\sigma_{l+2}} \dots D^{\sigma_L})_{b_l, 1} |\sigma_{l+1} \dots \sigma_L\rangle. \end{aligned} \quad (3.21)$$

Como as matrizes utilizadas para realizar o cálculo SVD são ortonormais, podemos concluir que $\delta_{b_l, b'_l} = \langle b'_l | b_l \rangle_{D, E}$. Portanto, podemos escrever o estado $|\Psi\rangle$ dado pela equação 3.20 da forma

$$|\Psi\rangle = \sum_{b_l} s_{b_l} |b_l\rangle_A |b_l\rangle_B, \quad (3.22)$$

onde $s_{b_l} = S_{b_l, b_l}$. A representação do estado na forma da equação 3.22 corresponde à decomposição de Schmidt de estados puros ¹ bipartidos. Essa expressão evidencia a relação entre os valores singulares s_{b_l} e o espectro de emaranhamento, o que comprova que a eficiência da representação de um estado via MPS depende do emaranhamento entre as subpartes, função do espectro de Schmidt.

3.2.3 Operações com MPS

Vimos ser possível redefinir um estado $|\Psi\rangle$ como um produto de matrizes, conforme discutido na Seção 3.2.2, facilitando significativamente a manipulação de estados. Por

¹Um estado puro pode ser representado por um vetor $|\Psi\rangle \in H$ e é uma descrição completa de um sistema quântico. Estados puros são os estados mais básicos e fundamentais, com forma unitária $\langle \Psi | \Psi \rangle = 1$, contrastando com estados mistos, descritos por uma combinação probabilística de estados puros [45].

exemplo, a superposição de dois estados $\langle\Phi|\Psi\rangle$, descritos pelas matrizes genéricas M e \tilde{M} , pode ser escrita como

$$\langle\Phi|\Psi\rangle = \sum_{\sigma} \tilde{M}^{\sigma_L\dagger} \dots \tilde{M}^{\sigma_1\dagger} M^{\sigma_1} \dots M^{\sigma_L}, \quad (3.23)$$

representado esquematicamente na Figura 25.

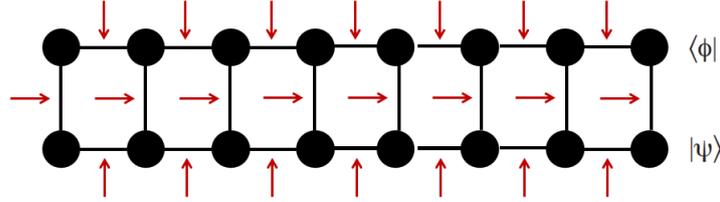


Figura 25 – Representação gráfica da superposição de dois estados, $\langle\Phi|\Psi\rangle$. Figura adaptada de [40].

Operadores também podem ser representados na forma de um produto de matrizes, como um MPO (do inglês, *Matrix Product Operator*), em analogia com a representação de estados por MPS. Considere um operador geral \hat{O} , que pode ser escrito como:

$$\hat{O} = \sum_{\sigma, \sigma'} W^{\sigma_1 \sigma'_1} W^{\sigma_2 \sigma'_2} \dots W^{\sigma_{L-1} \sigma'_{L-1}} W^{\sigma_L \sigma'_L} |\sigma\rangle \langle\sigma'| \quad (3.24)$$

e representado de forma diagramática como na Figura 26, de forma análoga à de MPS. Nesse caso, as matrizes $W_{b_{l-1} b_l}^{\sigma_l, \sigma'_l}$ são representadas por quadrados e possuem duas linhas verticais, representando dois índices físicos correspondentes aos estados de entrada e de saída, além das linhas horizontais representando índices auxiliares (painel (a)). Assim como foi possível a decomposição dos estados em produtos de matrizes, com os operadores teremos um produto final otimizado (painel (b)).

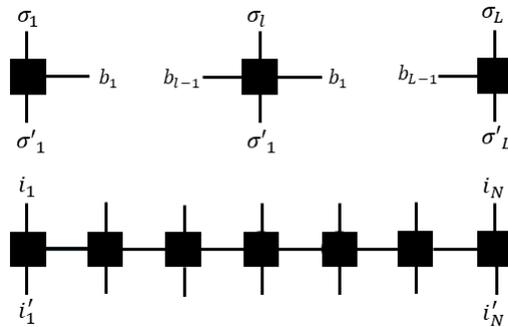


Figura 26 – Representação da decomposição de um operador, em um produto de matrizes, representadas por quadrados. Figura adaptada de [40].

A aplicação de um MPO sobre um MPS, tem a seguinte representação

$$\hat{O} |\Phi\rangle = \sum_{\sigma\sigma'} (W^{\sigma_1\sigma'_1} W^{\sigma_2\sigma'_2} \dots) (M^{\sigma'_1} M^{\sigma'_2}) |\sigma\rangle, \quad (3.25)$$

sendo que podemos definir uma matriz N como um produto das matrizes $N = WM$, para uma representação compacta

$$\hat{O} |\Phi\rangle = \sum_{\sigma\sigma'} N^{\sigma_1} N^{\sigma_2} \dots N^{\sigma_N} |\sigma\rangle. \quad (3.26)$$

Podemos representar essa operação utilizando os diagramas de matrizes (como apresentado na parte inferior da Figura 27), em (a) temos uma ilustração associada ao conectar o círculo com o quadrado, sendo uma “união” (em (b)) dos esquemas das Figuras 22 e 26. A seta indica que a aplicação de um operador em um estado resultará em um novo estado, conforme mostrado na linha superior.

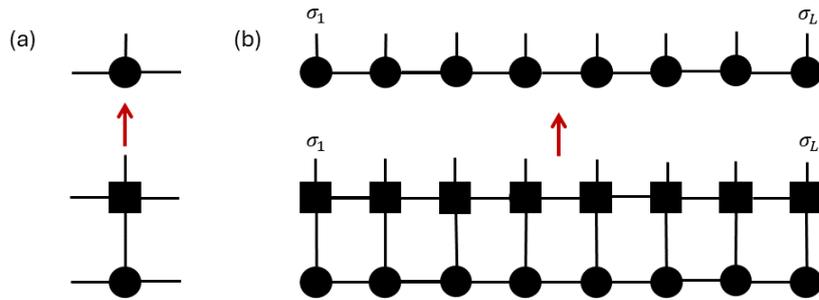


Figura 27 – Atuação de um MPO sobre um MPS. Nessa operação, soma-se sobre índices físicos correspondentes. Figura adaptada de [40].

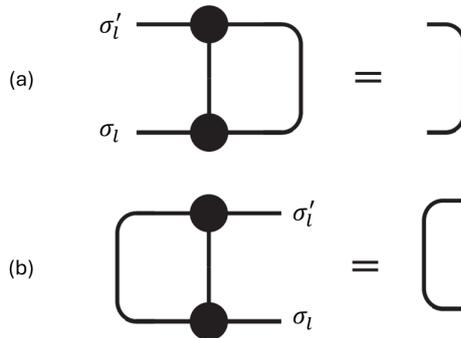


Figura 28 – Contração entre duas matrizes normalizadas à esquerda (a) e à direita (b). A contração produz δ_{b_l, b'_l} , representado por uma linha. Figura retirada de [40].

Considerando que a representação da contração entre duas matrizes normalizadas está ilustrada no diagrama da Figura 28. Podemos calcular o valor esperado de um operador local $\langle \Phi | O_l | \Phi \rangle$ atuando sobre um sítio arbitrário com índice l , representado

diagramaticamente na Figura 29. As dimensões das matrizes que representam o MPS resultante são dadas pelo produto das dimensões das matrizes correspondentes do MPS original pela dimensão do MPO. No painel (a), o MPS é decomposto na forma mista, aproveitando-se as propriedades de ortonormalidade da decomposição para contrair os índices físicos. No painel (b), utilizamos a propriedade $\delta_{b_l, b'_l} = \langle b'_l | b_l \rangle_{R,L}$ para matrizes normalizadas à esquerda ou à direita. Isso mostra que uma decomposição conveniente do estado quântico MPS pode simplificar os cálculos de observáveis no sistema.

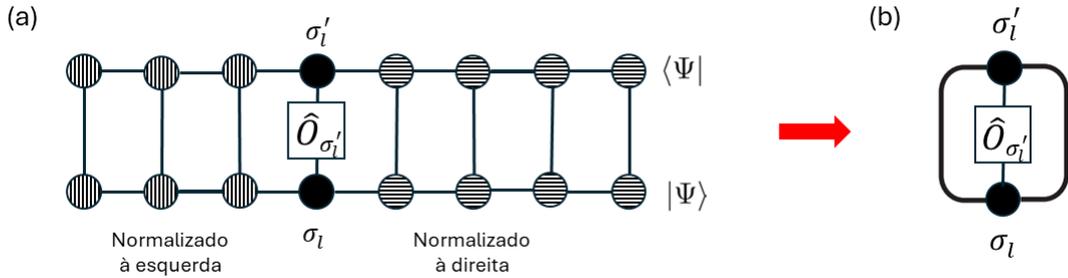


Figura 29 – Representação diagramática do valor esperado de um operador local O_l na representação MPO. Os sítios em cor preta representam o centro de ortogonalidade da decomposição mista, onde usamos as regras de contração em (a) para chegar na representação simplificada em (b). As listras diferenciam os lados. Figura adaptada de [40].

3.3 DMRG via MPS

Agora que já conhecemos o algoritmo utilizado para o cálculo de DMRG, seção 3.1, e já conseguimos descrever estados e operadores via MPS e MPO, seção 3.2, utilizaremos essas técnicas combinadas para obter um resultado otimizado numericamente. Nesta seção faremos uma relação direta com o método de DMRG para sistemas finitos (seção 3.1.2) e com o DMRG para sistemas infinitos (seção 3.1.1). O código utilizado neste trabalho foi desenvolvido considerando DMRG via MPS [6].

DMRG-MPS para sistemas infinitos

Semelhantemente ao DMRG infinito, seção 3.1, o processo básico consiste em aumentar iterativamente a cadeia, controlando o espaço de Hilbert. A representação diagramática do processo pode ser observada na Figura 30.

O sistema começa com uma cadeia de dois sítios, onde a função de onda do estado fundamental pode ser escrita como

$$\begin{aligned}
 |\Phi_1\rangle &= \sum_{\sigma_1^A \sigma_1^B} \Psi^{\sigma_1^A \sigma_1^B} |\sigma_1^A \sigma_1^B\rangle \\
 &= \sum_{\sigma_1^A \sigma_1^B} A^{[1]\sigma_1^A} S^{[1]} B^{[1]\sigma_1^B} |\sigma_1^A \sigma_1^B\rangle,
 \end{aligned} \tag{3.27}$$

Ψ corresponde à matriz representada por MPS, que contém os índices, σ_1^A e σ_1^B , relacionados a todas as configurações dos estados dos sítios. Realizando uma decomposição em valores singulares na matriz Ψ , obtemos as matrizes A e B, normalizadas à esquerda e à direita, respectivamente (os índices não relacionados aos sítios foram ocultados). O próximo passo consiste em adicionar um novo sítio nos blocos a e B, onde

$$\begin{aligned}
 |\Phi_2\rangle &= \sum_{\sigma_1^A \sigma_2^A \sigma_2^B \sigma_1^B} A^{[1]\sigma_1^A} \Psi^{\sigma_2^A \sigma_2^B} B^{[1]\sigma_1^B} |\sigma_1^A \sigma_2^A \sigma_2^B \sigma_1^B\rangle \\
 &= \sum_{\sigma_1^A \sigma_2^A \sigma_2^B \sigma_1^B} A^{[1]\sigma_1^A} A^{[2]\sigma_2^A} S^{[2]} B^{[2]\sigma_2^B} B^{[1]\sigma_1^B} |\sigma_1^A \sigma_2^A \sigma_2^B \sigma_1^B\rangle,
 \end{aligned} \tag{3.28}$$

Após l iterações a função de onda é dada por

$$|\Phi_l\rangle = \sum_{\sigma_1^A \dots \sigma_l^A \sigma_l^B \dots \sigma_1^B} A^{[1]\sigma_1^A} \dots A^{[l]\sigma_l^A} S^{[l]} B^{[l]\sigma_l^B} \dots B^{[1]\sigma_1^B} |\sigma_1^A \dots \sigma_l^A \sigma_l^B \sigma_1^B\rangle. \tag{3.29}$$

Esse processo é repetido até que o sistema atinja o tamanho desejado.

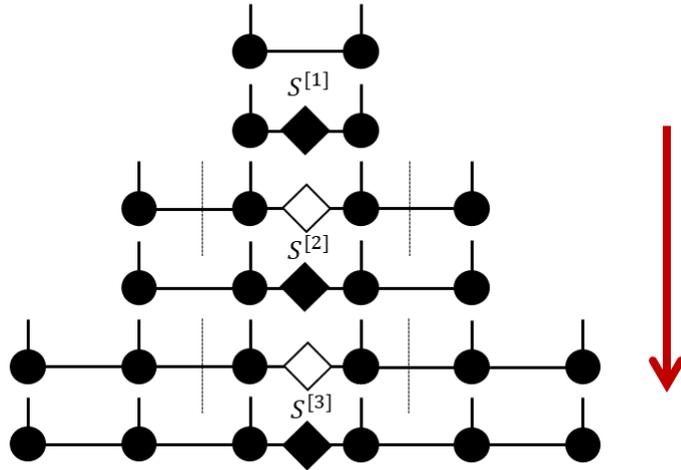


Figura 30 – Representação diagramática do processo de crescimento da cadeia usando o algoritmo infinito do DMRG. A seta indica a direção do processo. As matrizes S (representadas pelo diamante preto) estão associadas à matriz singular. A cada passo, dois sítios são adicionados na cadeia, tal que matriz 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 [40].

DMRG-MPS para sistemas finitos

O objetivo é varrer todos os sítios do sistema. Essas varreduras compartilham a mesma função dos *sweeps* realizados no algoritmo finito do cálculo DMRG tradicional (ver Figura 3.1.2).

No cálculo do estado fundamental de um dado Hamiltoniano H , procuramos o estado $|\Psi\rangle$ que minimize E , sendo

$$E = \frac{\langle \Psi | H | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle}. \quad (3.30)$$

Para alcançar a energia mínima do estado fundamental, realizamos uma busca variacional no espaço de MPS. Definimos o operador H na forma de MPO e o estado $|\Psi\rangle$ na estrutura de MPS e introduzimos um multiplicador de Lagrange, λ , e buscamos o valor extremo de

$$\langle \Psi | H | \Psi \rangle - \lambda \langle \Psi | \Psi \rangle. \quad (3.31)$$

Podemos visualizar a equação 3.31 considerando os elementos de matriz associados. Sendo o estado

$$|\Psi\rangle = \sum_{\sigma_1 \dots \sigma_N} L^{\sigma_1} \dots L^{\sigma_{l-1}} M^{\sigma_l} R^{\sigma_N} \dots R^{\sigma_N} |\sigma_1 \dots \sigma_N\rangle, \quad (3.32)$$

definimos o produto interno $\langle \Psi | \Psi \rangle$ como

$$\langle \Psi | \Psi \rangle = \sum_{\sigma_l} \sum_{b_{l-1} b_l} \sum_{b'_{l-1} b'_l} \Psi_{b_{l-1} b'_{l-1}}^A M_{b_{l-1}, b_l}^{\sigma_l^*} M_{b'_{l-1}, b'_l}^{\sigma_l} \Psi_{b_l b'_l}^B, \quad (3.33)$$

onde o produto de matrizes associadas às matrizes à esquerda (L) e à direita (R) é definido utilizando as condições de normalização como $\Psi_{b_{l-1} b'_{l-1}}^A = \delta_{b_{l-1}, b'_{l-1}}^A$ e $\Psi_{b_l b'_l}^B = \delta_{b_l, b'_l}^B$ (que foram decompostos na forma da equação 3.22, que apresentam a propriedade $\delta_{b_l, b'_l} = \langle b_l | b'_l \rangle_{A,B}$), sendo A e B as subdivisões do sistema. Com isso, podemos escrever de forma simplificada

$$\langle \Psi | \Psi \rangle = \sum_{\sigma_l} \sum_{b_{l-1} b_l} \sum_{b'_{l-1} b'_l} M_{b_{l-1}, b_l}^{\sigma_l^*} M_{b'_{l-1}, b'_l}^{\sigma_l}. \quad (3.34)$$

Assim, temos que a equação 3.31 pode ser escrita como

$$\sum_{\sigma'_l} \sum_{b'_{l-1} b'_l} \sum_{a_{l-1} a_l} L_{a_{l-1}}^{b_{l-1}, b'_{l-1}} W_{b_{l-1}, b_l}^{\sigma_l, \sigma'_l} R_{a_l}^{b_l, b'_l} M_{b_{l-1}, b_l}^{\sigma_l^*} M_{a'_{l-1}, a'_l}^{\sigma'_l} - \lambda \sum_{\sigma_l} \sum_{b_{l-1} b_l} \sum_{b'_{l-1} b'_l} M_{b_{l-1}, b_l}^{\sigma_l^*} M_{b'_{l-1}, b'_l}^{\sigma_l}. \quad (3.35)$$

Tomando o extremo da equação acima em relação a $M_{b_{l-1}, b_l}^{\sigma_l^*}$, obtemos

$$\sum_{\sigma'_i} \sum_{b'_{i-1} b'_i} \sum_{a_{i-1} a_i} L_{a_{i-1}}^{b_{i-1}, b'_{i-1}} W_{b_{i-1}, b'_i}^{\sigma_i, \sigma'_i} R_{a_i}^{b_i, b'_i} M_{a_{i-1}, a_i}^{\sigma'_i} - \lambda \sum_{b'_{i-1} b'_i} \Psi_{b_{i-1} b'_{i-1}}^A M_{b'_{i-1}, b'_i}^{\sigma_i} \Psi_{b_{i-1} b'_{i-1}}^B = 0, \quad (3.36)$$

sendo as matrizes W a representação do Hamiltoniano H em MPO, e L e R as contrações resultantes da aplicação do MPO nos MPSs nos sítios à esquerda e à direita do sítio l . Essa equação pode ser observada na representação diagramática, Figura 31. Organizando um vetor ν com os termos associados à matriz M , reescrevemos a equação 3.36 como uma relação de autovetor, $H\nu - \lambda\nu = 0$. Assim, essa equação pode ser resolvida por métodos iterativos para o cálculo do estado fundamental, como o método de Lanczos, por exemplo [29].

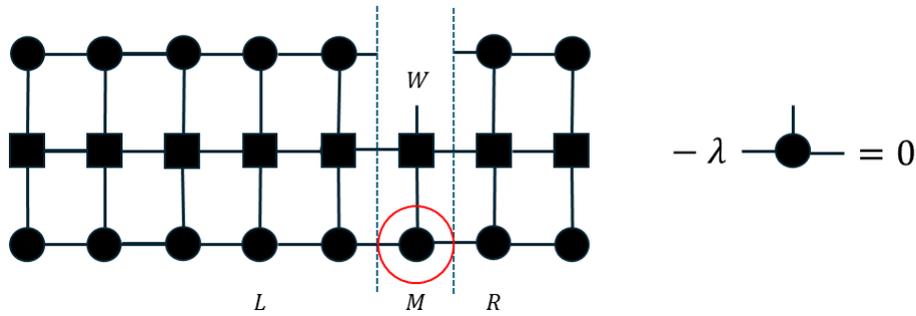


Figura 31 – Representação diagramática do problema do autovalor para otimização da matriz $M_{a_{i-1} a_i}^{\sigma'_i}$ (circulada no diagrama) no processo de rastreamento do estado de menor energia. Os índices L e R são utilizados para identificar os sítios normalizados à esquerda e à direita. Figura adaptada de [40].

Essas varreduras compartilham a mesma função dos *sweeps* realizados no algoritmo finito do cálculo DMRG tradicional. No entanto, a truncagem realizada no algoritmo finito do cálculo DMRG-MPS é um método que auxilia os cálculos computacionais, onde os autoestados da matriz densidade são representados na dimensão máxima das matrizes singulares utilizadas na decomposição em MPS. Em outras palavras, a truncagem é baseada na predefinição de um valor máximo r_{\max} para as matrizes singulares, de modo que os r_{\max} maiores valores singulares sejam mantidos. O algoritmo DMRG-MPS varre todos os sítios da cadeia, atualizando $|\Psi\rangle$ a cada iteração para se aproximar do estado de energia mais baixa. Durante as iterações, selecionamos as formas canônicas de $|\Psi\rangle$ para reduzir o número de variáveis do problema e maximizar o uso de contrações.

3.4 t-DMRG

O método conhecido como t-DMRG desempenha um papel importante na descrição da evolução temporal em sistemas quânticos. Enquanto o DMRG convencional lida com

casos estáticos, o t-DMRG aborda o aspecto dinâmico da física quântica. A ideia central do t-DMRG é resolver a equação de Schrödinger dependente do tempo, cujas soluções são representadas por

$$|\Psi(t)\rangle = e^{-itH} |\Psi(t=0)\rangle, \quad (3.37)$$

sendo o operador de evolução para $\hbar = 1$ e $|\Psi(t=0)\rangle$ um estado fundamental obtido via DMRG. Para lidar com a evolução temporal no cálculo DMRG, é necessário utilizar o método *Time-evolving Block Decimation* (TEBD). Este método é empregado para identificar e atualizar dinamicamente a região relevante, sendo convenientemente pequena em comparação ao espaço de Hilbert. O TEBD é uma abordagem formulada na linguagem de produtos de matrizes MPS que dinamicamente atualiza um estado variável no tempo, permitindo que o sistema evolua conforme o Hamiltoniano.

Ao incorporar o TEBD ao DMRG, é possível adaptar eficientemente o espaço de Hilbert ao longo do tempo, mantendo a precisão dos cálculos e evitando a explosão combinatória associada a sistemas quânticos de muitos corpos. A integração do TEBD no DMRG permite uma abordagem adaptativa para acompanhar a evolução temporal, selecionando dinamicamente, como dito acima, os estados mais relevantes. O método TEBD utiliza a decomposição de Suzuki-Trotter (S-T) do operador evolução temporal, uma técnica para aproximar a evolução temporal de sistemas quânticos de forma eficiente, decompondo o operador global em uma sequência de operadores locais mais simples [46].

Essa decomposição é baseada no teorema de Trotter, o qual estabelece que a evolução temporal de um sistema quântico descrito por um hamiltoniano H pode ser aproximada evoluindo o estado fundamental desse sistema por sucessivas aplicações de evolução:

$$|\Psi(t)\rangle = (e^{-iH\delta t} \dots e^{-iH\delta t}) |\Psi(0)\rangle, \quad (3.38)$$

onde δt é um pequeno intervalo de tempo. Nessa expressão, o operador H é decomposto em suboperadores H_1, H_2, \dots, H_i , que descrevem a interação no sítio i e em seus primeiros vizinhos $i + 1$, considerando uma cadeia de tamanho L . Em geral, os suboperadores do hamiltoniano não comutam, ou seja, $[H_i, H_{i+1}] \neq 0$. Isso implica que a ordem de aplicação pode alterar o resultado da evolução temporal, onde $e^{-iH\delta t} \neq e^{-iH_1\delta t} e^{-iH_2\delta t} \dots e^{-iH_{L-1}\delta t}$.

Para lidar com a falta de comutatividade, mencionada acima, a decomposição de Trotter alterna a aplicação dos suboperadores, dividindo o sistema como $H = H_A + H_B$, onde H_A e H_B agregam a soma dos suboperadores com índices ímpares i e pares j , respectivamente

$$H = \sum_{i \text{ ímpar}} H_{i,i+1}^A + \sum_{j \text{ par}} H_{j,j+1}^B. \quad (3.39)$$

Uma vez que não há conexão entre os termos de H_A , é possível verificar a relação $[H_{2i}, H_{2(i+1)}] = 0$, de forma análoga para H_B , onde $[H_{2i-1}, H_{2i+1}] = 0$. Portanto, o operador de evolução para índices ímpares pode ser expandido na forma $e^{-iH\delta t} = e^{-iH_1\delta t} e^{-iH_3\delta t} \dots$, similarmente para H_B .

A expansão de S-T pode ser escrita como

$$e^{-i(H_A+H_B)\delta t} = e^{-iH_A\delta t} e^{-iH_B\delta t} + O(\delta t^2). \quad (3.40)$$

Para controlar o erro de Trotter e minimizar suas consequências na simulação, é importante escolher um intervalo de tempo δt adequado e um número suficiente de suboperadores na decomposição.

4 Resultados

Este capítulo está estruturado em duas partes principais. A primeira parte é dedicada às reproduções de resultados realizadas com base no modelo tratado na tese de doutorado de Isaac Martins Carvalho, detalhado na seção 2.5. Essa seção se concentra em replicar os resultados apresentados originalmente no artigo [7], proporcionando uma base sólida para as análises subsequentes. A segunda parte do capítulo expande esses resultados, introduzindo novas análises e interpretações fundamentadas nos dados já publicados. Essa expansão permite uma compreensão mais abrangente do caso inicial, dando continuidade ao estudo de formação de ordenamentos de spin (SDW) e de carga (CDW) em cadeias unidimensionais.

O código utilizado para o desenvolvimento dos resultados apresentados a seguir foi implementado por Isaac Martins Carvalho e está disponível na plataforma GitHub [8]. A execução do código pela autora desta dissertação gerou os resultados apresentados a seguir.

4.1 Reprodução de resultados

Modelo

Neste trabalho, temos como objetivo alcançar a formação dos ordenamentos CDW e SDW no contexto do modelo de Hubbard estendido em uma cadeia unidimensional submetida a *quenches* interagentes. Para descrever o sistema, utilizamos o Hamiltoniano dependente do tempo (definido na equação 2.2 para o caso estático)

$$H(t) = -J \sum_{i,\sigma}^{L-1} (c_{i,\sigma}^\dagger c_{i+1,\sigma} + H.c.) + U(t) \sum_i^L n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} + V(t) \sum_j^{L-1} n_i n_{i+1}, \quad (4.1)$$

em que J é a amplitude de *hopping* entre primeiros vizinhos, e $U(t)$ e $V(t)$ são as interações no sítio e entre primeiros vizinhos, respectivamente, que são dependentes do tempo. Com uma cadeia de tamanho L , temos que os operadores $c_{i,\sigma}^{(\dagger)}$ aniquilam (criam) um férmion com spin $\sigma = \uparrow, \downarrow$ no sítio i . Para analisar a densidade de carga para um valor de spin σ , utilizamos o operador número $n_{j,\sigma} = c_{j,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma}$, $n_i = n_{i,\uparrow} + n_{i,\downarrow}$ dá densidade total de carga no sítio i .

Considerando o Hamiltoniano, temos como objetivo estudar a evolução no tempo do sistema durante um *quench* de tempo finito nas interações. Ou seja, queremos analisar

o comportamento das partículas na cadeia ao partir de um estado inicial preparado com interações desligadas ($V_0 = 0$ e $U_0 = 0$), e ligar somente uma das interações, aumentando seu valor linearmente no tempo até um valor final, U_f ou V_f . Dessa forma, como antecipado no Capítulo 2, as interações dependentes do tempo podem ser descritas como

$$V(t) = V_o + \text{sgn}(V_f - V_o) \frac{t}{\tau_V} \quad (4.2)$$

e

$$U(t) = U_o + \text{sgn}(U_f - U_o) \frac{t}{\tau_U}, \quad (4.3)$$

definidas conforme o tempo físico $t \in [0, t_f]$ e a taxa inversa das alterações nas interações, τ_U e τ_V . Como apenas uma interação é ligada, ao final do *quench* teremos as seguintes relações: $t_f = |V_f - V_0| \tau_V$ e $U_f = U_0 = 0$ para o ordenamento CDW e $t_f = |U_f - U_0| \tau_U$ e $V_f = V_0 = 0$ para o ordenamento SDW.

A interação será aumentada linearmente no tempo, de forma que o estado final do Hamiltoniano corresponda a estados com ordenamentos SDW ou CDW. O diagrama de fase de equilíbrio do modelo é apresentado na Figura 32, que inclui as fases isolantes CDW, SDW e *Bond-Order Wave* (BOW) [47]. Como estamos considerando casos em que as interações serão ativadas individualmente, podemos omitir a fase BOW nesta explicação. As fases CDW e SDW resultam da competição entre as interações elétron-elétron no sítio (descrita por U) e entre primeiros vizinhos (descrita por V). A fase CDW apresenta um *gap* nas excitações de carga e spin, surgindo em casos de forte repulsão entre as interações nos sítios vizinhos ($V > 0$), em que as cargas tendem a se afastar e a dupla ocupação é favorecida ($V \gg U$). No caso do ordenamento SDW, o *gap* está presente nas excitações de spin, indicando uma forte repulsão entre as interações nos sítios ($U > 0$), ou seja, o sistema tende a evitar duplas ocupações ($V \ll U$), resultando em uma periodicidade na densidade de spin. A configuração para dois sítios vizinhos em ambos ordenamentos é ilustrada na Figura 32; esta configuração se repete ao longo da cadeia.

O sistema está configurado em condições de contorno abertas, com o número de partículas fixado em semi-preenchimento e a magnetização total conservada ao longo do eixo z . Nosso foco de análise são cadeias de tamanho $L = 17$, devido ao alto custo computacional das simulações de não-equilíbrio, que aumenta significativamente com o tamanho da cadeia; no entanto, os resultados principais foram confirmados para sistemas de tamanhos maiores [7]. A evolução no tempo foi conduzida conforme descrito na seção 3.4, utilizando cálculos de t-DMRG no formalismo MPS, implementados com a biblioteca *ITensor* [41] na linguagem C++ [8]. Para obter os resultados de equilíbrio do estado fundamental, foram realizadas aproximadamente 10 varreduras (*sweeps*) durante os cálculos de DMRG, considerando o custo computacional do sistema. A dimensão de ligação máxima foi ajustada para cerca de 1500, com descarte de valores singulares menores que 10^{-12} ,

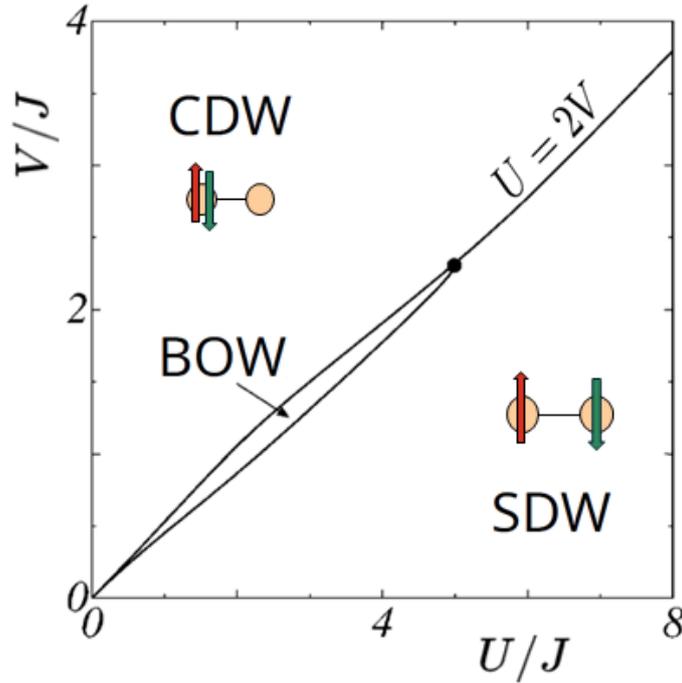


Figura 32 – Diagrama de fase do modelo unidimensional de Hubbard estendido em semi-preenchimento. São apresentadas as configurações para dois sítios vizinhos para os tipos de ordenamento encontrados nas fases CDW e SDW. O sistema tem um ponto crítico em $U = V$ e outro $U = 2V$ indicado pelo círculo preto. Figura adaptada de [47].

considerando um passo de $\Delta_t = 0.02$ para as evoluções temporais, devido à natureza da cadeia unidimensional com interações locais. Ao longo deste estudo, a energia foi medida em unidades de J , o que implica que o tempo foi avaliado em unidades de $1/J$.

Ligando U ou V no *quench*

Conforme ilustrado na Figura 32, o modelo de Hubbard estendido apresenta um estado CDW para $U < 2V$ e um estado SDW para $U > 2V$.

Os perfis das distribuições de carga e spin ao final do *quench* ($t = t_f$) em direção aos ordenamentos CDW e SDW podem ser visualizados na Figura 33. Adicionalmente, os perfis das distribuições locais de spin e carga correspondentes ao estado fundamental de $H(t = 0)$ e $H(t = t_f)$ foram adicionados nas extremidades superior e inferior desses painéis para uma comparação direta.

Nos gráficos da Figura 33, os painéis superiores (a) e (b) mostram os perfis de densidade de carga e magnetização quando a interação entre primeiros vizinhos alcança seu valor final $V_f = 3$, indicando a transição para o ordenamento CDW. Similarmente, para o caso SDW, apresentado nos painéis (c) e (d), onde o valor final da interação no

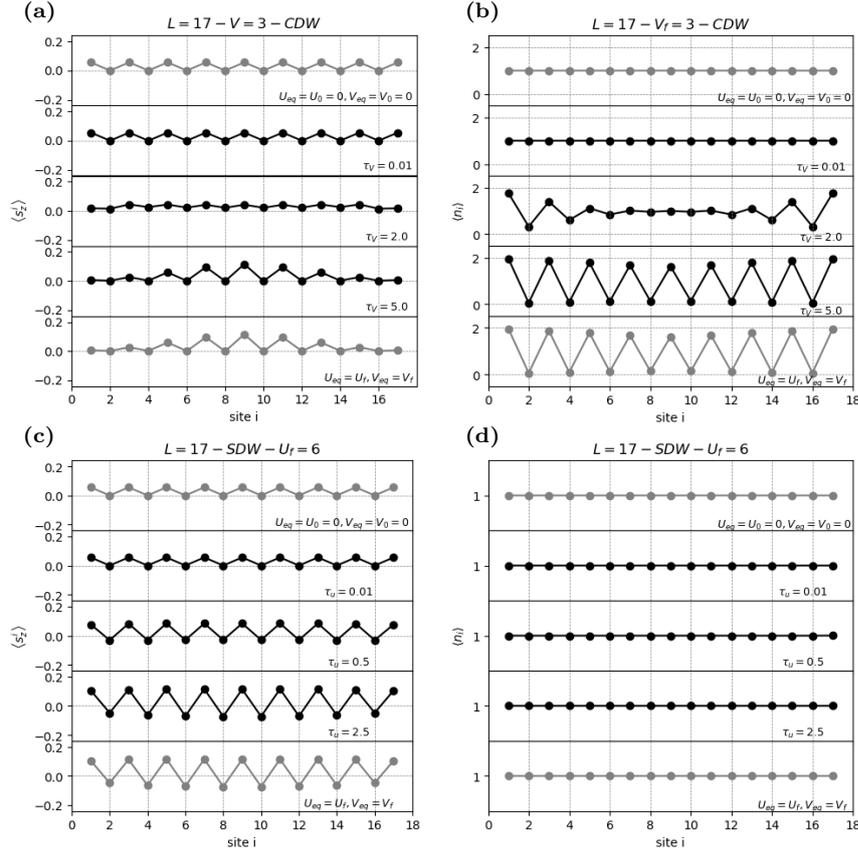


Figura 33 – Para o estado final do *quench*, a magnetização local e a densidade de carga como funções do sítio i da cadeia são mostradas nos painéis (a) e (b) para o caso do ordenamento CDW e nos painéis (c) e (d) para o ordenamento SDW. As quantidades locais foram avaliadas para diferentes taxas inversas (τ_V e τ_U), incluindo os resultados de equilíbrio correspondentes ao estado inicial, $U_{eq} = U_0 = 0$ e $V_{eq} = V_0 = 0$, e ao estado final, $U_{eq} = U_f$ e $V_{eq} = V_f$.

sítio é $U_f = 6$. Podemos observar três regimes distintos associados ao tempo do *quench*: instantâneo, intermediário e adiabático. No regime instantâneo ($\tau_V = 0.01$ e $\tau_U = 0.01$), a perturbação ocorre em um tempo muito curto em comparação com as outras escalas de tempo, resultando em um “congelamento” do sistema em seu estado inicial, correspondente ao estado fundamental de $H(t = 0)$. No extremo oposto ($\tau_V = 5.0$ e $\tau_U = 2.5$), a evolução é tão lenta que o perfil de densidade de carga e spin corresponde ao estado de equilíbrio de $H(t = t_f)$.

Entre os dois regimes extremos, temos o regime intermediário. Neste caso, para formação do estado CDW a densidade de carga é alterada das bordas para o centro da cadeia (Figura 33(b)). Em $\tau = 2.0$, as bordas do sistema apresentam características semelhantes ao ordenamento CDW encontrado no caso adiabático, enquanto o centro ainda mantém características do estado inicial. Esse processo é marcado por uma alta variação na densidade local de carga e uma variação menor na magnetização, resultando no ordenamento CDW caracterizado por uma periodicidade de dupla ocupação e um sítio

vazio. No caso da evolução para o ordenamento SDW (Figura 33(c) e (d)), não observamos alterações significativas na densidade local de carga, todos os sítios da cadeia são ocupados por um elétron por sítio ao longo de toda a evolução, apenas na magnetização local do sistema, que evolui para o perfil característico da fase SDW, em que o spin apresenta sinais alternados entre vizinhos.

Parâmetros de ordem e entropia de emaranhamento

Para caracterizar esses estados, podemos utilizar uma grandeza física que descreve a presença de ordem e simetria em um sistema físico, definida pelos parâmetros de ordem

$$m_{CDW} = \frac{1}{L} \sum_i (-1)^i (\langle n_i \rangle - 1) \quad (4.4)$$

ou

$$m_{SDW} = \frac{1}{L} \sum_i (-1)^i \langle s_i^z \rangle, \quad (4.5)$$

sendo $\langle n_i \rangle$ e $\langle s_i^z \rangle$ o valor esperado da densidade local de carga e de spin no sítio i da cadeia; podemos analisar esses valores para diferentes tempos característicos τ_V e τ_U .

Como vimos, formação dos ordenamentos CDW e SDW envolve principalmente o rearranjo de cargas e spins, respectivamente. Podemos utilizar os parâmetros de ordem dados pelas equações 4.4 e 4.5 para analisar a evolução no tempo da dinâmica de não-equilíbrio, considerando o comportamento da soma dos observáveis locais ao longo da cadeia diante da perturbação. Os valores dos parâmetros de ordem em função das interações $V(t)$ ou $U(t)$ para taxas inversas τ_V ou τ_U são mostrados na Figura 34 (a) e (b). A linha verde tracejada em cada gráfico representa o parâmetro de ordem do estado fundamental correspondente ao Hamiltoniano de equilíbrio em cada tempo t , ou seja, o Hamiltoniano da Equação 4.1 com $V(t) = V_{eq}$ (para o caso do ordenamento CDW) e $U(t) = U_{eq}$ (para o ordenamento SDW).

Na Figura 34(a) e (b), observamos o desenvolvimento de $|m_{CDW}|$ e $|m_{SDW}|$ em função de $V(t)$, variando de $V_0 = 0$ até $V_f = 3$ e em função de $U(t)$, variando de $U_0 = 0$ até $U_f = 6$, respectivamente. Podemos observar que m_{CDW} e m_{SDW} calculados para $\tau_V = 12.0$ e $\tau_U = 5.0$ se aproximam do estado fundamental de equilíbrio (curva verde tracejada), indicando que, para valores de $\tau_V > 12.0$ e $\tau_U > 5.0$, o sistema alcança o regime adiabático para ambos os casos. Nota-se que a taxa inversa τ para m_{SDW} atingir o regime adiabático é menor em comparação com m_{CDW} [7]. Em contraste, para $\tau_V = 0.01$ e $\tau_U = 0.01$, o *quench* é repentino e os estados não evoluem.

Ao analisar os parâmetros de ordem para *quenches* que correspondem a um regime intermediário, observamos que eles aumentam para ambos os casos, porém não alcançam os valores do estado fundamental, indicando que o estado evoluído inclui estados excitados.

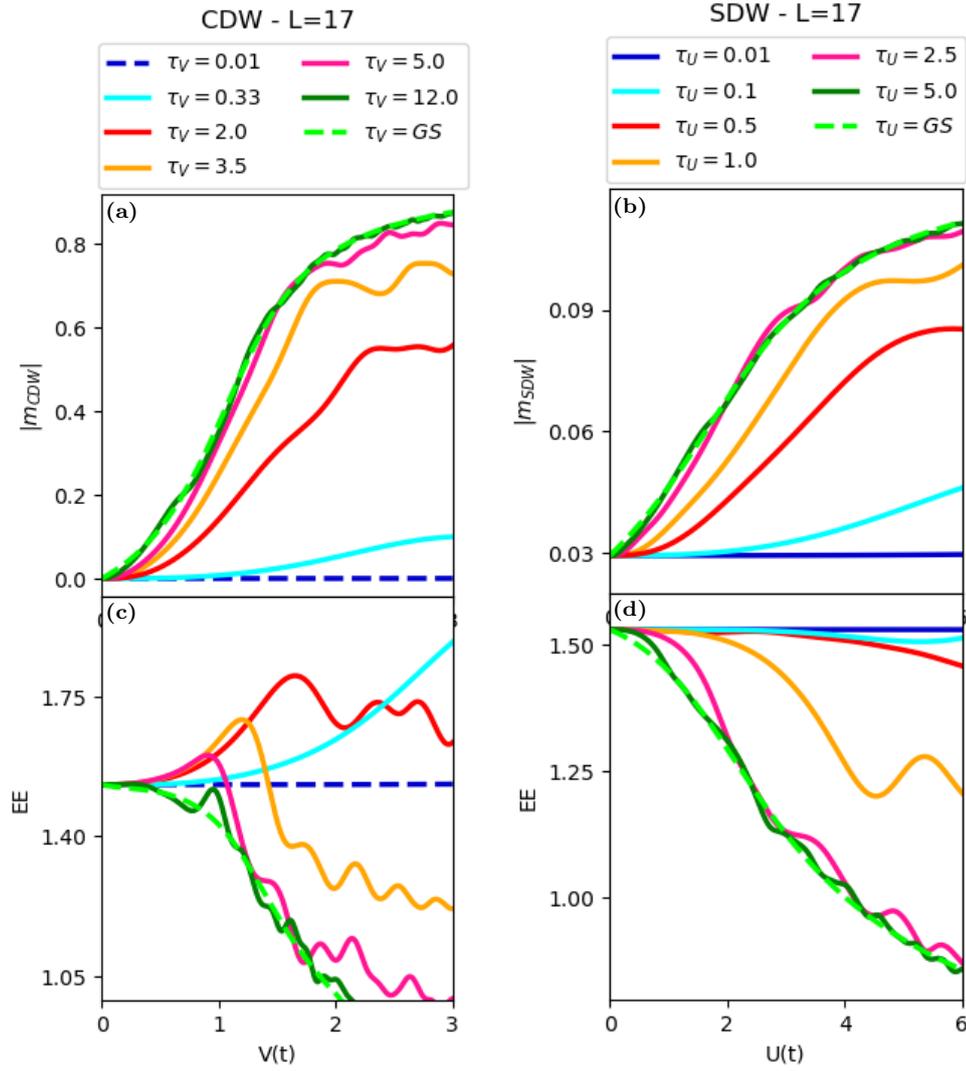


Figura 34 – Parâmetros de ordem (a) CDW e (b) SDW e entropia de emaranhamento nos painéis (c) e (d) em função das interações $V(t)$ ou $U(t)$, dependendo de se o *quench* é em direção ao ordenamento CDW ou SDW, respectivamente.

Conforme a taxa inversa do *quench* aumenta, o sistema se aproxima mais do estado de equilíbrio.

A entropia de emaranhamento foi calculada e está presente nos gráficos (c) e (d) da Figura 34, fornecendo informações sobre a quantidade de correlação quântica presente no sistema e como essa correlação evolui ao longo do tempo durante um *quench* quântico. A entropia de emaranhamento é definida como $EE = -\sum_i \lambda_i \log_2 \lambda_i$, onde λ_i são os autovalores da matriz de densidade reduzida $\rho_{A/B} = \text{Tr}_{B/A}(|\Psi\rangle\langle\Psi|)$ associada ao sistema. Ela é calculada a partir desses autovalores, obtidos ao dividir o sistema em duas regiões (A e B); no nosso trabalho consideramos que cada região tem comprimento aproximadamente $L/2$. O comportamento qualitativo da entropia de emaranhamento não varia significativamente para subsistemas de diferentes tamanhos [7].

Podemos utilizar o cálculo da entropia de emaranhamento para obter *insights* sobre a evolução das correlações quânticas e como o sistema atinge o regime adiabático. A evolução da entropia de emaranhamento ao longo dos *quenches* é mostrada nas Figuras 34 (c) e (d). Comparando as curvas do sistema com o estado fundamental de equilíbrio, representado pela linha verde tracejada, observamos que para os menores valores de tempo de *quench* ($\tau_V = 0.01$ e $\tau_U = 0.01$), no regime instantâneo, a entropia não evolui a partir dos valores iniciais correspondentes a $U_0 = 0$ ou $V_0 = 0$.

Considerando a formação do ordenamento CDW, há um aumento da entropia de emaranhamento em relação ao estado inicial para $\tau_V = 0.33$, $\tau_V = 2.0$, $\tau_V = 3.5$ e $\tau_V = 5.0$ (linhas ciano, vermelha, laranja e rosa, Figura 34(c)). Para $\tau_V = 0.33$, o aumento ocorre monotonicamente durante o *quench*. Para $\tau_V = 2.0$, o parâmetro de ordem cresce até um valor máximo, enquanto a EE oscila em torno de ≈ 1.75 , indicando que o ordenamento CDW ainda não foi completamente alcançado pelo sistema. Os comportamentos para $\tau_V = 3.5$ e $\tau_V = 5.0$ são semelhantes: o aumento da entropia é suprimido à medida que o tempo de *quench* se aproxima do regime adiabático. Isso sugere que, à medida que o sistema evolui temporalmente em direção à formação da fase CDW, há um aumento na entropia de emaranhamento, indicativo de uma maior exploração de estados quânticos excitados durante esse processo de transição. Em contraste, não é observado um aumento significativo na entropia de emaranhamento além do seu valor inicial para a formação do ordenamento SDW, conforme mostrado na Figura 34(d). Além disso, é possível observar que, para o caso intermediário, o sistema apresenta oscilações à medida que as interações aumentam. Essas oscilações tendem a ter menor amplitude e maior frequência conforme o sistema se aproxima do regime adiabático. Este conjunto de análises proporciona uma compreensão detalhada de como a entropia de emaranhamento evolui durante *quenches* no modelo estudado, fornecendo *insights* valiosos sobre a dinâmica de não-equilíbrio e a transição para estados ordenados.

No artigo de Isaac Martins Carvalho [7], são apresentados mais detalhes sobre os resultados discutidos nesta reprodução, incluindo: a função de desvio em relação ao estado fundamental de equilíbrio, que compara as variações entre os resultados comparados para os ordenamentos CDW e SDW; cenários em que as interações U e V são “ligadas” simultaneamente; a dependência dos resultados com o tamanho do sistema. Esses outros trabalhos confirmam as conclusões discutidas nesta Dissertação.

Para esta reprodução, utilizou-se um número reduzido de *sweeps* para otimizar o tempo de execução dos cálculos devido à complexidade do sistema. Foram realizados testes com diferentes números de *sweeps* para identificar se os fenômenos observados seriam afetados por sua diminuição. O comportamento do sistema manteve-se equivalente para cálculos com 10, 20, 30 e 40 *sweeps*, comparando o parâmetro de ordem e a entropia de emaranhamento.

A reprodução descrita nesta seção foi extremamente útil para consolidar o entendimento do código disponibilizado e para verificar se a compreensão das implementações estava alinhada com as informações encontradas na literatura. Foi um processo de aprendizagem bem sucedido, pois identificamos comportamentos semelhantes aos descritos no artigo, o que possibilitou dar continuidade ao trabalho com base no conhecimento inicial adquirido.

4.2 Resultados preliminares do presente trabalho

Cadeias de tamanho par ($L=18$)

Primeiramente, ao finalizar as reproduções apresentadas na seção anterior, decidimos analisar a formação dos ordenamentos de carga e spin, utilizando o mesmo método, a fim de conferir a dependência dos resultados com o número de sítios/partículas da cadeia. Para isso, fizemos cálculos semelhantes aos anteriormente apresentados, mas agora para $L=18$, analisando os perfis de densidade de carga e de magnetização, assim como os parâmetros de ordem do sistema.

Ao analisar os valores esperados, obtivemos os gráficos apresentados na Figura 35. Para o caso do ordenamento CDW, mostrado nas Figuras 35 (a) e (b), observamos que a variação da carga ocorre de maneira semelhante ao caso de cadeias ímpares, com o ordenamento iniciando pelas bordas. No entanto, para $\tau_V = 12.0$, o sistema não alcançou completamente o estado CDW, ao contrário do que ocorre na Figura 17, onde o ordenamento já está caracterizado; acreditamos que essa diferença seja um efeito do tamanho finito do sistema e diminua se aumentamos L . No caso atual de L par, a variação do spin em relação ao estado inicial é imperceptível. Por outro lado, considerando o *quench* em direção ao estado SDW (Figura 35 (c) e (d)), observamos que a densidade de carga é de uma partícula por sítio, e a magnetização local é nula para todos os valores de τ_U considerados.

A biblioteca utilizada, *ITensor*, conserva a quantidade de spin S_z durante o cálculo do DMRG para aumentar a eficiência computacional e a precisão dos cálculos, aproveitando a simetria física dos sistemas onde S_z é uma quantidade conservada. Ao restringir os cálculos aos estados com um valor fixo de S_z , o *ITensor* reduz significativamente o espaço de Hilbert efetivo, simplificando assim os cálculos e diminuindo a necessidade de memória [41]. Para L par e semipreenchimento, a magnetização do sistema é nula e, para cada sítio, as duas projeções de spin são degeneradas. Isso justifica o valor da magnetização local nula para todos os valores de τ considerando o *quench* em direção ao estado SDW (Figura 35 (a)) e CDW (Figura 35 (c)), no caso de L par, em contraste com o observado para L ímpar. Assim, para caracterizar o ordenamento SDW para L par devemos olhar para outras quantidades, como a correlação entre spin em diferentes sítios, que incluímos nas

etapas futuras do presente trabalho.

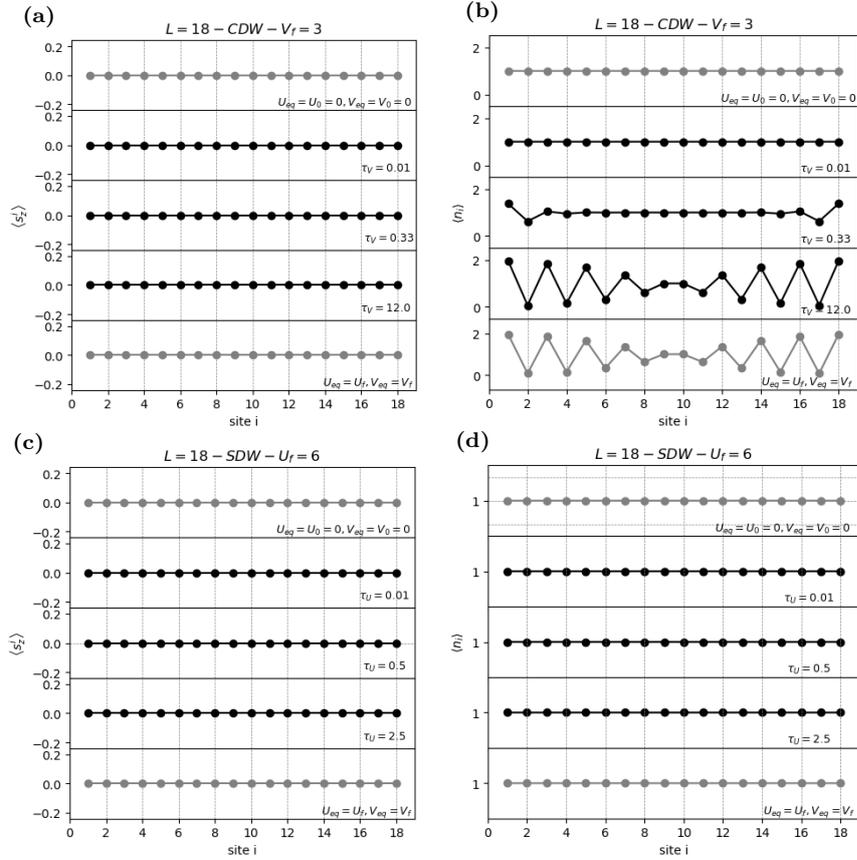


Figura 35 – Para o estado final do *quench*, a magnetização local e a densidade de carga como funções do sítio i da cadeia são mostradas nos painéis (a) e (b) para o caso do ordenamento CDW e nos painéis (c) e (d) para o ordenamento SDW. As quantidades locais foram avaliadas para diferentes taxas inversas (τ_V e τ_U), incluindo os resultados de equilíbrio correspondentes ao estado inicial, $U_{eq} = U_0 = 0$ e $V_{eq} = V_0 = 0$, e ao estado final, $U_{eq} = U_f$ e $V_{eq} = V_f$.

Pós-*quench*

A partir dos resultados obtidos no artigo *Formation of spin and charge ordering in the extended Hubbard model during a finite-time quantum quench* (de onde reproduzimos os resultados da seção anterior) [7] para $L = 17$, realizamos uma análise do sistema pós-*quench*. A evolução pós-*quench* é crucial para compreender como o sistema quântico se comporta ao longo do tempo, nos três regimes observados durante o *quench*. Essa análise nos permite explorar se o sistema ainda evoluirá para o estado de equilíbrio nos casos dos *quenches* abrupto e intermediário

Para a evolução do sistema após o *quench*, utilizamos essencialmente o mesmo código empregado durante o *quench*. As interações V e U são mantidas constantes ao longo do pós-*quench*, assumindo os valores finais do *quench*: $V_f = 3$ ou $U_f = 6$, permitindo

que o sistema evolua livremente no tempo t . Analisamos o comportamento dos parâmetros de ordem descritos pelas equações 4.4 e 4.5 em função do tempo de evolução t . No gráfico da entropia de emaranhamento e dos parâmetros m_{CDW} e m_{SDW} durante o *quench*, apresentado na Figura 34, essas grandezas variam conforme as interações $V(t)$ e $U(t)$. Já nesta seção, ambas as grandezas serão analisadas em função do tempo t .

Na Tabela 4.2, estão listados os valores de t_f associados ao término do *quench* para cada taxa inversa τ_V e τ_U , calculados a partir das equações 4.2 e 4.3. Esses valores são importantes para definir o final do *quench* nos gráficos em função do tempo, que incluem tanto a evolução durante o *quench* quanto a evolução pós-*quench*, dado que, para diferentes taxas τ_V e τ_U de variação das interações, os tempos finais dos *quenches* são diferentes.

τ_V	Tempo total do <i>quench</i> (t_f)	τ_U	Tempo total do <i>quench</i> (t_f)
0.01	0.03	0.01	0.06
2.0	6	0.1	0.6
3.5	10.5	0.5	3
5.0	15	1.0	6
12.0	36	2.0	12
20.0	60	2.5	15
		5.0	30

Tabela 1 – Relação entre a taxa inversa de *quench* τ_V e τ_U e o tempo total t_f do *quench* para os casos em que $V_f = 3$ e $U_f = 6$, respectivamente.. Informações retiradas das equações 4.4 e 4.5.

Na Figura 36, observamos o módulo dos parâmetros de ordem e a entropia de emaranhamento em função do tempo. Os gráficos apresentam valores associados à evolução durante o *quench* e à evolução temporal livre após o *quench*. O fim do *quench* e o início da evolução livre são indicados por um triângulo com a cor correspondente de cada curva. A linha verde clara tracejada representa o valor do parâmetro de ordem no estado fundamental para $V_f = 3$ (caso CDW) e $U_f = 6$ (caso SDW), que chamaremos de GS_f . Quando uma curva termina abruptamente, significa que o sistema foi evoluído por um tempo t menor do que a escala mostrada no eixo x do gráfico.

Primeiramente, vamos analisar os gráficos dos parâmetros de ordem m_{CDW} e m_{SDW} na Figura 36(a) e (b). Para o regime adiabático ($\tau_V = 12.0$ e $\tau_U = 5.0$), a evolução após o *quench* é parcialmente indicada nos gráficos, mantendo-se estável para valores de $t > 40$, o que caracteriza o estado adiabático, como esperado. Nesse regime, tanto os parâmetros de ordem quanto a entropia de emaranhamento variam mais lentamente no tempo do que nos outros regimes, até atingir os valores correspondentes ao GS_f . Podemos comparar isso com o caso de $\tau_V = 5.0$, onde o parâmetro de ordem e a entropia não atingem os valores do estado fundamental, mas oscilam próximo a ele. Também podemos considerar o caso de $\tau_U = 2.5$, onde o sistema chega bem próximo ao estado fundamental, mais rapidamente do que para $\tau_U = 5.0$, mas permanece oscilando e não estabiliza. Para quantificar essa

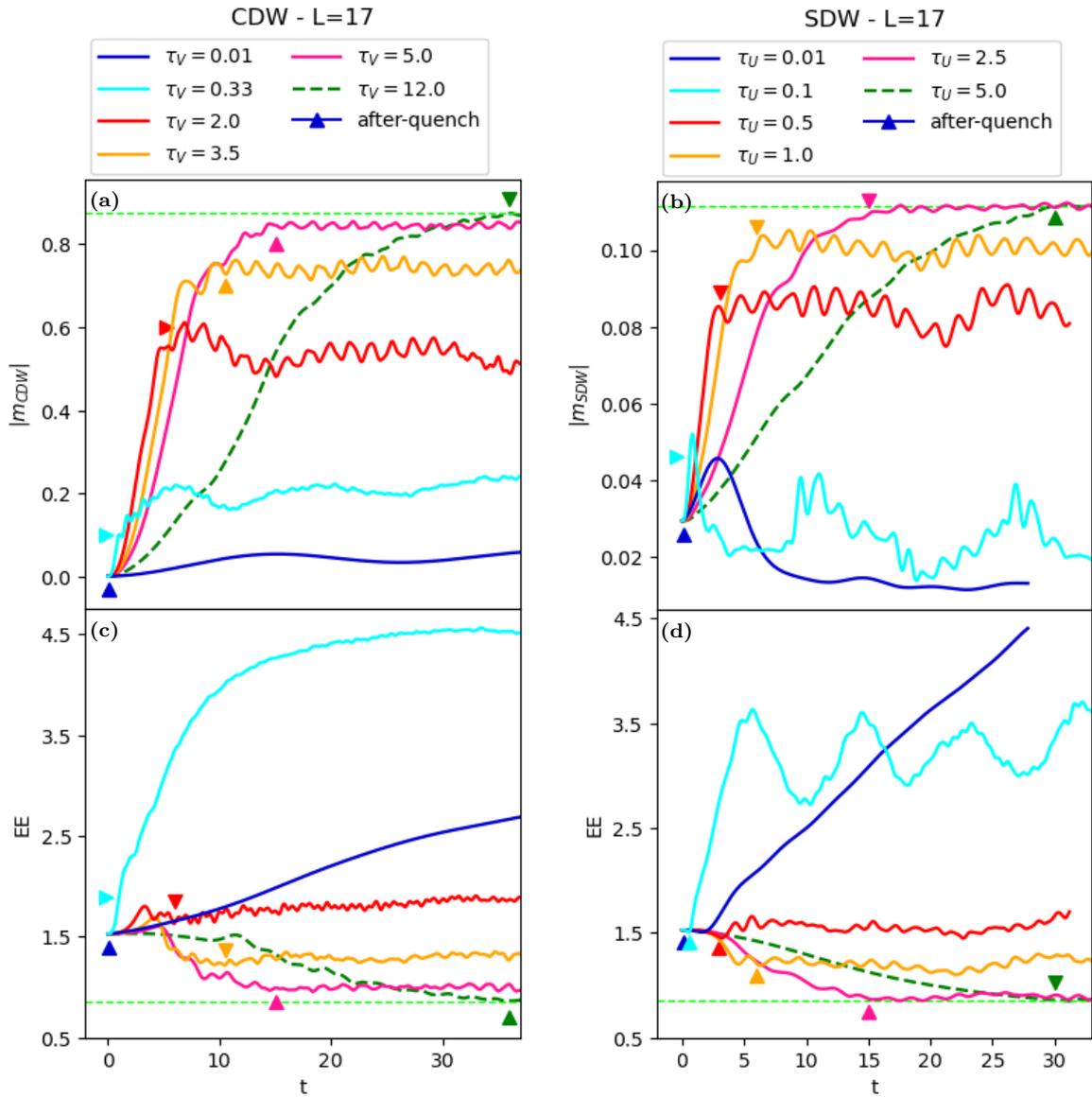


Figura 36 – Parâmetros de ordem (a) CDW e (b) SDW, e entropia de emaranhamento nos painéis (c) e (d), em função do tempo t de evolução durante e pós-*quench*, para os *quenches* em direção ao ordenamento CDW ou SDW. Os triângulos estão associados ao momento em que o *quench* termina (t_f). Uma linha horizontal pontilhada indica o valor correspondente ao estado fundamental para $V_f = 3$ (caso CDW) e $U_f = 6$ (caso SDW).

proximidade do sistema ao GS_f , podemos olhar para a evolução temporal da fidelidade entre o estado evoluído e o GS_f , o que fica como perspectiva de trabalho futuro.

No outro extremo ($\tau_V = 0.01$ e $\tau_U = 0.01$), temos o regime instantâneo, onde durante o *quench* o sistema não demonstra alterações significativas em relação ao estado inicial devido à perturbação repentina. No caso do gráfico (a), o parâmetro de ordem evolui sem mudanças significativas. Já no gráfico (b), após um tempo suficiente, observa-se um pico com $m_{SDW} \approx 0.05$ seguido de um decaimento que estabiliza em $m_{SDW} \approx 0.01$. Em ambos os casos, a entropia aumenta com o tempo, indicando que, se for dado tempo suficiente após o *quench* abrupto, o sistema começará a responder à mudança na interação, evoluindo em direção a um novo estado excitado.

Para as curvas amarelas e vermelhas ($\tau_V = 2.0$ e $\tau_V = 0.5$, $\tau_U = 3.5$ e $\tau_U = 1.0$), temos um caso intermediário em que o sistema evolui em direção ao estado fundamental, mas não o alcança efetivamente. Durante o *quench* o parâmetro de ordem aumenta até alcançar um valor máximo, no pós-*quench*, e inicia oscilações de pequena amplitude nas proximidades desse valor máximo. Durante o tempo analisado, o sistema não converge para o estado fundamental.

No caso das curvas ciano, o sistema está longe do estado fundamental e não demonstra tendência para alcançá-lo. Para $\tau_V = 0.33$, a entropia cresce e aparentemente satura na região de $EE \approx 4.5$, onde as oscilações no parâmetro de ordem não são tão significativas. No caso de $\tau_U = 0.1$, o sistema apresenta oscilações tanto no parâmetro de ordem quanto na entropia.

As oscilações presentes na Figura 36 são observadas em todas as curvas do regime intermediário, variando em escalas diferentes. Por isso, é importante tentar compreender a origem desse comportamento. Uma das hipóteses está associada ao tamanho do sistema, ou seja, as oscilações podem ser reflexo de efeitos de borda. Para investigar essa possibilidade, realizamos simulações com cadeias maiores, além de $L = 17$, utilizando $L = 21$ e $L = 25$ sítios. Analisamos inicialmente casos em que a evolução é em direção ao ordenamento SDW, para ilustrar as diferenças observadas com o aumento do tamanho da cadeia.

Podemos olhar inicialmente para o caso da evolução durante o *quench*, onde os parâmetros de ordem e a entropia são analisados em função das interações $V(t)$ e $U(t)$. Na Figura 37, temos três gráficos na mesma escala para comparar os comportamentos para cada tamanho de cadeia. A comparação é feita para quatro valores da taxa em que a interação é variada: $\tau = 0.01$ no regime instantâneo, e $\tau = 0.1$, $\tau = 0.5$ e $\tau = 1.0$ no regime intermediário; o caso adiabático não foi incluído pois temos interesse em olhar para os casos em que há oscilações nos parâmetros analisados. É possível observar que, com o aumento do tamanho da cadeia, a amplitude de oscilação do parâmetro de ordem e da entropia de emaranhamento para $\tau_U = 1.0$ diminuiu ou houve um deslocamento das curvas para maiores valores de U . O comportamento geral se manteve conforme comentado na

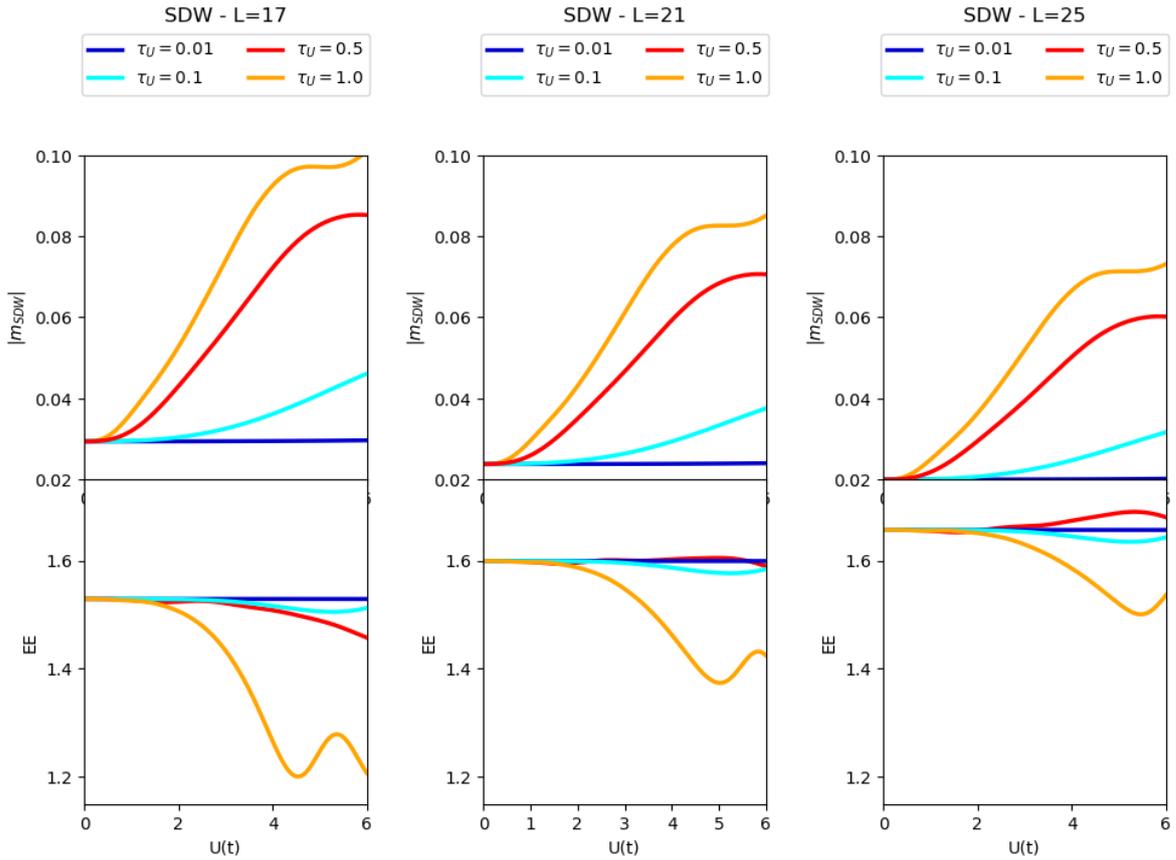


Figura 37 – Parâmetro de ordem SDW (painéis superiores) e entropia de emaranhamento (painéis inferiores) em função da interação $U(t)$, Os gráficos são para diferentes tamanhos de cadeia: $L = 17$, $L = 21$ e $L = 25$ sítios.

seção 4.1, exceto para a entropia de emaranhamento da curva $\tau_U = 0.5$, que apresentou um aumento além do valor em $t = 0$ nos gráficos para $L = 21$ e $L = 25$.

Para compararmos o comportamento do sistema *pós-quençh* mediante o aumento da dimensão da cadeia, incluímos os gráficos para diferentes L lado-a-lado, utilizando as mesmas escalas, Figura 38, com menos valores de τ_U e em um tempo de evolução menor do que o apresentado no caso de $L = 17$. Para alguns valores de τ_U , o sistema evoluiu por tempos menores que $t = 20$; por isso, as curvas correspondentes acabam abruptamente nos gráficos. O tamanho da cadeia aumenta do gráfico à esquerda para o gráfico à direita. De acordo com os gráficos apresentados, o comportamento do sistema ao longo do tempo é qualitativamente o mesmo para os diferentes tamanhos de cadeia, exceto pelo já observado na figura anterior para o caso de $\tau_U = 0.5$, em que o emaranhamento cresce além do valor inicial. Quantitativamente, de forma esperada, notamos que os parâmetros de ordem diminuem um pouco e há um pequeno deslocamento das curvas para maiores valores de t à medida que L aumenta.

Isso pode ficar mais evidente ao comparar em um mesmo gráfico os diferentes tamanhos para um valor de τ_U fixo, como mostrado na Figura 39, onde a linha vertical

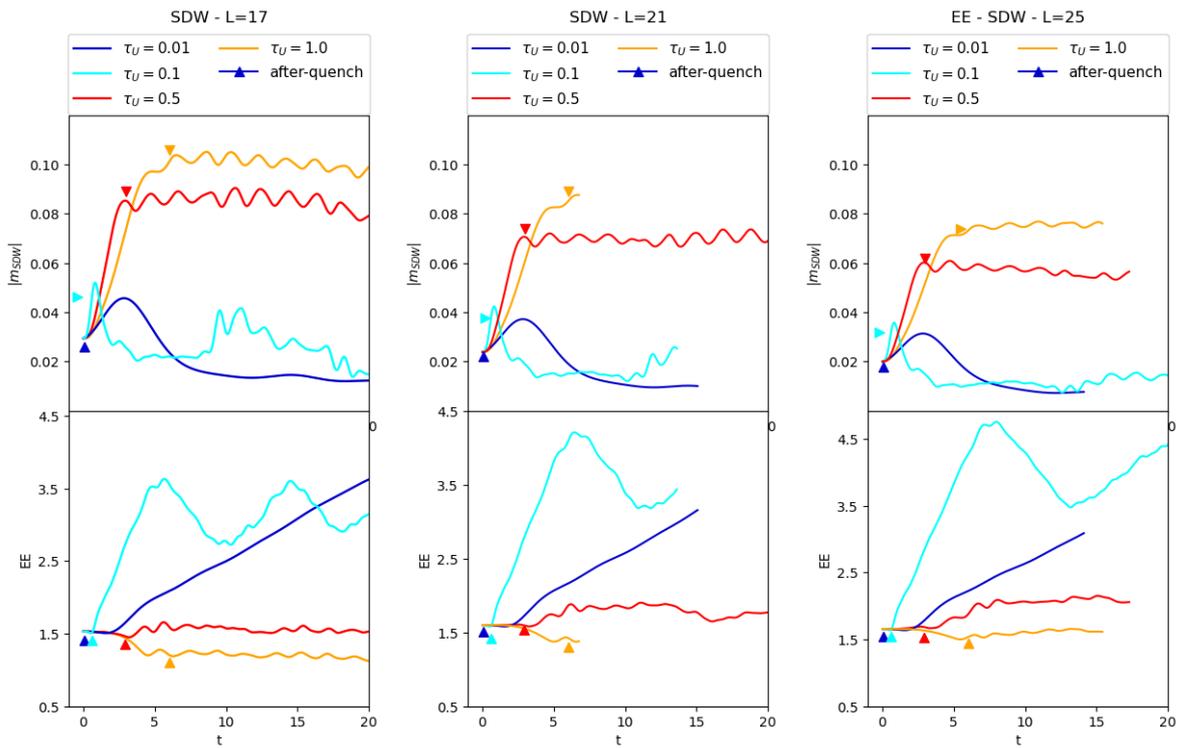


Figura 38 – Parâmetros de ordem SDW (painéis superiores) e entropia de emaranhamento (painéis inferiores) em função do tempo t de evolução durante e pós-*quench*. Os triângulos estão associados ao momento em que o *quench* termina (t_f).

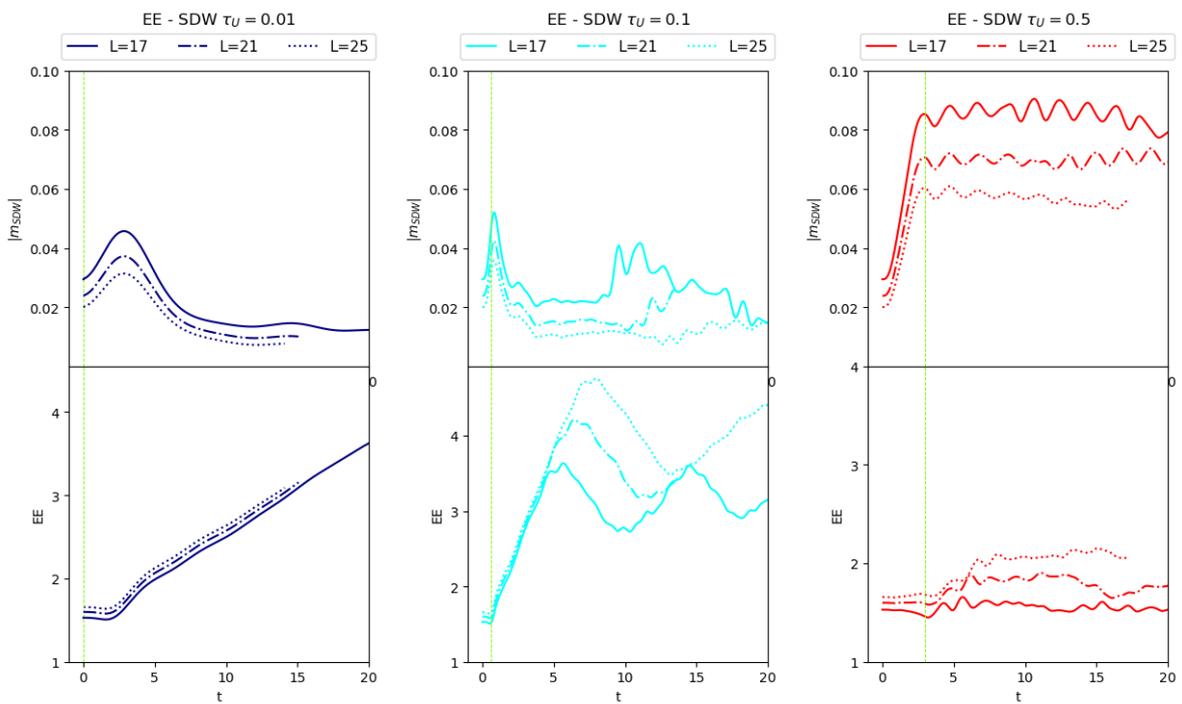


Figura 39 – Parâmetro de ordem SDW (painéis superiores), e entropia de emaranhamento (painéis inferiores), em função do tempo t de evolução durante e pós-*quench*. As linhas verticais pontilhadas estão associados ao momento em que o *quench* termina (t_f).

indica o fim do *quench* de tempo finito. No caso do *quench* abrupto, o comportamento é bastante semelhante: o m_{SDW} diminui com o aumento do tamanho da cadeia, enquanto a entropia de emaranhamento aumenta. Observamos um comportamento similar para $\tau_U = 0.1$, além de verificar que as oscilações se deslocam para a direita, indicando que há possivelmente um amortecimento delas em cadeias de tamanhos maiores. No caso de $L = 25$, o comportamento de m_{SDW} para $\tau_U = 0.1$ aparenta tender ao comportamento observado no caso instantâneo, com um pico inicial seguido por uma oscilação em torno de um valor. Para $\tau_U = 0.5$, o parâmetro de ordem m_{SDW} apresenta oscilações cuja amplitude diminui com o tamanho do sistema. A entropia aparenta oscilar em torno de um valor que aumenta com o tamanho da cadeia.

A análise apresentada para os diferentes tamanhos de sistema é preliminar e será aprofundada no futuro. Também buscamos outras possíveis explicações para as oscilações observadas nos parâmetros de ordem e emaranhamento, além de efeitos de tamanho finito do sistema.

5 Conclusões e Perspectivas

Neste trabalho, para investigarmos a formação dos ordenamentos de carga (CDW) e de spin (SDW) a partir de um estado inicial não interagente. Implementamos o modelo do Hubbard estendido unidimensional, que inclui o termo de hopping para a mobilidade eletrônica e as interações entre férmions nos mesmos sítios (U) e entre sítios adjacentes (V). Para alcançar os ordenamentos desejados, aplicamos um protocolo de *quench*, partindo de um sistema inicial não interagente e evoluindo-o sob a ação do Hamiltoniano interagente, aumentando gradualmente o valor de uma das interações durante um tempo finito. Para o estudo, utilizamos a extensão temporal do método *Density Matrix Renormalization Group* (t-DMRG), reproduzimos eficientemente o comportamento durante o *quench* da densidade de carga e spin, dos parâmetros de ordem CDW e SDW, e da entropia de emaranhamento ao longo dos sítios da cadeia, já observado anteriormente em trabalho do nosso grupo de pesquisa [7]. Essa reprodução foi essencial para compreender a estrutura do código e analisar os comportamentos de não equilíbrio no pós-*quench*, objetivo principal deste trabalho. Obtivemos resultados preliminares para a evolução pós-*quench* do sistema, investigando as quantidades mencionadas para compreender a dinâmica subsequente à perturbação inicial. Esses resultados permitiram explorar a resposta do sistema à perturbação e avançar na compreensão da formação de estados ordenados, contribuindo para o entendimento de fenômenos emergentes em sistemas quânticos fortemente correlacionados.

O código utilizado foi desenvolvido pelo aluno Isaac Martins Carvalho, membro do nosso grupo de pesquisa. Foi implementado em C++ devido à complexidade do problema abordado e à necessidade de uma implementação mais robusta. O código está disponível em [8], onde também pode ser encontrada uma breve descrição da sua arquitetura. A compreensão desse código, que possui mais de 2500 linhas, foi fundamental para o amadurecimento da metodologia estudada, bem como para o avanço e continuidade do trabalho proposto.

Na reprodução dos resultados durante o *quench*, investigamos a formação dos ordenamentos CDW e SDW enquanto uma das interações (U ou V) linearmente no tempo. Observamos três diferentes regimes: instantâneo, intermediário e adiabático, dependendo da taxa inversa τ e m que as interações são ligadas, no regime instantâneo. Para pequenos valores de τ , o sistema não altera seu comportamento durante a evolução. No regime adiabático (tipo de regime relaciona-se com $\tau_V = 12.0$ e $\tau = 5.0$), o sistema segue o comportamento previsto para o estado fundamental de equilíbrio instantâneo, considerando grandes valores de τ . No regime intermediário, para diferentes valores de τ , observamos um aumento na entropia de emaranhamento em relação ao estado inicial nos *quenches* em direção ao ordenamento CDW. Como os parâmetros de ordem aumentaram em todos os

casos, o aumento da entropia sugere que o rearranjo de cargas para a formação do estado CDW precisa ser mais lento do que para o SDW, a fim de evitar que estados excitados emaranhados sejam acessados durante a dinâmica.

Para estudar o sistema após o *quench*, nós o deixamos evoluir no tempo seguindo o valor final da interação no *quench* de tempo finito e analisamos as mesmas grandezas previamente investigadas para fins comparativos. Confirmamos a presença dos três regimes distintos. Nos casos adiabáticos, observamos que a evolução conduz o sistema mais próximo do estado fundamental do Hamiltoniano final. Notamos que, no regime intermediário, o sistema exhibe oscilações de diferentes amplitudes ao longo da evolução livre. Para investigar se a presença dessas oscilações é um efeito de tamanho finito do sistema. Realizamos simulações em cadeias com 21 e 25 sítios, além da cadeia de 17 sítios com a qual obtivemos a maior parte dos resultados. Observamos que, à medida que o tamanho do sistema aumenta, o valor máximo encontrado para o parâmetro de ordem diminui, enquanto, para a entropia ocorre o oposto. Além disso, notamos que as oscilações diminuem em amplitude e duração conforme o sistema cresce.

Perspectivas futuras incluem uma investigação mais aprofundada das oscilações citadas acima. Presentes na evolução livre após o *quench*. Para caracterizar de maneira mais precisa os regimes, calcularemos a fidelidade $f(t) = |\langle \psi(t) | \psi_{GS} \rangle|^2$ entre o estado evoluído $|\Psi(t)\rangle$ e o correspondente estado fundamental de equilíbrio do Hamiltoniano $|\Psi_{GS}\rangle$. Assim, verificaremos quão bem o estado evoluído após o *quench* se assemelha ao estado fundamental, sem criar excitações adicionais. Uma possibilidade para a origem das oscilações presentes está numa alternância entre estados. É possível que o *quench*, no regime intermediário, gere um estado que seja uma combinação linear de autoestados do Hamiltoniano final em um subespaço de baixas energias (no regime adiabático, é exatamente o estado fundamental). Em seguida, deixamos o estado evoluir livremente com o Hamiltoniano final e o sistema pode ficar oscilando nesse subespaço. Para verificar essa situação, realizaremos uma diagonalização exata para um sistema com uma dimensão menor, a fim de entender o estado do sistema no final de um dado *quench* intermediário. Pretendemos também avaliar a fidelidade ao longo do tempo, a fim de caracterizar de forma mais precisa os regimes observados.

REFERÊNCIAS

- [1] Giamarch, Thierry: *Quantum Physics in One Dimension*. Claredon press, 2003. Citado 2 vezes nas páginas 11 e 12.
- [2] Anderson, P. W.: *More Is Different*. *Science*, 177(4047):393–396, 1972, ISSN 00368075, 10959203. <http://www.jstor.org/stable/1734697>, acesso em 2024-06-03. Citado na página 11.
- [3] Dagotto, Elbio: *Complexity in Strongly Correlated Electronic Systems*. *Science*, 309(5732):257–262, julho 2005, ISSN 1095-9203. <http://dx.doi.org/10.1126/science.1107559>. Citado na página 11.
- [4] Smith, J. L. e E. A. Kmetko: *Magnetism or bonding: A nearly periodic table of transition elements*. *Journal of the Less Common Metals*, 90(1):83–88, 1983. Citado 2 vezes nas páginas 11 e 12.
- [5] Mott, N. F.: *The Basis of the Electron Theory of Metals, with Special Reference to the Transition Metals*. *Proceedings of the Physical Society. Section A*, 62(7):416, 1949. Citado na página 11.
- [6] Carvalho, Isaac M., Helena Bragança e Maria C. O. Brito: *Quenches em sistemas interagentes unidimensionais: formação de ordenamentos*. Universidade Federal de Minas Gerais, 2022. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.106.195405>. Citado 4 vezes nas páginas 13, 33, 42 e 52.
- [7] 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*. *Physical Review B*, 106(19), novembro 2022, ISSN 2469-9969. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.106.195405>. Citado 12 vezes nas páginas 13, 14, 33, 34, 36, 58, 59, 62, 63, 64, 66 e 73.
- [8] Carvalho, Isaac Martins: *The LaTeX Companion*. <https://github.com/isaacarvalho7/t-DMRG>, 2023. Acessado em: 2024-07-03. Citado 4 vezes nas páginas 14, 58, 59 e 73.
- [9] Altman, Ehud e et al.: *Quantum Simulators: Architectures and Opportunities*. *PRX Quantum*, 2:017003, 2021. Citado na página 15.
- [10] Will, Sebastian A., Jee Woo Park, Zoe Z. Yan, Huanqian Loh e Martin W. Zwierlein: *Coherent Microwave Control of Ultracold Molecules*. *Physical Review Letters*,

- 116(22), junho 2016, ISSN 1079-7114. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.116.225306>. Citado na página 16.
- [11] Chin, Cheng, Rudolf Grimm, Paul Julienne e Eite Tiesinga: *Feshbach resonances in ultracold gases*. *Reviews of Modern Physics*, 82(2):1225–1286, abril 2010, ISSN 1539-0756. <http://dx.doi.org/10.1103/RevModPhys.82.1225>. Citado na página 16.
- [12] Bloch, Immanuel: *Ultracold quantum gases in optical lattices*. *Nature Physics*, 1(1):23–30, October 2005, ISSN 1745-2481. <https://doi.org/10.1038/nphys138>. Citado 2 vezes nas páginas 17 e 20.
- [13] Gross, Christian e Immanuel Bloch: *Quantum simulations with ultracold atoms in optical lattices*. *Science*, 357(6355):995–1001, 2017. <http://science.sciencemag.org/content/357/6355/995>. Citado 3 vezes nas páginas 17, 18 e 20.
- [14] Jaksch, D. e P. Zoller: *The Cold Atom Hubbard Toolbox*. Preprint submitted to Elsevier Science, 2008. Citado na página 18.
- [15] Greiner, Markus, Olaf Mandel, Tilman Esslinger, Theodor W Hansch e Immanuel Bloch: *Quantum phase transition from a superfluid to a Mott insulator in a gas of ultracold atoms*. *Nature*, 415:39–44, 2002. Citado 2 vezes nas páginas 18 e 20.
- [16] HUBBARD, J.: *Electron correlations in narrow energy bands*, 1963. Citado na página 18.
- [17] Jördens, Robert, Niels Strohmaier, Kenneth Günter, Henning Moritz e Tilman Esslinger: *A Mott insulator of fermionic atoms in an optical lattice*. *Nature*, 455(7210):204–207, setembro 2008, ISSN 1476-4687. <http://dx.doi.org/10.1038/nature07244>. Citado 3 vezes nas páginas 19, 20 e 21.
- [18] Bragança, Helena: *Emaranhamento, dinâmica de não-equilíbrio e supercondutividade em sistemas de elétrons fortemente interagentes*. Tese de Doutorado, Universidade Federal de Minas Gerais - UFMG, Instituto de Ciências Exatas - ICEx, Departamento de Física, Belo Horizonte, MG, Brasil, Dezembro 2017. Orientadora: Prof. Dra. Maria Carolina de Oliveira Aguiar. Citado na página 20.
- [19] Francesca: *Extended Bose-Hubbard models with ultracold magnetic atoms*. *Journal Name*, Volume Number:Page Range, Year. Citado na página 20.
- [20] Cocchi, Eugenio, Luke A. Miller, Jan H. Drewes, Marco Koschorreck, Daniel Pertot, Ferdinand Brennecke e Michael Köhl: *Equation of State of the Two-Dimensional Hubbard Model*. *Physical Review Letters*, 116(17), abril 2016, ISSN 1079-7114. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.116.175301>. Citado 2 vezes nas páginas 20 e 21.

- [21] Greif, Daniel, Maxwell F. Parsons, Anton Mazurenko, Christie S. Chiu, Sebastian Blatt, Florian Huber, Geoffrey Ji e Markus Greiner: *Site-resolved imaging of a fermionic Mott insulator*. Science, 351(6276):953–957, 2016. <https://www.science.org/doi/abs/10.1126/science.aad9041>. Citado na página 20.
- [22] Wang, Xiqiao, Ehsan Khatami, Fan Fei, Jonathan Wyrick, Pradeep Namboodiri, Ranjit Kashid, Albert F. Rigosi, Garnett Bryant e Richard Silver: *Quantum Simulation of an Extended Fermi-Hubbard Model Using a 2D Lattice of Dopant-based Quantum Dots*. Nature Communications, 13(1), novembro 2022, ISSN 2041-1723. <http://dx.doi.org/10.1038/s41467-022-34220-w>. Citado 3 vezes nas páginas 20, 22 e 23.
- [23] Gemelke, Nathan: *VIEWPOINT: A Close Look at the Fermi-Hubbard Model*. Physics, 17:129, 2024. The engineered simplicity of a cold-atom system described by the 2D Fermi-Hubbard model allows for a precision test of the model’s equation of state. Citado na página 21.
- [24] 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, março 2016, ISSN 1460-6976. <http://dx.doi.org/10.1080/00018732.2016.1194044>. Citado na página 24.
- [25] Eisert, J., M. Friesdorf e C. Gogolin: *Quantum many-body systems out of equilibrium*. Nature Physics, 11(2):124–130, fevereiro 2015, ISSN 1745-2481. <http://dx.doi.org/10.1038/nphys3215>. Citado 2 vezes nas páginas 24 e 25.
- [26] Diehl, S., A. Micheli, A. Kantian, B. Kraus, H. P. Büchler e P. Zoller: *Quantum states and phases in driven open quantum systems with cold atoms*. Nature Physics, 4(11):878–883, setembro 2008, ISSN 1745-2481. <http://dx.doi.org/10.1038/nphys1073>. Citado na página 24.
- [27] Barreiro, Julio T., Markus Müller, Philipp Schindler, Daniel Nigg, Thomas Monz, Michael Chwalla, Markus Hennrich, Christian F. Roos, Peter Zoller e Rainer Blatt: *An open-system quantum simulator with trapped ions*. Nature, 470(7335):486–491, fevereiro 2011, ISSN 1476-4687. <http://dx.doi.org/10.1038/nature09801>. Citado na página 24.
- [28] Mitra, Aditi: *Quantum Quench Dynamics*. Annual Review of Condensed Matter Physics, 9(1):245–259, março 2018, ISSN 1947-5462. <http://dx.doi.org/10.1146/annurev-conmatphys-031016-025451>. Citado na página 25.
- [29] Avella, Adolfo e Ferdinando Mancini: *Strongly Correlated Systems - Numerical Methods*. Springer, Springer, 2013. Citado 2 vezes nas páginas 25 e 55.

- [30] Schneider, Ulrich, Lucia Hackermüller, Jens Philipp Ronzheimer, Sebastian Will, Simon Braun, Thorsten Best, Immanuel Bloch, Eugene Demler, Stephan Mandt, David Rasch e Achim Rosch: *Fermionic transport and out-of-equilibrium dynamics in a homogeneous Hubbard model with ultracold atoms*. Nature Physics, 8(3):213–218, janeiro 2012, ISSN 1745-2481. <http://dx.doi.org/10.1038/nphys2205>. Citado 3 vezes nas páginas 25, 26 e 30.
- [31] Cheneau, M., P. Barmettler, D. Poletti, M. Endres e P. Schauß: *Light-cone-like spreading of correlations in a quantum many-body system*. Nature, 481:484–487, 2012. Citado 3 vezes nas páginas 26, 27 e 29.
- [32] Manmana, Salvatore R, Stefan Wessel, Reinhard M Noack e Alejandro Muramatsu: *Time evolution of correlations in strongly interacting fermions after a quantum quench*. Physical Review B, 79(15):155104, 2009. Citado 3 vezes nas páginas 27, 28 e 29.
- [33] Guardado-Sanchez, Elmer *et al.*: *Quench Dynamics of a Fermi Gas with Strong Nonlocal Interactions*. Physical Review X, 11(2):021036, 2021. Citado 2 vezes nas páginas 29 e 30.
- [34] Su, Yong Guang, Ruifeng Lu, Hantao Lu e Can Shao: *Time-resolved single-particle spectrum of the one-dimensional extended Hubbard model after interaction quenches*. Journal of Physics B: Atomic, Molecular and Optical Physics, 56:085101, 2023. Citado na página 30.
- [35] Canovi, E., E. Ercolessi, A. Nardesi, L. Taddia e D. Vodola: *Dynamics of entanglement entropy and entanglement spectrum crossing a quantum phase transition*. Physical Review B, 89(10):104303, 2014. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.89.104303>. Citado 4 vezes nas páginas 30, 31, 32 e 36.
- [36] Calabrese, Pasquale e John Cardy: *Evolution of entanglement entropy in one-dimensional systems*. Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment, 2005(04):P04010, abril 2005, ISSN 1742-5468. <http://dx.doi.org/10.1088/1742-5468/2005/04/P04010>. Citado na página 32.
- [37] Eisler, Viktor e Ingo Peschel: *Evolution of entanglement after a local quench*. Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment, 2007(06):P06005–P06005, junho 2007, ISSN 1742-5468. <http://dx.doi.org/10.1088/1742-5468/2007/06/P06005>. Citado na página 33.
- [38] Schollwöck, U.: *The density-matrix renormalization group*. Reviews of Modern Physics, 77(1):259–315, abril 2005, ISSN 1539-0756. <http://dx.doi.org/10.1103/RevModPhys.77.259>. Citado 2 vezes nas páginas 38 e 39.

- [39] Eisert, J., M. Cramer e M. B. Plenio: *Colloquium: Area laws for the entanglement entropy*. Reviews of Modern Physics, 82(1):277–306, fevereiro 2010, ISSN 1539-0756. <http://dx.doi.org/10.1103/RevModPhys.82.277>. Citado na página 38.
- [40] Schollwöck, Ulrich: *The density-matrix renormalization group in the age of matrix product states*. Annals of Physics, 326(1):96–192, janeiro 2011, ISSN 0003-4916. <http://dx.doi.org/10.1016/j.aop.2010.09.012>. Citado 10 vezes nas páginas 41, 42, 43, 47, 49, 50, 51, 52, 53 e 55.
- [41] Fishman, Matthew, Steven White e Edwin Stoudenmire: *The ITensor Software Library for Tensor Network Calculations*. SciPost Physics Codebases, agosto 2022. <http://dx.doi.org/10.21468/SciPostPhysCodeb.4>. Citado 3 vezes nas páginas 42, 59 e 65.
- [42] Bressan, G. M.: *Aplicação da Decomposição em Valores Singulares para compressão de imagens*. Revista Eletrônica Paulista de Matemática, 22(1), julho 2022, ISSN 2316-9664. <https://www.fc.unesp.br/Home/Departamentos/Matematica/revistacqd2228/v22n1a07ic-aplicacao-da-decomposicao-em.pdf>. Citado na página 43.
- [43] Peschel, Ingo: *Special Review: Entanglement in Solvable Many-Particle Models*. Brazilian Journal of Physics, 42(3–4):267–291, março 2012, ISSN 1678-4448. <http://dx.doi.org/10.1007/s13538-012-0074-1>. Citado na página 44.
- [44] Pulino, Petrolino: *Métodos de Diferenças Finitas Aspectos Teóricos, Computacionais e Aplicações*. Pulinus, Campinas-SP, 1ª edição, 2008. Citado na página 45.
- [45] Ballentine, Leslie E.: *Quantum Mechanics: A Modern Development*. World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., Singapore, revised first edição, 1998, ISBN 978-981-02-2340-0. Citado na página 49.
- [46] 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, abril 2004, ISSN 1742-5468. <http://dx.doi.org/10.1088/1742-5468/2004/04/P04005>. Citado na página 56.
- [47] Ejima, Satoshi e Satoshi Nishimoto: *Phase Diagram of the One-Dimensional Half-Filled Extended Hubbard Model*. Physical Review Letters, 99(21), novembro 2007, ISSN 1079-7114. <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.99.216403>. Citado 2 vezes nas páginas 59 e 60.