

分类号 \_\_\_\_\_

密级 \_\_\_\_\_

UDC \_\_\_\_\_

编号 \_\_\_\_\_

# 中国科学院研究生院 硕士学位论文

用密度矩阵重正化群方法研究一维量子系统及量子杂质  
系统的动力学性质

郭成

指导教师 向涛 研究员, Jan von Delft 教授

中国科学院理论物理研究所

申请学位级别 硕士 学科专业名称 凝聚态物理

论文提交日期 2008年5月 论文答辩日期 2008年5月

培养单位 中国科学院理论物理研究所

学位授予单位 中国科学院研究生院

答辩委员会主席 苏刚



# Using Density Matrix Renormalization Group Method to Study the Real-Time Dynamics of 1D Quantum Systems and Quantum Impurity systems

**Cheng Guo**

Supervisor:

Prof. Tao Xiang, Prof. Jan von Delft

Institute of Theoretical Physics  
Chinese Academy of Sciences

June, 2008

*Submitted in total fulfilment of the requirements for the degree of Master  
in Condensed Matter Physics*



## 摘 要

密度矩阵重正化群方法 (DMRG) 是上世纪九十年代发展起来的一种非常精确的计算一维量子多体格点系统基态和低能激发态性质的数值方法。最近几年DMRG已经被推广到可以分别精确计算一维量子格点系统的动力学演化(自适应含时密度矩阵重正化群, t-DMRG)和热力学性质(有限温密度矩阵重正化群, FTDMRG)。本文中我们将t-DMRG与FTDMRG结合起来尝试了计算一维量子系统在有限温度下的动力学性质。

另一方面,最新实验技术的发展对在理论和数值上研究量子杂质系统的动力学提出了迫切的要求。借助数值重正化群(NRG)中的一些技巧,我们将t-DMRG和FTDMRG推广到计算量子杂质系统的动力学和热力学性质。初步测试结果表明, t-DMRG和FTDMRG能够很精确和有效率的研究量子杂质系统的动力学和热力学性质。

**关键词:** 密度矩阵重正化群, 矩阵乘积态, 数值重正化群, 量子杂质系统, 耗散量子系统, 含时哈密顿量, 共振能级模型, 耗散Landau-Zener模型, 自旋-玻色子模型



## Abstract

Density matrix renormalization group method was firstly developed during the 90's last century as a numerical method to study the properties of the ground state and low-lying states of the one dimensional quantum lattice systems. DMRG has been extended to precisely calculate the real-time dynamics (t-DMRG) and thermodynamics (FTDMRG) of 1D quantum lattice systems. We try to combine t-DMRG and FTDMRG to calculate the real-time dynamics of 1D quantum systems at finite temperature.

On the other hand, recent experimental progresses demand theoretical and numerical methods to help experimentalists to study the real-time dynamics of quantum impurity systems. By borrowing some techniques in numerical renormalization group method(NRG), we extend the t-DMRG and FTDMRG method to studying the thermodynamics and real-time dynamics of quantum impurity models. Our first results show that DMRG is a very accurate and efficient method to study the real-time dynamics and thermodynamics of quantum impurity systems.

**Keywords:** DMRG, MPS, NRG, quantum impurity system, dissipative quantum system, time-dependent hamiltonian, dissipative Landau-Zener problem, resonant level model, spin-boson model



# 目 录

摘要	i
Abstract	iii
目录	v
第一章 引言	1
第二章 自适应含时密度矩阵重正化群与有限温密度矩阵重正化群	5
2.1 传统密度重正化群方法回顾	5
2.1.1 无限链长DMRG	5
2.1.2 有限链长DMRG	8
2.1.3 物理量的计算	9
2.2 自适应含时密度矩阵重正化群	11
2.2.1 其他含时的密度矩阵重正化群方法	11
2.2.2 由来：量子信息的帮助	12
2.2.3 原理与步骤	14
2.2.4 物理量的计算	16
2.3 有限温密度矩阵重整化群	18
2.3.1 原理	18
2.3.2 实现细节	20
第三章 用DMRG研究一维量子系统在有限温下的动力学性质	23
3.1 模型与原理	23
3.2 步骤	24
3.3 结果	25

<b>第四章</b>	<b>矩阵乘积态表象简介</b>	<b>29</b>
4.1	定义 . . . . .	29
4.1.1	例子 . . . . .	30
4.2	DMRG与矩阵乘积态 . . . . .	31
4.3	对称性的利用 . . . . .	32
<b>第五章</b>	<b>量子杂质系统与数值重正化群</b>	<b>35</b>
5.1	量子杂质系统 . . . . .	35
5.1.1	背景 . . . . .	35
5.1.2	重要模型 . . . . .	35
5.2	数值重正化群方法 . . . . .	38
5.2.1	对数离散化 . . . . .	40
5.2.2	映射到Wilson链 . . . . .	42
5.2.3	迭代对角化 . . . . .	44
5.3	从矩阵乘积态表象看NRG与DMRG . . . . .	45
<b>第六章</b>	<b>用DMRG研究共振能级模型</b>	<b>49</b>
6.1	背景 . . . . .	49
6.2	模型与方法 . . . . .	50
6.2.1	Landau-Zener模型 . . . . .	51
6.2.2	耗散Landau-Zener模型 . . . . .	51
6.2.3	共振能级模型 . . . . .	52
6.3	用DMRG研究静态共振能级模型 . . . . .	53
6.3.1	热力学性质 . . . . .	54
6.3.2	动力学关联函数 . . . . .	54
6.4	用DMRG研究哈密顿量含时的共振能级模型的动力学 . . . . .	56
6.4.1	精确解 . . . . .	58
6.4.2	精确解结果 . . . . .	59
6.4.3	DMRG结果 . . . . .	62
6.4.4	物理分析 . . . . .	63

---

第七章 总结与展望	67
附录 A 波函数变换	69
附录 B $z$ 平均	71
附录 C 英文术语缩写及翻译对照表	73
参考文献	75
发表文章目录	83
致谢	85



## 第一章 引言

多粒子量子力学问题是凝聚态物理研究领域中的一个根本问题。由于问题的复杂性我们往往需要借助数值计算的方法来进行研究。从数值计算的角度来看量子多体问题我们遇到的一个根本性的障碍是描述系统的空间的维数随粒子数指数发散。例如单个粒子的状态空间的维数是 $d$ , 那么对于 $N$ 个粒子, 要精确描述系统的状态所需要的空间维数是 $d^N$ 。这个所谓的“指数墙”限制了我们用普通的解薛定谔方程的方法来研究多粒子数的系统。

人们想出了很多办法来解决这个问题, 例如密度泛函方法或者量子蒙特卡洛方法。在本论文中我们要讨论的是利用了重正化思想的数值方法。这种重正化思想最早被75年Wilson提出的数值重正化群(Numerical Renormalization Group, NRG)所使用[66]。数值重正化群可以很精确的计算量子杂质问题, 例如Kondo问题。但是当人们将数值重正化群用到实空间的一维量子格点系统时发现计算结果远不如数值重正化群在能量空间计算量子杂质问题时效果好。

1992年Wilson的学生White在分析了NRG在计算实空间一维量子格点系统失效的原因之后, 提出了密度矩阵重正化群方法(Density Matrix Renormalization Method, DMRG)。DMRG可以非常精确的计算一维系统的基态和低能级发态的性质[61]。

DMRG在计算一维近邻相互作用格点系统的成功很自然的使人们尝试把它进行推广。这包括两个方面: 一是推广到计算动力学性质[20, 42, 28, 23]和热力学性质[9, 60], 二是推广到计算其它类型的问题, 例如高维格点系统[37, 64, 21, 68], 动量空间[67, 36], 量子化学[14, 62, 13]系统。在后者的尝试过程中, 人们发现DMRG在计算这些问题时需要保留很大的状态数目, 而且所得的结果也远不如DMRG在计算一维近邻相互作用系统所得接结果精确。这促使人们开始思考为什么DMRG在计算这类问题的时候效果不是很好, 而在计算一维近邻相互作用系统时能给出非常好的结果。这便开始了DMRG基础的理论研究。

在研究DMRG的理论基础的过程中, Östlund和Rommer最早指出可以使用矩阵乘积态表象(Matrix Product State Representation)来描述DMRG[39], 并表明DMRG实际是一种对矩阵乘积态的变分方法。基于矩阵乘积态, 人们取得了一系列对DMRG本质的认识并且在此基础上提出了很多改进DMRG的方法,

例如Verstraete等人利用矩阵乘积态的分析改进了DMRG在周期性边界条件时的精度[55]。

在计算凝聚态物理学家利用矩阵乘积态研究DMRG方法本身的问题的同时，量子信息物理学家也对矩阵乘积态表象产生了兴趣。他们开始利用矩阵乘积态探讨量子系统的经典模拟问题。所谓经典模拟是指用经典计算机（也就是我们现在使用的计算机）来模拟。量子信息物理学家之所以研究这个问题是因为他们想知道什么样的量子系统是可以经典计算机来模拟的，而什么样的量子系统不可能用经典计算机来模拟。这样他们就知道应该选择什么样的量子系统作为量子计算机的基础。因为使用经典计算机可以有效模拟的量子系统制成的量子计算机是体现不出量子计算机的优越性的。2003年Vidal提出了一种叫做TEBD的算法[?]，并且证明任何纠缠度不大的量子系统的动力学都可以使用TEBD算法在经典计算机上加以模拟，所以量子计算机应该选用那些纠缠度大的系统。

凝聚态物理中研究的很多系统按照TEBD算法的标准来说正好属于纠缠度不大的系统，例如一维近邻相互作用系统，所以对于凝聚态物理学家来说TEBD是一种很有用的模拟量子系统动力学的方法。Daley等人[12]和White等人[65]分别将TEBD算法与DMRG算法结合起来，提出了自适应含时密度矩阵重正化群（Adaptive time-dependent DMRG, t-DMRG)来计算一维系统的含时演化问题，后来Feiguin等人又在t-DMRG的基础上提出了FTDMRG来计算一维有限系统的热力学性质[15]。如果说凝聚态物理学家帮助量子信息物理学家找到了TEBD，则量子物理学家反过来帮助凝聚态物理学家提出了t-DMRG。

矩阵乘积态语言不仅架起了DMRG与量子信息的一座桥梁，同时在数值重正化群与DMRG之间也架起了另外一座桥梁。2005年Verstraete等人证明了NRG也可以用矩阵乘积态的语言来描述，而且很大程度上NRG与DMRG的数学结构是相通[56]。我们正是利用了这一点来使用DMRG研究具有含时哈密顿量的量子杂质系统。

哈密顿量含时的量子杂质系统之所以在最近几年越来越引起人们的关注主要是因为最近纳米技术的发展使人们现在可以尝试制造固态的纳米量子信息处理器件。而这类量子器件的基本单元往往可以用哈密顿量含时的量子杂质系统来描述。所以人们希望能够从数值和理论上来研究这类系统以帮助实验物理学家设计制造量子器件。现有的含时NRG只能处理突变型的哈密顿量而不能处理

随时间变化的哈密顿量[3]。正是基于这种背景我们尝试了使用DMRG来研究哈密顿量含时的量子杂质系统。

本文的内容是如下安排的：第二章我们系统的介绍了t-DMRG和FTDMRG，第三章我们将t-DMRG与FTDMRG结合起来计算了有限温度下一维系统的动力学性质的尝试，第四章我们简要介绍了矩阵乘积态，第五章我们介绍了数值重正化群的基本步骤以及NRG与DMRG的关系，第六章我们尝试了用DMRG来研究一个精确可解的哈密顿量含时的量子杂质系统。



## 第二章 自适应含时密度矩阵重正化群与有限温密度矩阵重正化群

自适应含时密度矩阵重正化群 (Adaptive time-dependent DMRG, t-DMRG)是在传统DMRG的基础上的扩展, 而且在实际运用t-DMRG时往往需要用传统DMRG来计算初始状态。所以在介绍t-DMRG之前有必要首先介绍一下传统的密度矩阵重正化群方法。

### 2.1 传统密度重正化群方法回顾

Wilson在1975年提出的数值重正化群方法 (NRG) [66] 成功解决了Kondo问题等一系列量子杂质问题。NRG在处理杂质问题上的成功使人们自然想到: 如果用实空间的格点来代替量子杂质问题中的能级或许可以用NRG来计算一些一维量子多体系统的基态性质。但是实际计算人们却发现NRG的效果很差。

White和Noack分析了数值重正化群在计算一维实空间格点系统失效原因, 指出关键是当用NRG在实空间增长链长来计算基态时, 整个系统的基态和增长过程中的孤立的不完整的系统的基态在边界条件上有很大的不同。在此基础上White在1992年提出了密度矩阵重正化群[63]解决了计算一维量子系统基态性质的问题。

密度矩阵重正化群克服NRG遇到的问题的思路是通过构造一个与系统连接的环境来模拟系统在处于热力学极限时的边界条件。这样在系统增长过程中便不再是一个孤立的系统。下面具体介绍一下密度矩阵重正化群的计算步骤。

#### 2.1.1 无限链长DMRG

传统的密度矩阵重正化群主要用来计算一维量子多体实空间格点系统的基态和激发态的性质。从数值上处理量子多体系统的主要困难是所谓的指数墙困难。即随着系统格点数目的增多, 用来描述系统的状态空间的维数是指数发散的。假如每个格点的表示的维数是  $d$ , 系统的大小为  $L$ , 则总系统的希尔伯特空间的维数是  $d^L$ 。

NRG和DMRG解决这个问题的思想是逐次增加格点数目，当整个系统的希尔伯特空间的维数超过了事先所限定的维数 $m$ 之后，则将这个系统矢量投影到一个维数为 $m$ 的子希尔伯特空间，并且使得系统矢量的尽可能多的分量落到这个子空间内。然后用这个子希尔伯特空间来近似表示原来的空间并以此类推知道系统增长到所要的长度为止。这种重正化方法之所以可行是因为对于凝聚态物理学家感兴趣的基态和激发态往往只是居于在整个希尔伯特空间的一小部分。具体的细节超出本文范围，不在此讨论了[53]。

密度矩阵重正化群方法包括无限链长DMRG和有限链长DMRG，简称无限DMRG和有限DMRG。无限DMRG是指将链长由最初的两个格点（一个系统格点，一个环境格点，或者按照左右分为左侧格点和右侧格点）逐次增加一个格点直到达到所要求的链长为止。之所以叫做无限DMRG是因为这个过程可以无限制的增加链长。图 2.1所示为无限DMRG的步骤。

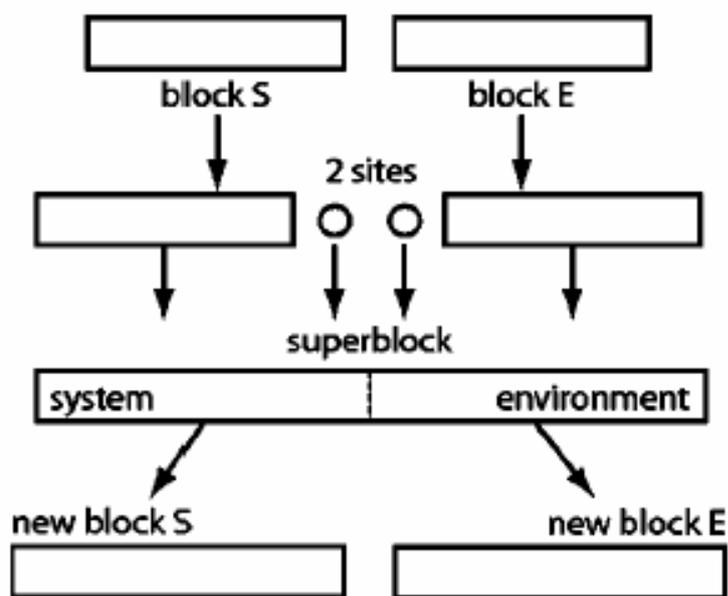


图 2.1: 无限链长DMRG示意图 (本图及下图均摘自[47])

一个典型的用无限DMRG计算基态的具体步骤是：

1. 初始化。初始化是生成最初的系统和环境。一般是生成一个系统格点，一个环境格点以及生成系统和环境块的哈密顿量等相关算符。即图 2.1中的

第一行。

2. 增加一个格点。系统和环境块各增加一个格点后，表示的空间扩大，所以需要原有的算符和新加格点的所有算符在新的希尔伯特空间里重新表示出来。原来的哈密顿量也要因为增加的新的格点做相应的更新。记新的系统和环境的维数为 $m'$ 。如果 $m' \leq m$ 则继续执行这一步再增加一个格点。这对应于图2.1的第二行。
3. 构造总系统（或超快，super block）并计算其基态。即将环境块和系统块连在一起组成一个总系统，求这个总系统的哈密顿量的基态。这个哈密顿量的维数是 $m'^2$ 在实际计算中 $m'$ 往往需要达到 $10^3$ 的数量级。所以如果显式的表示出这个哈密顿量的所有元素的话那么我们需要储存 $10^{12}$ 个双精度变量。这显然远远超过了现有计算机的能力。其实这样做也是没有必要的，因为这个哈密顿量的绝大多数元素都是零，是一个稀疏度很高的稀疏矩阵。在实际的DMRG计算中我们甚至也不是用稀疏矩阵的方法把这个哈密顿量求出来，而是通过定义一个函数：

$$y = f(H_L, H_R, H_M, x) = H_S x \quad (2.1)$$

其中 $H_L$ 和 $H_R$ 分别是左右块的哈密顿量， $H_M$ 是连接左右块的哈密顿量项， $H_S$ 是没有被显示的构造出来的总系统的哈密顿量。 $x$ 和 $y$ 分别是被乘波函数和结果波函数。当知道了这个乘法函数后，我们就可以利用Lancos等算法来求出这个总系统哈密顿量的基态。

4. 从总系统基态求左右块的约化密度矩阵。加入上面所求出的基态是 $|\psi\rangle$ ，那么左右块的约化密度矩阵分别是：

$$\rho_L = Tr_R |\psi\rangle\langle\psi| \quad (2.2)$$

$$\rho_R = Tr_L |\psi\rangle\langle\psi| \quad (2.3)$$

5. 对角化约化密度矩阵。对角化约化密度矩阵，然后选取最大的 $m$ 个本征值所对应的本征矢量作为新的截断了的希尔伯特空间的基。这样的一个 $m$ 维空间是所有可能的 $m$ 维空间中能使左块（或右块）在原来的大的空间中的状态获得最大投影的空间。换句话说这个截断了的希尔伯特空间保留了原来的最可几状态。通过约化密度矩阵选取最可几状态是DMRG与NRG的最大区别。

6. 重正化左右块的算符。也就是用上一步求出的新的基矢来重新分别表示左右块的所有算符。
7. 回到第(2)步知道达到所需的链长为止。

### 2.1.2 有限链长DMRG

有时无限DMRG所求出的结果还不够精确，这主要有两个原因：

- 在无限DMRG的初始阶段环境块比较小，不能很好的模拟系统处于热力学极限下的情形。
- 对于不均匀系统，比如有外加的空间周期势场或者随机势场，在无限DMRG的增加链长的过程中的基态与系统最后的基态有较大的差别，所以在增加链长的过程中选择的状态只是表示该链长的基态的最佳状态而不是表示最终链长的最佳状态。

有限链长DMRG可以克服上述的两个问题。如图 2.2所示，具体做法是：

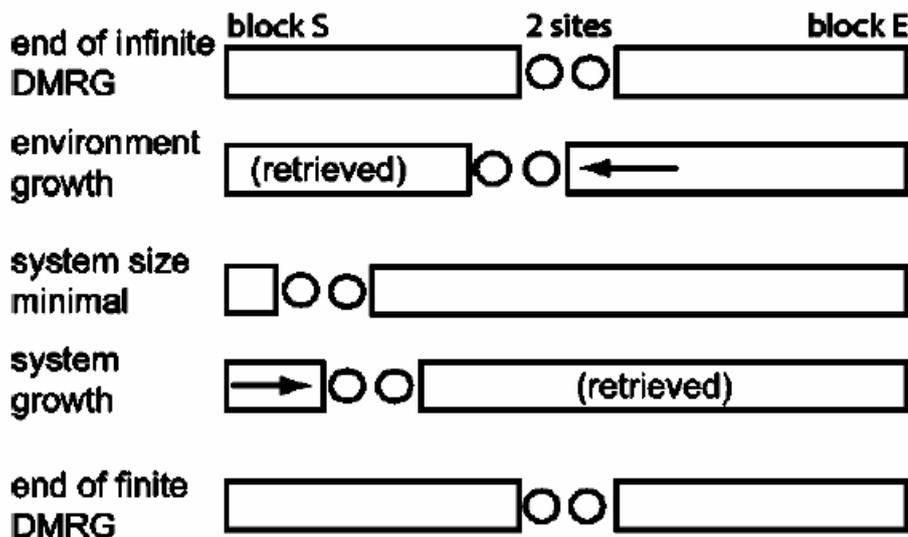


图 2.2: 有限链长DMRG示意图

1. 首先使用无限DMRG增加到目标链长。

2. 仍然按照无限DMRG的做法，继续增加一个格点到其中的一块。
3. 另外一块减去一个格点。也就是将另外一块还原到上一步的状态。所以要使用无限DMRG必须在有限DMRG的过程中保留中间过程的块的信息。
4. 构造总系统求基态。这一步和无限DMRG的第3步一样。需要指出的是在这一步中有一个重要的提高求基态的迭代算法的收敛速度的技巧，也就是所谓的预测波函数(附录A)。预测波函数是指把上一步的波函数也类似于变换块的算符的方法一样变换到移动了一个格点之后的新的基中。然后以这个波函数作为求这一步的基态的迭代算法的初始猜测。因为前后两步的波函数差别很小，因此以上一步的波函数作为迭代初始值要比一个随机的初始波函数更加接近最终的解，从而大大减少了迭代次数。
5. 继续第2,3步直到其中的一块只剩下一个格点。然后反方向增移动知道到达另一端，再次折回回到中间完成了一次完整扫描优化过程。如有必要可以进行多次扫描。

在后面我们还会提到，无限DMRG之所以能达到更高的精度是因为这种扫描的过程其实是一个变分求极小值的过程。

### 2.1.3 物理量的计算

用DMRG求出了基态波函数也就同时求出了总系统的能量。但是我们往往还需要计算其他一些算符在基态下的期望值。最常见的是单个格点的物理量的期望值，比如某一个格点上的粒子数和自旋，和两个格点物理量的期望值，如格点格点之间个关联函数等等。对于更多的联合算符的期望值就需要用第四章要讲到的矩阵乘积态表象重新表述过的DMRG来计算，这里我们不考虑这种情况。

#### 2.1.3.1 单个格点物理量

如前所述在无限有限DMRG过程中，块算符和块中的所有格点的算符都经过了重正化在新的表象中表示了出来。假如最后一步总系统的基是 $|s, e\rangle$ 。(注意我们这里用了新系统 $|s\rangle$ 和新环境 $|e\rangle$ 这种两部分组成的基失而不是有些文献中

的四块（老系统，老环境和中间的两个格点）的基矢。）不失一般性假设我们要计算新系统中的一个格点 $x$ 上的算符 $A^x$ 的期望值。 $A^x$ 在新系统基矢下的表示是

$$A^x = \sum_{s,s'} A_{s,s'}^x |s'\rangle \langle s| \quad (2.4)$$

基态波函数在此表象下是:

$$|\Psi_g\rangle = \sum_{s,e} \Psi_{s,e} |s, e\rangle \quad (2.5)$$

那么 $A_x$ 在基态的期望值是:

$$\begin{aligned} \langle A^x \rangle_g &= \langle \Psi_g | A^x | \Psi_g \rangle \\ &= \sum_{s,e,s',e'} \Psi_{s',e'}^* \Psi_{s,e} A_{s,s'}^x \langle s', e' | s' \rangle \langle s | s, e \rangle \end{aligned} \quad (2.6)$$

### 2.1.3.2 两格点物理量

对于两格点算符我们要分两种情况来讨论。一种是两个格点分处在不同块上的情况。例如 $A^x, B^y$ 分别是处于新系统块上的 $x$ 格点和处于新环境上的 $y$ 格点上的算符。在各块中它们分别表示为:

$$A^x = \sum_{s,s'} A_{s,s'}^x |s'\rangle \langle s| \quad (2.7)$$

和

$$B^y = \sum_{e,e'} B_{e,e'}^y |e'\rangle \langle e| \quad (2.8)$$

那么两格点关联函数可以如下计算:

$$\begin{aligned} \langle A^x B^y \rangle_g &= \langle \Psi_g | A^x B^y | \Psi_g \rangle \\ &= \sum_{s,e,s',e'} \Psi_{s',e'}^* \Psi_{s,e} A_{s,s'}^x B_{e,e'}^y \langle s', e' | s' \rangle \langle s | s, e \rangle \end{aligned} \quad (2.9)$$

当两个格点处于同一块上时，例如我们有处于系统块上的 $z$ 格点的算符 $C^z$ ，表示为

$$C^z = \sum_{s,s'} C_{s,s'}^z |s'\rangle \langle s| \quad (2.10)$$

要求 $\langle A^x C^z \rangle$ 人们首先想到的是可以先将 $A_{s,s'}^x$ 与 $C_{s,s'}^z$ 相乘

$$\begin{aligned} A^x C^z &\approx \sum_{s,s'} A_{s,s'}^x |s'\rangle \langle s| \sum_{\tilde{s},\tilde{s}'} C_{\tilde{s},\tilde{s}'}^z |\tilde{s}'\rangle \langle \tilde{s}| \\ &= \sum_{s',\tilde{s}} \left( \sum_s A_{s,s'}^x C_{\tilde{s},s}^z \right) |s'\rangle \langle \tilde{s}| \end{aligned} \quad (2.11)$$

然后再求这个乘积算符的期望值，但是实际计算就会发现这样得出的结果精度非常差。这是因为在上式第二部中我们运用了近似关系

$$\sum |s\rangle \langle s| \approx 1 \quad (2.12)$$

正确的做法是在长链的过程中将 $A^x$ 和 $C^z$ 作为一个整体算符生成，然后再随后的步骤中像处理单格点算符一样重正化。例如假设 $x < y$ 那么在长链的过程中我们这样来求AC这个整体算符：

$$A^x C^z = \sum_{s,s'} A_{s,s'}^x |s'_{old}\rangle \langle s_{old}| \otimes \sum_{m_z, m'_z} C_{m_z, m'_z}^z |m'_z\rangle \langle m_z| \quad (2.13)$$

然后重正化后求得

$$A^x C^z = \sum_{s,s'} (A^x C^z)_{s,s'} |s'\rangle \langle s| \quad (2.14)$$

## 2.2 自适应含时密度矩阵重正化群

自适应含时密度矩阵重正化群是一种非常精确有效的计算一维格点系统动力学的方法。从04年诞生以来已被应用到研究很多动力学问题上：远离平衡态的自旋1/2系统的动力学[18], 光晶格中的超冷玻色子[25], 量子点的输运问题[2], 量子相变的动力学[40], 数值上演示个研究自旋电荷分离[26]。这些工作表明t-DMRG是一种很灵活的方法。

### 2.2.1 其他含时的密度矩阵重正化群方法

在自适应含时密度矩阵重正化群之前，已经有一些使用DMRG计算含时问题的尝试。比如Cazalilla和Marston在2002年提出的静态含时密度矩阵重正化群 (static time-dependent DMRG) [10], 以及以后罗洪刚, 向涛和王孝群对其的改进[31]。

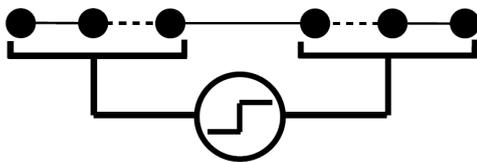


图 2.3: 描述电子的一维格点系统的两侧在 $t = 0$ 时刻突然加上了一个偏压。计算通过中间链接处的电流随着时间的变化。

静态含时密度矩阵重正化群已经可以计算淬火型的含时问题。例如图2.3所示是一个描述导电电子的格点系统，在 $t = 0$ 时突然升高一侧电压然后计算通过连接点从一侧流向另一侧的电流随时间的变化。

图2.4所示为静态含时密度矩阵重正化群与改进前后的t-DMRG计算的电流随时间变化。在保留了512个状态时，改进后的静态含时密度矩阵重正化群可以算到的时间长度是 $50w \sim 60w$ ，其中 $w$ 是半能带宽度。

另外Schmitteckert所用的Krylov子空间近似的方法[46]在数学结构上与经过罗洪刚等人改进后的静态含时密度矩阵重正化群是近似等价的。静态含时密度矩阵重正化群的优点是适用范围广，可以比较容易的推广到具有长程相互作用的系统。缺点是计算量非常大，对计算机资源的要求很高，这在很大程度上限制了其应用。所以人们没有放弃寻找新的方法的努力。

### 2.2.2 由来：量子信息的帮助

另一方面，近年来量子信息领域的一个热门研究问题是在什么样的条件下量子计算机能够具有经典计算机无法比拟的处理能力。因为量子计算机本质上是一个量子系统，所以这个问题又可表述为：什么样的量子系统的动力学行为不能用经典计算机来很好的模拟。因为假如一个量子计算机基于的量子系统的动力学可以被经典计算机来模拟，那么我们就可以用经典计算机来模拟这个量子系统，然后再用这个模拟的量子系统来作为量子计算机进行计算从而达到和使用真正的基于此类量子系统的量子计算机近似的效果。所以凡是可以用经典计算机来有效的模拟的量子系统都不会被真正的量子计算机所采用的。

量子信息物理学家和凝聚态物理学家在用（经典）计算机来模拟量子系统这个问题上碰到了一起但却带着不同的目的。凝聚态物理学家希望能用计算机

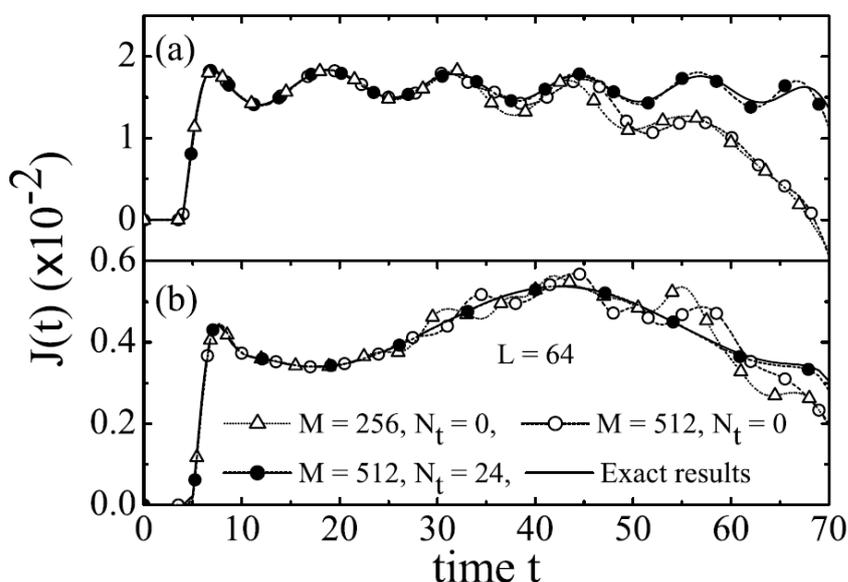


图 2.4: 改进前后静态含时密度矩阵重正化群计算的电流。时间单位半等待宽度的倒数。 $N_t = 0$  是改进前的结果,  $N_t = 24$  是改进后的结果。 $M$  是保留状态的数目。具体参数意义请参照[31, 10]。改进后的静态含时密度矩阵重正化群能够在算到较长的时间, 但是计算量的代价非常大。

来研究凝聚态领域中遇到的量子系统, 希望寻找到能够很好的模拟量子系统的经典计算机算法。而量子信息物理学家则希望能找到这样一种量子系统: 这种量子系统是不可能以任何一种已知和未知的算法在经典计算机上来模拟的。因此量子信息物理学家需要一些判据来判断什么样的量子系统可以或者不可以用经典计算机来模拟。

2003年Vidal提出的time-evolving block decimation (TEBD)[59, 57] 算法就是在这样一种背景下提出的判据。Vidal 证明量子计算机必须选用那些有很大的纠缠度的量子系统, 因为凡是纠缠度不够大的系统都可以用TEBD算法在经典计算机上有效的模拟。

从凝聚态物理学家的角度来看TEBD则是: TEBD可以用来模拟纠缠度不很大的量子系统。而很多凝聚态领域中感兴趣的量子系统以TEBD的标准来说纠缠度都不大, 因而可以用TEBD算法来很好的模拟。比如大多数一维量子系

统。所以量子信息物理学家帮助凝聚态物理学家找到了一种可以模拟很多量子系统动力学的方法，虽然这不是他们的本意。

Daley[12]等人和White[65]等人分别将TEBD纳入到DMRG算法中，提出了自适应含时密度矩阵重正化群算法用来模拟一维量子系统的动力学。之所以叫“自适应”是因为与静态含时密度矩阵重正化群的构造一个能很好包括系统整个演化过程中的所有中间状态的希尔伯特空间的方法不同，t-DMRG只是在每一个时间步构造出能很好包括这一步的状态的希尔伯特空间，而在下一步构造另一个希尔伯特空间。正是因为这个原因t-DMRG要比静态含时密度矩阵重正化群对计算机的资源要求小的多，计算速度也快的多。缺点是只能处理具有近邻相互作用的系统。后来Feiguin和White又提出了time-step targeting方法改进了t-DMRG是其可以应用到非近邻和梯子系统[15]。本文只讨论最初版本的t-DMRG。

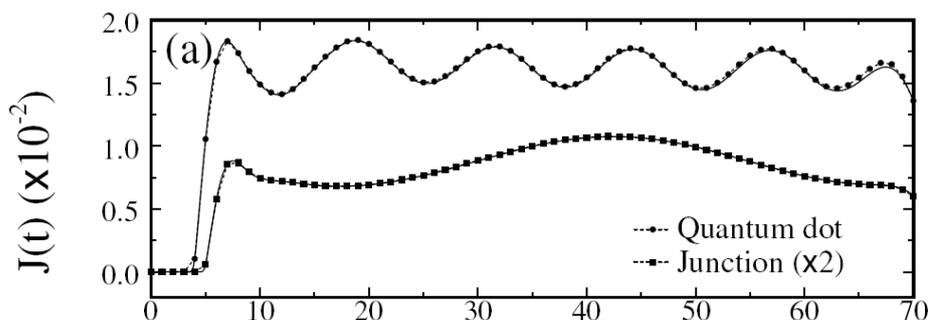


图 2.5: 用t-DMRG算的电流随时间的变化。只保留了128个状态。本图摘自[65]。

图2.5是用t-DMRG算的与图2.4所示的同样的一个问题。而t-DMRG之保留了128个状态就得到了好于改进后的静态含时密度矩阵重正化群的结果。而计算速度则能提高至少一个数量级。

### 2.2.3 原理与步骤

用DMRG进行含时演化有两条思路：一是解薛定谔方程：

$$-i\hbar \frac{\partial |\psi(t)\rangle}{\partial t} = H(t)|\psi(t)\rangle \quad (2.15)$$

二是将时间演化算符 $\exp(-iH(t)\Delta t)$ 作用在一个量子态上 $|\psi(t)\rangle$ 来求 $\tau$ 时刻后的状态 $|\psi(t+\tau)\rangle$ , 即

$$|\psi(t+\tau)\rangle = e^{-iH(t)\tau}|\psi(t)\rangle \quad (2.16)$$

t-DMRG用的是第二条思路。在前面介绍传统DMRG的时候我们就提到总系统的哈密顿量无法显式的表达出来, 所以时间演化算符 $e^{-iH(t)\Delta t}$ 也不能显示的求出。t-DMRG的解决办法是使用Suzuki-Trotter分解将这个不能显示表示出来的算符分解成一系列可以表示出来的小的算符, 例如使用二阶Suzuki-Trotter分解, 我们有:

$$\begin{aligned} e^{-iH\tau} &= e^{-i\tau(H_1+H_2+\dots+H_L)} \\ &= e^{-i\frac{\tau}{2}H_1}e^{-i\frac{\tau}{2}H_2}\dots e^{-i\frac{\tau}{2}H_L}e^{-i\frac{\tau}{2}H_L}\dots e^{-i\frac{\tau}{2}H_2}e^{-i\frac{\tau}{2}H_1} + O(\tau^3) \end{aligned} \quad (2.17)$$



图 2.6: Suzuki-Trotter分解示意图

如图2.6所示,  $H_1, H_2 \dots$  是局域的哈密顿量项, 例如 $H_1$ 可以是第一个格点上的势和第一第二两个格点的相互作用和跃迁项。因为这些局域的哈密顿量的维数都很小我们可以很容易的把这些Suzuki-Trotter 因子 $e^{-i\frac{\tau}{2}H_1}$ 等显式的求出来。然后我们可以通过类似于有限DMRG中的扫描的方法把这些Suzuki-Trotter因子作用到波函数上去。

t-DMRG的具体步骤是:

1. 生成初始状态。根据实际情况不同, 我们需要的初始状态也不同。例如有些时候我们需要用某些哈密顿量的基态来作为初始状态。那么我们就需要先无限和有限DMRG来计算出这个哈密顿量的基态。
2. 将第一个Suzuki-Trotter因子 $e^{-i\frac{\tau}{2}H_1}$ 作用在初始波函数上。在进行这一步前我们需要假定总系统的基矢已经移动到链的最前端。例如我们可以在无

限DMRG生成初始状态的过程中停在链的起始端而不是一般情况下的链的中间。我们也可以利用波函数变换的方法（附录A）将初始基态变换到链的起始端。

3. 利用波函数变换将基矢向右移动一个格点。
4. 将对应于这个位置的Suzuki-Trotter因子 $e^{-i\frac{\tau}{2}H_2}$ 作用在这一步的波函数上。
5. 反复执行第3, 第4步, 直到达到链的最右端。然后再从最右端向左移动并逐步将相应的Suzuki-Trotter作用的波函数上直到返回初始位置完成一个时间步的演化。图2.7所示为一个时间步。
6. 反复执行2到5实现其后时间步的演化。

#### 2.2.4 物理量的计算

物理量的计算分为某一时刻的物理量的计算和动力学关联函数的计算两种不同情况。

##### 2.2.4.1 特定时刻的物理量

假如我们想求在 $t$ 时刻的关联函数 $\langle A_x(t)B_y(t) \rangle$ , 其中 $A_x(t)$ 是海森堡表象中 $t$ 时刻 $x$ 格点上的 $A$ 算符, $B_y(t)$ 是 $y$ 格点上的 $B$ 算符。我们有:

$$\begin{aligned}
 \langle A_x(t)B_y(t) \rangle &= \langle \Psi(0) | e^{iHt} A_x e^{-iHt} e^{iHt} B_y e^{-iHt} | \Psi(0) \rangle \\
 &= \langle \Psi(0) | e^{iHt} A_x B_y e^{-iHt} | \Psi(0) \rangle \\
 &= \langle \Psi(t) | A_x B_y | \Psi(t) \rangle
 \end{aligned} \tag{2.18}$$

求出了 $|\Psi(t)\rangle$ 后我们就可以按照传统DMRG中求两点关联函数的方法来求这个特定时刻的关联函数。

##### 2.2.4.2 动力学关联函数

当我们要求的两点关联函数不再同一个时刻时, 也就是我们要求动力学关联函数时, 方法与上面不同。假如要计算 $\langle A_x(t)B_y(0) \rangle$ , 有

$$\langle A_x(t)B_y(0) \rangle = \langle \Psi(0) | e^{iHt} A_x e^{-iHt} B_y | \Psi(0) \rangle \tag{2.19}$$

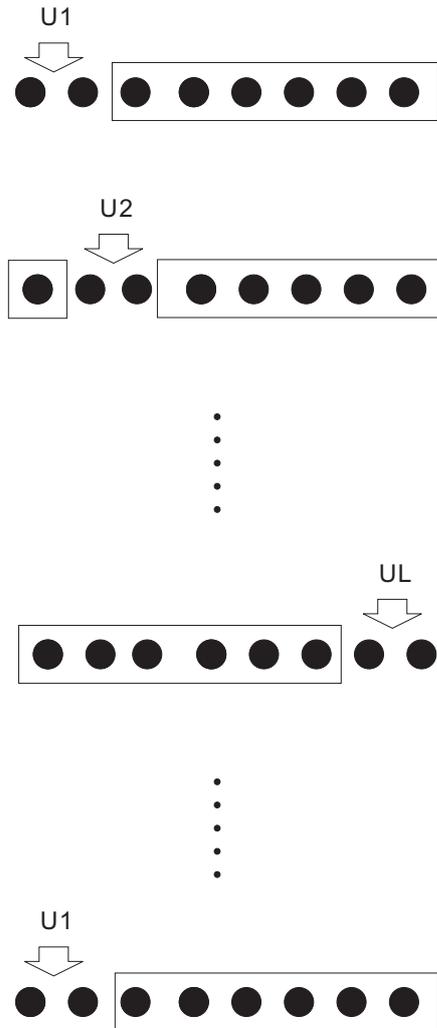


图 2.7: t-DMRG 一个时间步示意图。  $Ux = e^{-iH_x\tau}$ .

所以必须知道

$$|\Psi(t)\rangle = e^{-iHt}|\Psi(0)\rangle \quad (2.20)$$

和

$$|\phi(t)\rangle = e^{-iHt}B_y|\Psi(0)\rangle \quad (2.21)$$

而且要保证这两个波函数在同一个基下表示出来。t-DMRG的做法是先求出初始波函数 $|\Psi(0)\rangle$ ，然后通过半个波函数变换在将自由格点移到 $y$ 点时将 $B_y$ 做用到 $|\Psi(0)\rangle$ 得到 $|\phi(0)\rangle$ 。然后同时演化 $|\Psi(0)\rangle$ 与 $|\phi(0)\rangle$ 。

注意为了保证能同时很好的表示这两个波函数，我们求重正化矩阵时用的密度矩阵是：

$$\rho = \frac{1}{2}|\Phi\rangle\langle\Phi| + \frac{1}{2}|\Psi\rangle\langle\Psi| \quad (2.22)$$

求出了 $|\Psi(t)\rangle$ 与 $|\phi(t)\rangle$ 后，我们就可以用类似传统DMRG中求单格点物理量的方法求出该动力学关联函数：

$$\langle A_x(t)B_y(0)\rangle = \langle\Psi(t)|A_x|\phi(t)\rangle \quad (2.23)$$

## 2.3 有限温密度矩阵重整化群

对于计算一维量子系统的热力学性质，在我们下面要将讲的FTDMRG之前，已经有了非常出色的算法：转移矩阵重正化群方法（TMRG）[60]。TMRG可以非常精确的计算无限大二维经典系统和一维量子系统的热力学性质。

虽然有了TMRG之后我们并不迫切需要另一种类似的有限温算法，但是有了t-DMRG很自然的我们会想到，将t-DMRG推广到虚时从而实现计算有限温度的性质。考虑到从DMRG扩展的有限温算法可以用来计算有限系统的热力学性质，而且更加方便的与已有的DMRG算法结合，所以这种推广还是有意义的。

与t-DMRG类似，FTDMRG也受益于量子信息领域的研究。Verstraete提出可以运用在扩展希尔伯特空间虚时演化纯化的混合态的方法来实现演化[54]。Feiguin和White将这种思想融入到DMRG中[16]，就是我们下面要讲的FTDMRG。

### 2.3.1 原理

要求算符 $A$ 的在温度 $\beta = \frac{1}{T}$ 热力学期望值我们有

$$\begin{aligned} \langle A \rangle_\beta &= \text{Tr}(\rho A) \\ &= \frac{1}{Z} \sum_n e^{-\beta\epsilon_n} \langle n|A|n\rangle \end{aligned} \quad (2.24)$$

其中

$$\begin{aligned} Z &= \text{Tr}(e^{-\beta H}) \\ &= \sum_n e^{-\beta\epsilon_n} \end{aligned} \quad (2.25)$$

$\epsilon_n$ 和 $|n\rangle$ 分别是系统的哈密顿量的本征值和本征矢， $Z$ 是配分函数， $\rho$ 是密度矩阵定义为

$$\rho = \frac{e^{-\beta H}}{Z} \quad (2.26)$$

构造一个与实际系统完全相同的辅助系统，辅助系统中与实际系统中的本征态一一对应的状态定义为 $|\tilde{n}\rangle$ 。在实际系统和辅助系统组成的总系统中我们定义一个对应于实际系统中温度 $\beta$ 时的混合态的纯态

$$\begin{aligned} |\Psi(\beta)\rangle &\equiv e^{-\frac{1}{2}\beta H} |\Psi(0)\rangle \\ &\equiv e^{-\frac{1}{2}\beta H} \sum_n |n\tilde{n}\rangle \end{aligned} \quad (2.27)$$

我们有

$$\begin{aligned} \frac{1}{Z} \langle \Psi(\beta) | A | \Psi(\beta) \rangle &= \frac{1}{Z} \sum_{n,n'} e^{-\beta H} \langle n'\tilde{n}' | A | n\tilde{n} \rangle \\ &= \frac{1}{Z} \sum_{n,n'} e^{-\beta H} \langle n' | A | n \rangle \delta_{\tilde{n}', \tilde{n}} \\ &= \frac{1}{Z} \sum_{n,n'} e^{-\beta H} \langle n' | A | n \rangle \delta_{n,n'} \\ &= \frac{1}{Z} \sum_n e^{-\beta H} \langle n | A | n \rangle \\ &= \langle A \rangle_\beta \end{aligned} \quad (2.28)$$

关于上面的推导有两点要说明：

1.  $A$ 是实际系统中的算符，所以它只作用在实际空间的状态上。从而我们有

$$\langle n'\tilde{n}' | A | n\tilde{n} \rangle = \langle n' | A | n \rangle \delta_{\tilde{n}', \tilde{n}} \quad (2.29)$$

2.  $|n\rangle$ 与 $|\tilde{n}\rangle$ 是一一对应的，所以有关系

$$\delta_{\tilde{n}', \tilde{n}} = \delta_{n,n'} \quad (2.30)$$

类似的可以证明

$$Z = \langle \Psi | \Psi \rangle \quad (2.31)$$

### 2.3.2 实现细节

由上面的分析可以看出只要我们构造出实际系统和辅助系统构成的总系统的初始纯态 $|\Psi(0)\rangle$ ，也就是对应于实际系统无穷高温的状态。那么就可以利用类似于t-DMRG的方法通过将虚时演化算符 $e^{-\frac{1}{2}\beta H}$ 作用在 $|\Psi(0)\rangle$ 上求得对应于温度 $\beta$ 时的纯态。

初始状态 $|\Psi(0)\rangle = \sum_n |n\bar{n}\rangle$ 是一个最大纠缠态，对应于无穷高温状态。为了便于程序处理我们将这个状态的基矢变换到局域格点的直积的形式：

$$\begin{aligned} |\Psi(0)\rangle &= \prod_i \sum_{s_i} |s_i \tilde{s}_i\rangle \\ &= \prod_i |I_{0i}\rangle \end{aligned} \quad (2.32)$$

其中 $|I_{0i}\rangle$ 是实际格点 $s_i$ 与其对偶格点 $\tilde{s}_i$ 构成的最大纠缠态。例如对于自旋1/2粒子我们可以选取一个格点与其对偶格点组成的贝尔基最为这个超格点的基矢：

$$|I_0\rangle = \frac{\sqrt{2}}{2}(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle) \quad (2.33)$$

$$|I_1\rangle = \frac{\sqrt{2}}{2}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle) \quad (2.34)$$

$$|I_2\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle \quad (2.35)$$

$$|I_3\rangle = |\downarrow\downarrow\rangle \quad (2.36)$$

对于初始状态我们只需要一个一维的矢量就可以表示。随着虚时演化，由超格点组成的链的不同部分逐渐纠缠起来，我们就需要保留更多的状态。

FTDMRG比起TMRG的一个长处是它可以计算有限大系统的热力学性质，假如要用它逼近无限大系统可以选取有限系统最中间的几个格点的性质来减少边界条件的影响。图2.8所示为使用这种方法计算的自旋1/2链的热力学性质。

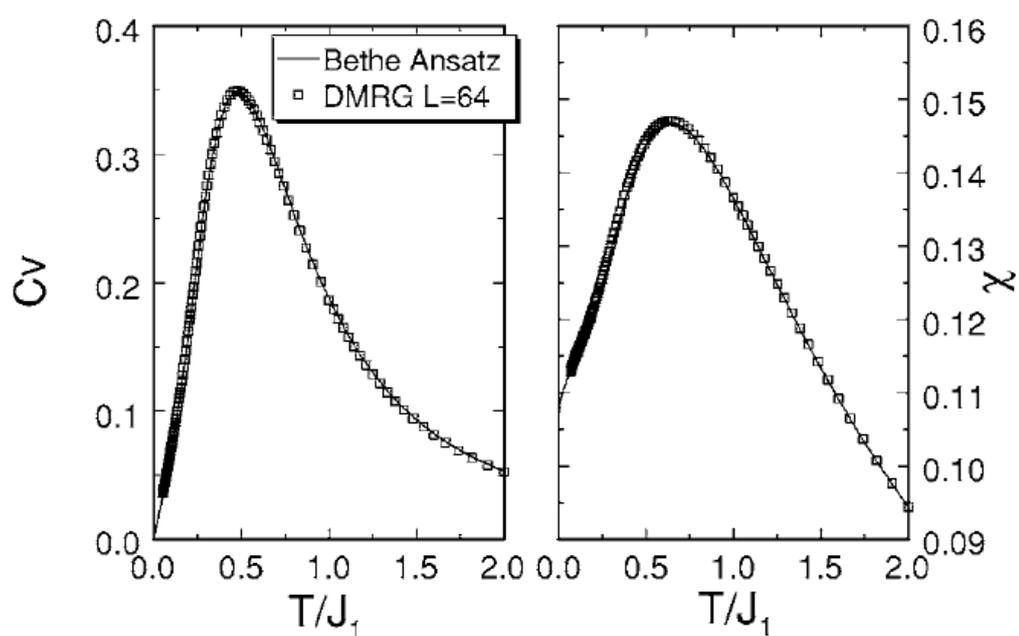


图 2.8: 用有限温计算链长为  $L = 64$  的自旋  $1/2$  链的比热及磁化率随温度的变化。图中实线是用 Bethe ansatz 精确解的链长  $L = \infty$  的结果。具体参考[16].



## 第三章 用DMRG研究一维量子系统在有限温下的动力学性质

上一章我们分别介绍了计算实时演化的t-DMRG与通过虚时演化计算热力学性质的FTDMRG。这两个最近对DMRG功能的扩展在实际计算中都给出了非常好的结果。2006年春向涛教授建议我将这两个DMRG的最新扩展结合起来，先用虚时演化到特定温度，再用t-DMRG来做实时演化，从而计算一维量子系统在有限温度下的动力学性质。

2005年Sirker等人使用了TMRG借助路径积分计算了有限温度下的动力学[50]。我们发现我们的方法和他的不同但是在数值行为上（例如精度，运算量等）两种方法非常相似。

下面具体介绍我们的研究。

### 3.1 模型与原理

为了测试方法，我们研究一个可精确解的模型，自旋1/2的XY模型。哈密顿量是

$$H = J \sum_i (S_i^+ S_{i+1}^- + h.c.) \quad (3.1)$$

在下面的讨论中我们令 $J = 1$ 。

要求的问题是计算有限温度下的动力学关联函数，知道了动力学关联函数我们就可以通过傅立叶变换进而求出谱函数。我们要求的动力学关联函数是：

$$corr(t) = \langle S^z(t) S^z(0) \rangle_\beta = a(t) + ib(t) \quad (3.2)$$

其中 $a(t)$ ,  $b(t)$ 分别是关联函数的实部和虚部。 $S^z(t)$ 和 $S^z(0)$ 是同一格点不同时间上的自旋算符。为了减少边界效应的影响我们选取了链中间的格点。

要计算谱函数我们先要求出推迟格林函数。算符A的推迟格林函数定义为

$$G(t) = -i\theta(t) \langle A(t)A^+(0) \mp A^+(0)A(t) \rangle \quad (3.3)$$

如果A是玻色子算符取减号，费米子算符取加号。对于自旋算符，既可以取加号又可以取减号，虽然这两种算出的格林函数是不同的，但是由格林函数求出的

有实际意义的物理量比如谱函数则是相同的。下面我们将 $S^z$ 视为费米子算符。推迟格林函数是

$$\begin{aligned} G(t) &= -i \theta(t) \langle S^z(t)S^z(0) + S^z(0)S^z(t) \rangle \\ &= -i \theta(t)[\text{corr}(t) + \text{corr}(t)^*] \\ &= -2i \theta(t) a(t) \end{aligned} \quad (3.4)$$

频率空间的推迟格林函数是

$$\begin{aligned} G(\omega) &= \int_{-\infty}^{+\infty} G(t)e^{i\omega t} dt \\ &= 2 \int_0^{+\infty} G(t) \cos \omega t dt \\ &= -2i \int_0^{+\infty} a(t)e^{i\omega t} dt \end{aligned} \quad (3.5)$$

谱函数定义为推迟格林函数的虚部

$$A(\omega) = -2\text{Im}[G(\omega)] = 4 \int_0^{+\infty} a(t) \cos \omega t dt \quad (3.6)$$

所以只要计算出有限温度下的动力学关联函数 $C(t)$ ，我们就可以求出推迟格林函数，进而求出谱函数。

### 3.2 步骤

用t-DMRG和FTDMRG计算有限温度下的动力学关联函数的基本步骤是：

1. 构造初始的无穷高温初始状态。
2. 用FTDMRG求出温度是 $\beta$ 的纯化的波函数 $|\psi\rangle$ 。
3. 用半个空扫描将算符 $s_i^z$ 作用在 $|\psi\rangle$ 上得到

$$|\phi\rangle = s_i^z(0)|\psi\rangle. \quad (3.7)$$

需要强调的是一旦我们得到 $|\phi\rangle$ ，我们就需要将这两个波函数一起做变换以保证它们始终有共同的基矢。

4. 将所有的算符和波函数的数据类型由双精度实数转换为双精度复数以便进行下一步的含时演化。
5. 同时演化 $|\psi\rangle$ 和 $|\phi\rangle$ 至时间 $t_{max}$ , 每一步我们有

$$|\psi(t_i)\rangle = e^{-iH\tau}|\psi(t_{i-1})\rangle \quad (3.8)$$

$$|\phi(t_i)\rangle = e^{-iH\tau}|\phi(t_{i-1})\rangle \quad (3.9)$$

在这一步及下面的步骤中, 算符只作用在实际空间。

6. 在每一个时间步计算动力学关联函数

$$\begin{aligned} corr(t_i) &= \langle \psi | e^{iHt_i} s^z(0) e^{-iHt_i} s^z(0) | \psi \rangle \\ &= \langle \phi(t_i) | s^z | \psi(t_i) \rangle \end{aligned} \quad (3.10)$$

7. 因为 $t_{max}$ 是一个有限的量, 所以通过傅立叶变换得到的谱函数也是近似的。

$$A(\omega) = 4 \int_0^{t_{max}} a(t) \cos \omega t dt \quad (3.11)$$

这个关系式之所以成立是因为对于我们计算的这个问题动力学关联函数随着时间的推移迅速的收敛于零。

### 3.3 结果

图 3.1图 3.2图 3.3 是不同温度下的动力学关联函数的实部。其中的精确解是:

$$C(t, T) = [D_1(t) + D_2(t, T)]^2 \quad (3.12)$$

其中

$$D_1(t) = \frac{J_0(Jt)}{2} \quad (3.13)$$

$$D_2(t, T) = \frac{i}{\pi} \int_0^1 \frac{\sin J\theta t}{\sqrt{1-\theta^2}} \tanh \frac{\theta}{2T} d\theta \quad (3.14)$$

$J_0$ 是零阶Bessel函数[35]。

由图我们看到温度越低, DMRG就越能和精确解在更长的时间里符合的较好。这是因为在高温时左右块之间的纠缠随着时间会很快的增长, 从

而要求DMRG必须保留更多的状态才能到到所需要的精度。我们使用von Neumann熵来衡量左右块之间的纠缠度，von Neumann熵定义为

$$S = -\text{Tr} \rho \log_2 \rho \quad (3.15)$$

$\rho$ 是左块或右块的约化密度矩阵。

图. 3.4 是当DMRG扫描到链的中间时计算的von Neumann熵随时间的变化。可以看出虽然高温时的起始熵比低温时要小，但是高温时的von Neumann熵随着时间的演化增长速度远比低温时要快。我们还发现当von Neumann熵达到最大值时，DMRG的结果开始偏离精确解。

图 3.5是 $\beta = 10$ 时将动力学关联函数做傅立叶变换求得的 $\omega > 0$ 的谱函数。其中精确解使用 $t_{max} = 1000$ ，DMRG结果保留500个状态 $t_{max} = 26$ 。

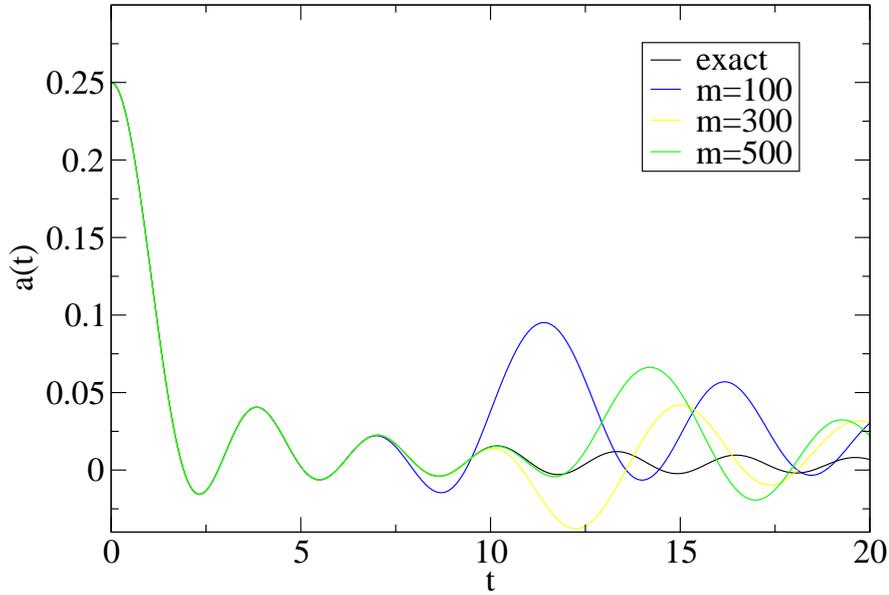


图 3.1: 用精确解和DMRG计算的温度是 $\beta = 1$ 时的动力学关联函数的实部。DMRG分别计算了保留几种不同状态数时的情况。虚时演化的Suzuki-Trotter步长是0.025，实时演化的步长是0.1。链长 $L = 32$ 。

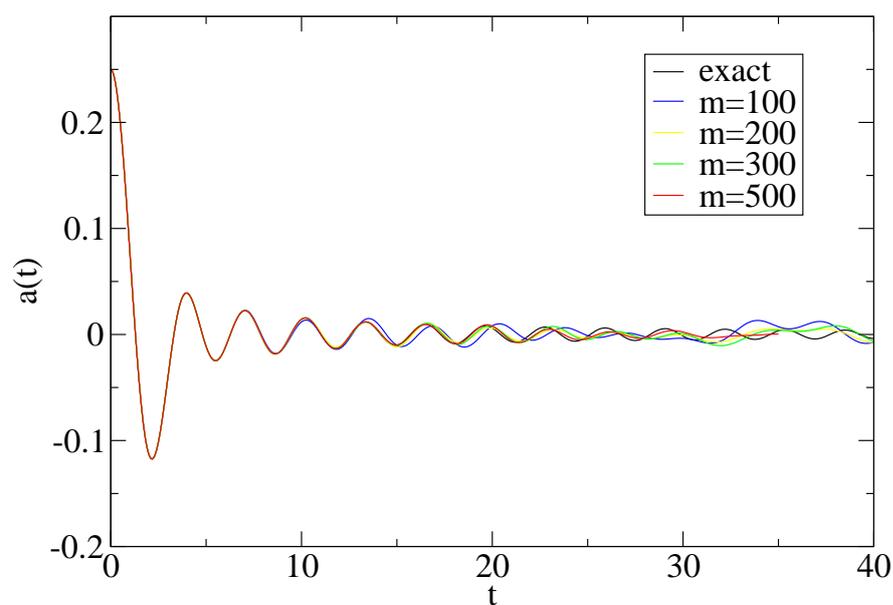


图 3.2: 用精确解和DMRG计算的温度是 $\beta = 5$ 时的动力学关联函数的实部。DMRG分别计算了保留几种不同状态数时的情况。虚时和实时演化的Suzuki-Trotter步长都是0.1。链长 $L = 32$ 。

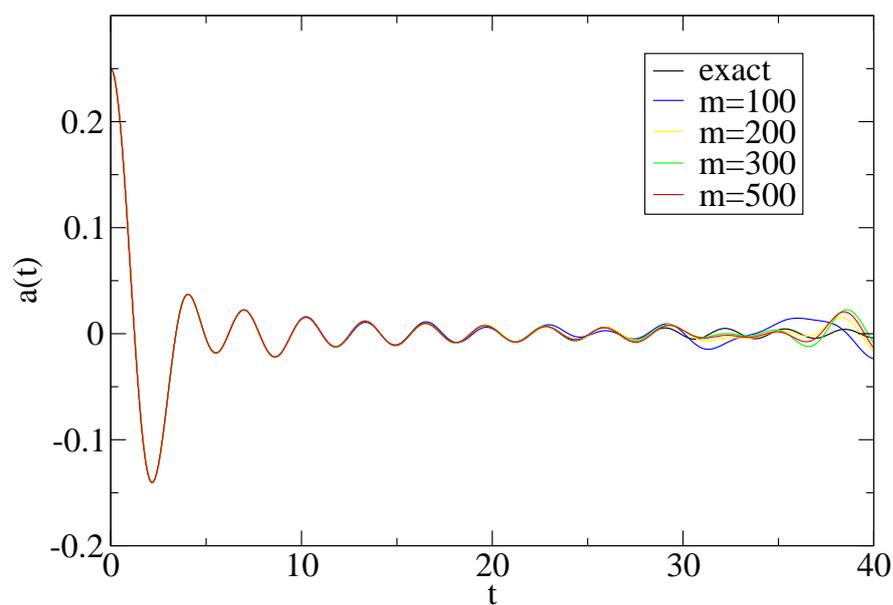


图 3.3: 用精确解和DMRG计算的温度是 $\beta = 10$ 时的动力学关联函数的实部。DMRG分别计算了保留几种不同状态数时的情况。虚时和实时演化的Suzuki-Trotter步长都是0.1。链长 $L = 32$ 。

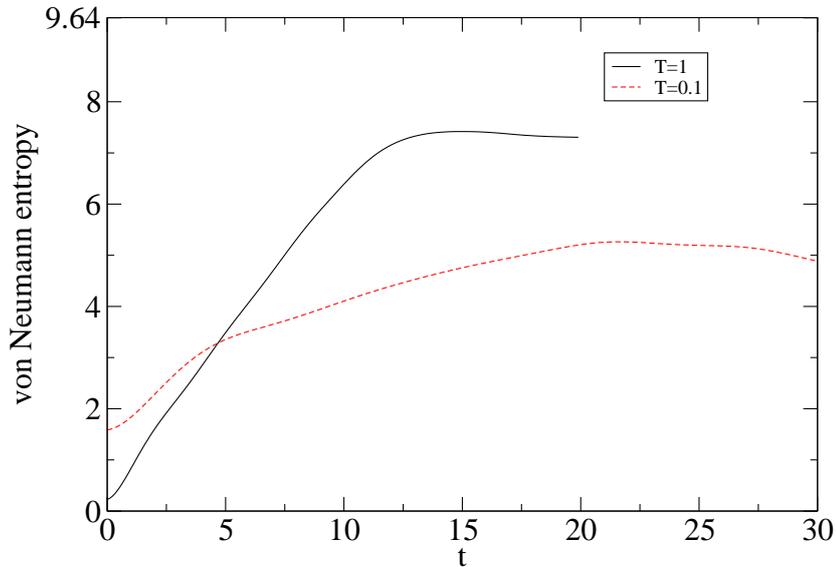


图 3.4: DMRG计算的温度是 $\beta = 10$  和 $\beta = 1$ 时的von Neumann熵。保留了200个状态，链长是 $L = 32$ 。我们在扫描的链的中间时计算von Neumann熵。可以看出在高温时熵增加的速度比低温时快。这解释了为什么低温时DMRG可以算更长的时间。

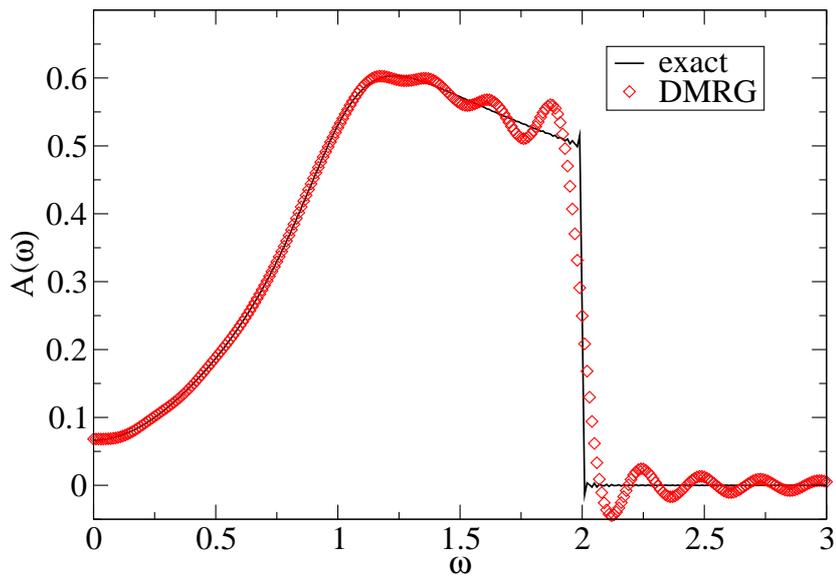


图 3.5: 由精确解和DMRG计算出的动力学关联函数变换得到的温度是 $\beta = 10$ 时的谱函数 $A(\omega)$ 。

## 第四章 矩阵乘积态表象简介

矩阵乘积态(Matrix Product State Representation, MPS) 表象是近年来发展起来的描述一维多体系统波函数和算符的一种表象[41, 22]。矩阵乘积态表象的一个最重要的成果是奠定了DMRG的数学基础。因为t-DMRG, FTDMRG以及后面要讲到的DMRG与数值重正化群的关系都是基于MPS的研究建立起来的。

矩阵乘积态在高维空间的扩展是张量乘积态, 基于张量乘积态的对高维量子系统的算法的探索是最近的一个新的研究热点[32, 52, 45, 48]。

### 4.1 定义

多体波函数一般的形式是

$$|\Psi\rangle = \sum_{\{x_i\}} c\{x_i\} |x_1 x_2 \cdots x_L\rangle \quad (4.1)$$

其中 $c\{x_i\}$ 对应于 $\{x_i\}$ 的不同组合有不同的取值。假如每个格点的自由度都是 $d$ , 总粒子数是 $L$ 。那么要表示出这个状态我们需要的系数的个数是 $d^L$ 。参数的个数是随粒子数指数增长的。但是假如我们能把这个系数写成 $\{x_i\}$ 的函数的形式

$$c\{x_i\} = f(x_1, x_2, \cdots x_L) \quad (4.2)$$

我们就有可能不必用指数增长的参数来描述波函数。矩阵乘积态就是这样一种表示多体波函数的方法。系数 $c\{x_i\}$ 被定义为

$$c\{x_i\} = \text{Tr}\{A^1[x_1]A^2[x_2] \cdots A^L[x_L]\} \quad (4.3)$$

其中 $A^i[x_i]$ 是对应于 $i$ 格点处于 $x_i$ 状态的 $D$ 维矩阵。求迹是因为这里方便起见我们选用了周期性边界条件。对于开放边界条件应为

$$c\{x_i\} = A^1[x_1]A^2[x_2] \cdots A^L[x_L] \quad (4.4)$$

其中的 $A^1[x_1]$ 和 $A^L[x_L]$ 分别是 $1 \times D$ 和 $D \times 1$ 的矩阵。

矩阵乘积态相当于给每个格点联系上了 $d$ 个 $D$ 维的矩阵，根据某一个基的各个格点的状态选取各个格点的相应的矩阵然后乘起来再求迹就得到了这个基所对应的系数。

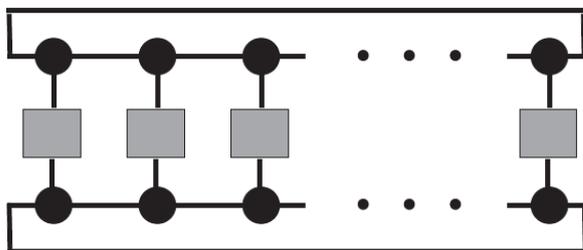


图 4.1: 计算矩阵乘积态的算符期望值示意图。方型表示算符，圆点表示对应于每个格点的矩阵，连线表示收缩掉的矩阵指标。

原则上只要 $D$ 足够大矩阵乘积态可以表示任意一个状态。对于凝聚态物理里面最重要的基态和低能激发态我们只需要较小的 $D$ 就可以很好的近似表示。这是因为这些状态是局域在希尔伯特空间的一小部分里面的[53, 41]。这是我们能够使用矩阵乘积态来研究一维量子系统的客观原因。

采用矩阵乘积态表象来表示波函数后，我们需要的参数个数是 $D^2Ld$ ，随着格点数是线性增长的，这是我们采用矩阵乘积态的根本原因[53]。

知道了矩阵乘积态后我们就可以这样来求算符 $O_1 \otimes \cdots \otimes O_L$ 的期望值

$$\begin{aligned} \langle O_1 \otimes \cdots \otimes O_L \rangle &= \langle \Psi | O_1 \otimes \cdots \otimes O_L | \Psi \rangle \\ &= \text{Tr}(\hat{O}_1 \cdots \hat{O}_L) \end{aligned} \quad (4.5)$$

其中

$$\hat{O}_i = \sum_{x_i, x'_i} \langle x'_i | O_i | x_i \rangle A^\dagger(x'_i) \otimes A(x_i) \quad (4.6)$$

图4.1是求期望值的示意图。

#### 4.1.1 例子

为了有一个感性的认识我们举两个重要的MPS的例子。

1. *AKLT*模型的基态: 这是最早认识的矩阵乘积态[1]。*AKLT* 的哈密顿量是

$$H = \sum_i \vec{S}_i \vec{S}_{i+1} + \frac{1}{3} \left( \vec{S}_i \vec{S}_{i+1} \right)^2, \quad (4.7)$$

其中 $\vec{S}$ 是自旋为1的矢量算符。这个哈密顿量的基态可以用矩阵乘积态的方式精确的表示为

$$\begin{aligned} A_1 &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \\ A_2 &= \begin{pmatrix} 0 & 2\sqrt{2} \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \\ A_3 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ -2\sqrt{2} & 0 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

2. *GHZ* 态 状态

$$|\psi\rangle = |+\dots+\rangle + |-\dots-\rangle \quad (4.8)$$

可用MPS表示为

$$\begin{aligned} A_+ &= \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \\ A_- &= \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

## 4.2 DMRG与矩阵乘积态

1995年Östlund和Rommer最早指出了DMRG和矩阵乘积态的关系[39]。在这之后借助矩阵乘积态这个工具人们理解了DMRG的很多性质, 比如为什么算一维问题很好而推广到高维则精度很差[52], 为什么开放边界条件算出的精度要比周期边界条件好[55]。借助量子信息在矩阵乘积态方面的研究, DMRG发展出了前面所述的计算时间演化的t-DMRG和计算热力学性质的FTDMRG等一些重要扩展。下面我们就来介绍一下DMRG与矩阵乘积态的关系。

首先分析DMRG增长链长的过程。假设当前某一块(比如左块)的链长是 $l-1$ , 基矢是 $|b_{l-1}\rangle$ 。增加一个基矢是 $|s_l\rangle$ 的格点后的系统的基矢是 $|b_{l-1}\rangle|s_l\rangle$ 。重正化后, 这个基矢是 $|b_l\rangle$ , 我们定义

$$\langle b_{l-1}s_l|b_l\rangle \equiv A_{b_l, b_{l-1}s_l}^l \equiv A^l[s_l]_{b_l, b_{l-1}} \quad (4.9)$$

这样我们有

$$|b_l\rangle = \sum_{b_{l-1}, s_l} A^l[s_l]_{b_l, b_{l-1}} |b_{l-1}\rangle |s_l\rangle \quad (4.10)$$

反复迭代调用这个公式我们就有

$$|b_l\rangle = \sum_{b_N} \sum_{s_{N+1}, \dots, s_l} (A^l[s_l] \cdots A^{N+1}[s_{N+1}])_{b_l, b_N} |b_N\rangle |s_{N+1} \cdots s_l\rangle \quad (4.11)$$

这里我们假设了  $d^N = D$ ,  $D$  是保留状态数,  $d$  是每个格点的自由度。而

$$|b_N\rangle = |s_1 \cdots s_N\rangle \quad (4.12)$$

所以我们有

$$|b_l\rangle = \sum_{s_1, \dots, s_l} (A^l[s_l] \cdots A^{N+1}[s_{N+1}]) |s_1 \cdots s_l\rangle \quad (4.13)$$

类似的我们可以把右块的基矢也写成这种形式

$$|d_{l+1}\rangle = \sum_{s_{l+1}, \dots, s_L} (A^l[s_{l+1}] \cdots A^{L-N}[s_{L-N}]) |s_{l+1} \cdots s_L\rangle \quad (4.14)$$

将上面两式带入到总系统波函数

$$|\Psi\rangle = \sum_{b_l, d_{l+1}} \Psi_{b_l, d_{l+1}} A^l[s_l] \cdots A^{N+1}[s_{N+1}] A^l[s_{l+1}] \cdots A^{L-N}[s_{L-N}] |s_1 \cdots s_L\rangle \quad (4.15)$$

这正是矩阵乘积态的形式。而DMRG求基态的过程就相当于通过变分MPS的矩阵求基态最小值的过程, 传统DMRG是一种变分方法。DMRG中的重正化矩阵就对应着MPS中的矩阵。

### 4.3 对称性的利用

波函数的对称性可以反映在矩阵乘积态上面。利用对称性我们可以大大简化运算量。我们常用到的有这样几种对称性:

- 平移对称性。一个有限开放边界条件系统一般不具有平移对称性，MPS中每个格点对应的矩阵都是不一样的。但是对于有些无限大或周期边界条件系统，基态具有平移对称性。可以简单的证明这种对称性反映到MPS上就是MPS也具有这种对称性。假设波函数具有平移一个格点的对称性，即

$$\begin{aligned}
P(1)|\Psi\rangle &= P(1) \sum_{\{x_i\}} \text{Tr}\{A^1[x_1]A^2[x_2]\cdots A^L[x_L]\}|x_1x_2\cdots x_L\rangle \\
&= \sum_{\{x_i\}} \text{Tr}\{A^1[x_1]A^2[x_2]\cdots A^L[x_L]\}|x_{1-1}, x_{2-1}, \cdots, x_{L-1}\rangle \\
&= \sum_{\{x_i\}} \text{Tr}\{A^1[x_2]A^2[x_3]\cdots A^L[x_1]\}|x_1x_2\cdots x_L\rangle \quad (4.16) \\
&= \sum_{\{x_i\}} \text{Tr}\{A^L[x_1]A^1[x_2]A^2[x_3]\cdots A^{L-1}[x_L]\}|x_1x_2\cdots x_L\rangle \\
&= |\Psi\rangle
\end{aligned}$$

其中 $P(1)$ 表示将波函数向右平移一个格点的变换。根据上式我们有

$$A^L[x] = A^1[x] = A^2[x] = \cdots = A^{L-1}[x] \quad (4.17)$$

即所有的 $A[x]$ 矩阵都相等。所以MPS也就有平移一个格点的对称性。利用这种对称性我们可以大大简化运算，例如infinite TEBD就是利用了这中对称性来计算具有平移对称性的无穷大系统的基态[58]。

- 好量子数。好量子数作为是Abelian对称性的一维不可约表示构成了一个群。可记为

$$D(j) \otimes D(k) = D(j+k) \quad (4.18)$$

其中 $D(j)$ ,  $D(k)$ 是两个表示,  $j+k$ 表示群操作。我们可以通过将MPS中的矩阵的每一个指标赋予一个好量子数的方法来引入对称性, 并且我们要保证每个矩阵都要不可约的变换, 也就是要使得矩阵

$$A[k]_{q',q} = A[k]_{q',q} \delta_{q',q+k} \quad (4.19)$$

具体细节我们不在讨论。可参考[33]。

- 非Abelian对称性。例如自旋系统常用的SU(2)。非Abelian对称性也可以引入MPS来简化运算。这种对称性超出了本文的范围, 就不具体讨论了。感兴趣的读者可参考文献[24, 33, 49]



## 第五章 量子杂质系统与数值重正化群

从这一章开始我们进入用DMRG研究量子杂质系统动力学性质的部分。这一章我们首先简单介绍几个重要的量子杂质模型，然后在第二节用了较多篇幅介绍了处理这类杂质模型的数值重正化群方法，这是因为在使用DMRG处理量子杂质系统时我们借鉴了很多数值重正化群中的方法。最后我们从矩阵乘积态的角度来统一的看待DMRG与NRG，给出了用DMRG研究量子杂质系统的理论基础。

### 5.1 量子杂质系统

#### 5.1.1 背景

量子杂质系统又叫耗散量子系统是指一个与具有非常多自由度的库耦合起来的小自由度系统。因为最早研究的这类系统是处于块材中的杂质，所以这个小自由度系统往往被称为“杂质”。提供粒子与能量的库被称为环境。

量子杂质系统最初受到重视是因为大块材料里面的少量杂质可以剧烈的改变材料的整体性质，例如电阻率。最近量子杂质系统再一次受到重视是因为当代的实验和技术水平已经达到了在纳米量级加工制造纳米原件来实现奇特的功能，一个最重要的例子是量子计算。在纳米尺度，量子力学效应不能在忽视，而且因为系统非常小环境的影响变得很重要。所以这样的纳米系统往往可以用量子杂质模型来描述。

与当初研究块材中的杂质性质时不同的是，现在我们更加关注量子杂质系统的非平衡态动力学性质。因为纳米器件或量子器件，它的运行是一个动态的过程，我们要知道在环境的影响下这个过程具体是如何发生的。这样实验物理学家和工程师就可以利用这些微小尺度下才有的奇妙性质来设计制造新颖的应用。

#### 5.1.2 重要模型

为了后面的的分析讨论，我们首先介绍几个最基本的量子杂质模型。

### 5.1.2.1 Anderson模型

Anderson模型是Anderson在1961年提出用来从微观上解释非磁性材料中形成局域磁矩的原因的模型。这是最早的强关联量子杂质模型，其哈密顿量是

$$H_{AM} = \epsilon_d n_d + U n_{d\uparrow} n_{d\downarrow} + \sum_{k,\mu=\uparrow,\downarrow} (V_k c_{k\mu}^\dagger d_\mu + h.c.) + \sum_{k,\mu=\uparrow,\downarrow} \epsilon_k c_{k\mu}^\dagger c_{k\mu} \quad (5.1)$$

第一项描述杂质上的电子势能，第二项是同处杂质上自旋相反的两个电子之间的库仑排斥，第三项是杂质和无相互作用导带的杂化，第四项是导带电子的动能。

这个库对杂质的影响完全决定于杂化函数

$$\Delta(\omega) = \pi \sum_k |V_{kd}|^2 \delta(\omega - \epsilon_k) \quad (5.2)$$

这一般是一个关于 $\omega$ 的复杂函数，但是对于大多数磁性杂质系统，我们往往只对低能行为感兴趣，这时我们有很好的近似关系

$$\Delta(\omega) \approx \Delta(\epsilon_F) \equiv \Delta \quad (5.3)$$

而且还可以证明， $\Delta(\omega)$ 对于能量的微弱依赖并不影响这个模型的低能性质[27]。

### 5.1.2.2 Kondo模型

各向同性Kondo模型描述的是一个自旋1/2的局域磁矩与导带电子在杂质处的反铁磁相互作用。哈密顿量是

$$H_{KM} = \sum_{k,\mu} \epsilon_{k,\mu} c_{k,\mu}^\dagger c_{k,\mu} + J \mathbf{S} s_0 \quad (5.4)$$

其中

$$s_0 = f_{0,\mu}^\dagger \sigma_{\mu\nu} f_{0,\nu} \quad (5.5)$$

是导电电子在杂质处的自旋密度，

$$f_0 = \sum_k c_{k,\mu} \quad (5.6)$$

是局域Wannier态。

可以证明Anderson模型的低能( $\omega < U/2$ )行为可以用一个 $J$ 很小的Kondo模型来描述。

### 5.1.2.3 各向异性Kondo模型

各向异性Kondo模型 (Anisotropic Kondo Model, AKM) 最早由Anderson提出作为研究各向同性Kondo模型的RG flow的工具[5]。AKM本身也很有意义。它与一维具有长程相互作用的系统，例如平方反比Ising模型和Coulomb气体模型，有密切的联系。这些一维有长程相互作用的系统与短程相互作用的系统的一个重要区别是它们具有 (Kosterlitz-Thouless型) 有限温相变。AKM与下面要提到的具有Ohmic类型耗散的二能级耗散系统的对应，使得AKM与一大类物理系统的热力学和动力学性质相关。

将Kondo模型各向同性拆成水平和垂直分量不同的形式就得到了各向异性Kondo模型

$$H_{AKM} = \sum_{k,\sigma} \epsilon_k c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} + \frac{J_\perp}{2} \sum_{k,k'} (c_{k\uparrow}^\dagger c_{k'\downarrow} S^- + c_{k\downarrow}^\dagger c_{k'\uparrow} S^+) + \frac{J_\parallel}{2} \sum_{k,k'} (c_{k\uparrow}^\dagger c_{k'\uparrow} - c_{k\downarrow}^\dagger c_{k'\downarrow}) S^z + g\mu_B h S^z \quad (5.7)$$

这个模型描述了一个与电子环境耦合的杂质的双自旋态的遂穿。大的 $J_\parallel$ 有利于自旋翻转 (遂穿)，小的 $J_\parallel$ 不利于自旋翻转，所以前者对应于弱耗散 (极端情况是 $J_\parallel = \infty$ ，意味着和环境脱藕)，后者对应于强耗散。

### 5.1.2.4 自旋-玻色子模型

一般的自旋-玻色系统的哈密顿量是

$$H_{SB} = \frac{\Delta}{2} \sigma_x + \frac{\epsilon}{2} \sigma_z + \sum_i \omega_i a_i^\dagger a_i + \frac{\sigma_z}{2} \sum_i \lambda_i (a_i + a_i^\dagger) \quad (5.8)$$

其中 $\Delta$ 是两个自旋态 $|\uparrow\rangle$ 和 $|\downarrow\rangle$ 之间的裸遂穿幅度， $\epsilon$ 能级不对称性 (偏压)， $\omega_i$ 是谐振子的本征频率， $\lambda_i$ 是这些谐振子与这个二能级系统的耦合强度。

谐振子库对这个二能级系统的影响可以用库的谱函数来完全描述

$$J(\omega) = \pi \sum_i \lambda_i^2 \delta(\omega - \omega_i) \quad (5.9)$$

对于低能行为我们常用这样定义的参数来描述这个谱函数

$$J(\omega) = 2\pi\alpha\omega_c^{1-s}\omega_s, \quad 0 < \omega < \omega_c, \quad s > -1 \quad (5.10)$$

$s = 1$ 的情况被称为Ohmic类型耗散。可以证明这种类型耗散的自旋-玻色子模型可以映射为各向异性Kondo模型。

## 5.2 数值重正化群方法

数值处理量子杂质系统的最常用的方法是1975年Wilson提出的数值重正化群方法 (Numerical Renormalization Group, NRG) [66, 27]。NRG对库的要求是没有相互作用的费米子或玻色子系统, 否则NRG中用到的一些映射就不成立了。

NRG包括下面几个步骤:

1. 将库的谱函数 (杂化函数) 按能量划分为一系列对数化的间隔。
2. 将连续的谱离散为分离的状态 (对数离散化)
3. 将对数离散化后的模型映射到半无限长的链上。
4. 迭代对角化这个链。
5. 后续的对多粒子能量, 矩阵元等等的分析。

图 (5.1) 是前三步的图示, 具体细节后面再做解释。

下面我们以Anderson模型为例来具体讲述一下数值重正化群方法的过程。我们基本上按照文献[7]来做的介绍。

如前所述, Anderson模型中, 库对杂质的影响完全决定于其谱函数 $\Delta(\omega)$ 。所以只要不改变谱函数, 我们可以把哈密顿量写成很多不同的形式。不失普遍性我们假设能带处于 $[-D, D]$ 之间, 并且令 $D = 1$ 作为能量单位。

下面这个哈密顿量是其中的一种形式

$$H = \epsilon_d n_d + U n_{d\uparrow} n_{d\downarrow} + \sum_{\sigma} \int_{-1}^1 g(\epsilon) a_{\epsilon\sigma}^{\dagger} a_{\epsilon\sigma} d\epsilon + \sum_{\sigma} \int_{-1}^1 h(\epsilon) (d_{\sigma}^{\dagger} a_{\epsilon\sigma} + a_{\epsilon\sigma}^{\dagger} d_{\sigma}) d\epsilon \quad (5.11)$$

这个哈密顿量使用了一维能量表象来描述色散是 $g(\epsilon)$ 杂化是 $h(\epsilon)$ 的导带。这两个函数与谱函数的关系是[6]

$$\Delta(\omega) = \pi \frac{d\varepsilon(\omega)}{d\omega} h[\varepsilon(\omega)]^2, \quad (5.12)$$

如果限定

$$\Delta(\omega) = \Delta_0, \omega \in [-1, 1] \quad (5.13)$$

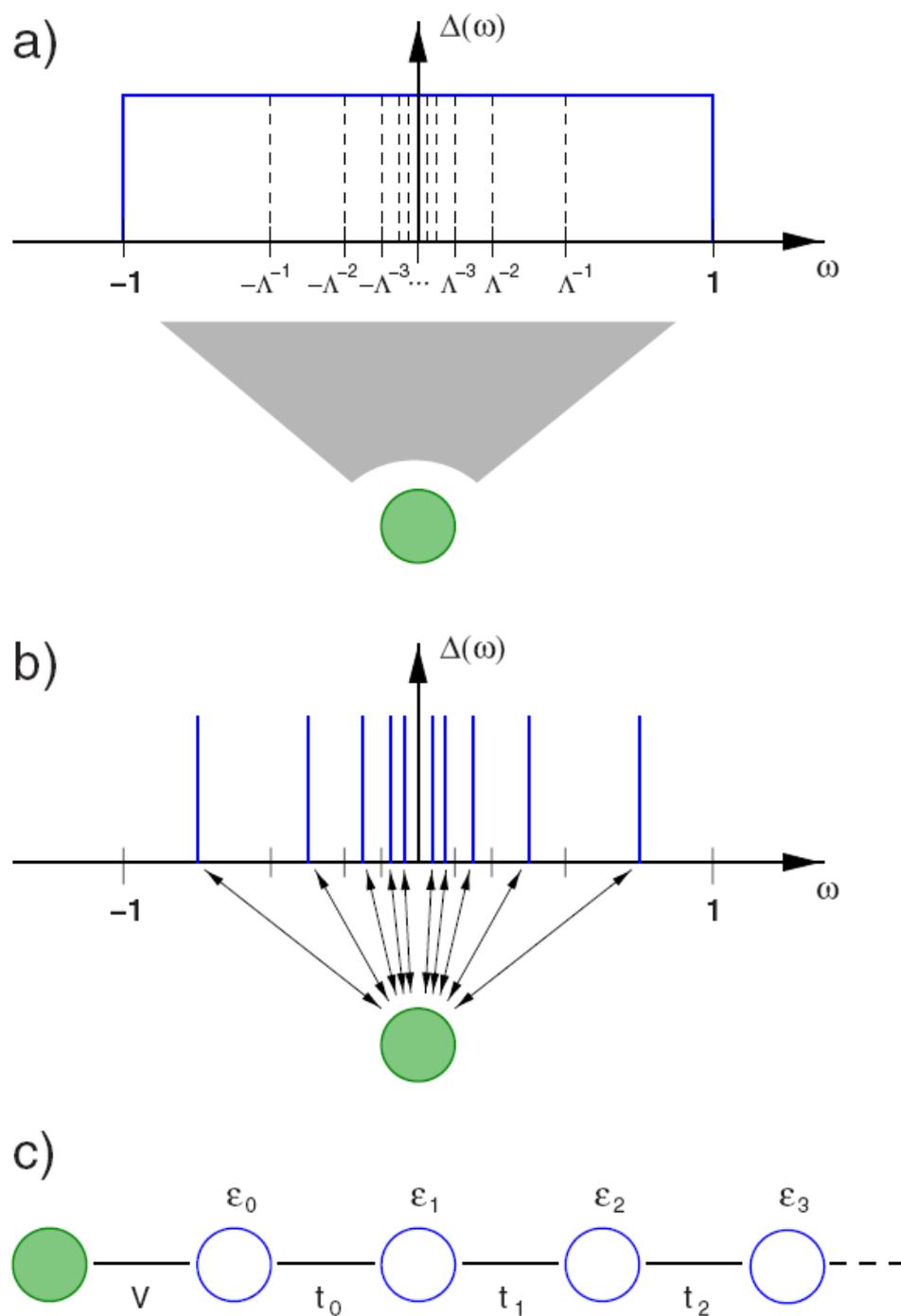


图 5.1: NRG最初三步示意图。本图摘自[8]。  $\Delta(\omega)$ 是杂化函数，实心圆代表杂质，能带宽度为 $[-1, 1]$ 。a)将连续的能带做对数分割。b)用离散的能级表示被分割后的连续能带。c)星形的模型被影射到一维半无穷长链。

由上式我们可以使

$$\epsilon(\omega) = \omega \quad (5.14)$$

和

$$h^2(\epsilon) = \frac{\Delta_0}{\pi} \quad (5.15)$$

能带算符满足普通费米子的反对易关系

$$\{a_{\epsilon\sigma}^\dagger, a_{\epsilon'\sigma'}\}_+ = \delta(\epsilon - \epsilon')\delta_{\sigma\sigma'} \quad (5.16)$$

### 5.2.1 对数离散化

哈密顿量(5.11)是我们对数离散化导带的起点。如图(5.1)所示,对数离散化参量 $\Lambda > 1$ 定义了一些列能量间隔的分界点:

$$x_n = \pm\Lambda^{-n}, n = 0, 1, 2, \dots \quad (5.17)$$

能量间隔的宽度是

$$d_n = \Lambda^{-n}(1 - \Lambda^{-1}) \quad (5.18)$$

在每一个间隔内我们引入一个正交完备的波函数作为基

$$\psi_{np}^\pm(\epsilon) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{d_n}} e^{\pm i\omega_n p \epsilon}, & x_{n+1} < \pm\epsilon < x_n \\ 0 & \text{Other} \end{cases}$$

$p$ 取所有整数,每个能量间隔的基本本征频率是

$$\omega_n = \frac{2\pi}{d_n} \quad (5.19)$$

用这个基展开导带电子算符,例如

$$a_{\epsilon\sigma} = \sum_{np} \left[ a_{np\sigma} \psi_{np}^+(\epsilon) + b_{np\sigma} \psi_{np}^-(\epsilon) \right] \quad (5.20)$$

这个展开对应于在每个能量间隔内的傅立叶变换,其反变换是

$$a_{np\sigma} = \int_{-1}^1 d\epsilon [\psi_{np}^+(\epsilon)]^* a_{\epsilon\sigma} \quad (5.21)$$

$$b_{np\sigma} = \int_{-1}^1 d\epsilon [\psi_{np}^-(\epsilon)]^* a_{\epsilon\sigma} \quad (5.22)$$

这样定义的算符也满足费米子算符的反对易关系。哈密顿量 (5.11) 可以用这里定义的离散算符重新表述。例如杂化的第一部分可重新表述为

$$\int_{-1}^1 d\varepsilon h(\varepsilon) f_{\sigma}^{\dagger} a_{\varepsilon\sigma} = f_{\sigma}^{\dagger} \sum_{np} \left[ a_{np\sigma} \int^{+,n} d\varepsilon h(\varepsilon) \psi_{np}^{+}(\varepsilon) + b_{np\sigma} \int^{-,n} d\varepsilon h(\varepsilon) \psi_{np}^{-}(\varepsilon) \right], \quad (5.23)$$

其中我们定义了

$$\int^{+,n} d\varepsilon \equiv \int_{x_{n+1}}^{x_n} d\varepsilon, \quad \int^{-,n} d\varepsilon \equiv \int_{-x_n}^{-x_{n+1}} d\varepsilon. \quad (5.24)$$

当我们限定  $h(\varepsilon) = h$  时, 式 5.23 就只剩下  $p = 0$  的状态

$$\int^{\pm,n} d\varepsilon h \psi_{np}^{\pm}(\varepsilon) = \sqrt{d_n} h \delta_{p,0}. \quad (5.25)$$

也就是杂质只和  $p = 0$  的导带状态耦合。在一个能级间隙内令  $h(\omega)$  即使对于一个非常数的  $\Delta(\omega)$  也没有附加额的约束, 因为我们可以将对  $\varepsilon$  的依赖性转移到  $g(\varepsilon)$  中。因此我们定义

$$h(\varepsilon) = h_n^{\pm}, \quad x_{n+1} < \pm\varepsilon < x_n, \quad (5.26)$$

其中  $h_n^{\pm}$  由相应能量间隙内的杂化函数  $\Delta(\omega)$  的平均值来决定

$$h_n^{\pm 2} = \frac{1}{d_n} \int^{\pm,n} d\varepsilon \frac{1}{\pi} \Delta(\varepsilon). \quad (5.27)$$

因此杂化项变为

$$\int_{-1}^1 d\varepsilon h(\varepsilon) d_{\sigma}^{\dagger} a_{\varepsilon\sigma} = \frac{1}{\sqrt{\pi}} d_{\sigma}^{\dagger} \sum_n [\gamma_n^{+} a_{n0\sigma} + \gamma_n^{-} b_{n0\sigma}], \quad (5.28)$$

其中

$$\gamma_n^{\pm 2} = \int^{\pm,n} d\varepsilon \Delta(\varepsilon) \quad (5.29)$$

哈密顿量中描述能带电子的项变换为

$$\begin{aligned} \int_{-1}^1 d\varepsilon g(\varepsilon) a_{\varepsilon\sigma}^{\dagger} a_{\varepsilon\sigma} &= \sum_{np} \left( \xi_n^{+} a_{np\sigma}^{\dagger} a_{np\sigma} + \xi_n^{-} b_{np\sigma}^{\dagger} b_{np\sigma} \right) \\ &+ \sum_{n, p \neq p'} \left( \alpha_n^{+}(p, p') a_{np\sigma}^{\dagger} a_{np'\sigma} - \alpha_n^{-}(p, p') b_{np\sigma}^{\dagger} b_{np'\sigma} \right) \end{aligned} \quad (5.30)$$

其中

$$\xi_n^\pm = \frac{\int^{\pm, n} d\varepsilon \Delta(\varepsilon) \varepsilon}{\int^{\pm, n} d\varepsilon \Delta(\varepsilon)} \quad (5.31)$$

对于 $\Delta(\varepsilon) = \Delta_0$ 的情况上式约化为

$$\xi_n^\pm = \frac{1}{2} \Lambda^{-n} (1 + \Lambda^{-1}) \quad (5.32)$$

对于线性色散 $g(\varepsilon) = \varepsilon$ 式5.30中第二项的系数为

$$\alpha_n^\pm(p, p') = \frac{1 - \Lambda^{-1}}{2\pi i} \frac{\Lambda^{-n}}{p' - p} \exp \left[ \frac{2\pi i(p' - p)}{1 - \Lambda^{-1}} \right]. \quad (5.33)$$

下一步我们做了一个NRG方法中的重要近似：舍弃式5.30所有 $p \neq 0$ 的项。这个近似在在这一步还看不出确凿的理由，不过我们这少根据这样两点来理解：

1.  $p \neq 0$ 的项只通过 $p = 0$ 的项间接和杂质相互作用。
2. 基于前一条理由我们又有 $p = 0$ 与 $p \neq 0$ 的耦合有一个 $(1 - \Lambda^{-1})$ 的系数，而这个系数当去连续能带极限 $\Lambda \rightarrow 1$ 时趋于0。

实际的计算表明这个近似超乎意料的好。所以至今为止所有的NRG的运算都没有考虑 $p \neq 0$ 的项。

舍弃所有的 $p \neq 0$ 的项，并将 $a_{n0\sigma}$ 重记为 $a_{n\sigma}$ 等等，我们得到

$$\begin{aligned} H &= \epsilon_d n_d + U n_{d\uparrow} n_{d\downarrow} + \sum_{n\sigma} [\xi_n^+ a_{n\sigma}^\dagger a_{n\sigma} + \xi_n^- b_{n\sigma}^\dagger b_{n\sigma}] \\ &+ \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sum_{\sigma} d_{\sigma}^\dagger \sum_n (\gamma_n^+ a_{n\sigma} + \gamma_n^- b_{n\sigma}) \\ &+ \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sum_{\sigma} \left[ \sum_n (\gamma_n^+ a_{n\sigma}^\dagger + \gamma_n^- b_{n\sigma}^\dagger) \right] d_{\sigma}. \end{aligned} \quad (5.34)$$

### 5.2.2 映射到Wilson链

上一节我们得到的哈密顿量5.34是星形的，为了便于下一步用重正化群处理我们需要把它转换为半无穷长链，如图5.1(c)所示。这种映射得到的半无穷长

链又叫做Wilson链。在Wilson链形式中杂质只与一个导带电子自由度耦合,这个电子自由度算符可以直接从哈密顿量5.34中得到

$$c_{0\sigma} = \frac{1}{\sqrt{\xi_0}} \sum_n [\gamma_n^+ a_{n\sigma} + \gamma_n^- b_{n\sigma}], \quad (5.35)$$

归一化常数由下式定义

$$\xi_0 = \sum_n ((\gamma_n^+)^2 + (\gamma_n^-)^2) = \int_{-1}^1 d\varepsilon \Delta(\varepsilon), \quad (5.36)$$

杂化项可以写为

$$\frac{1}{\sqrt{\pi}} d_\sigma^\dagger \sum_n (\gamma_n^+ a_{n\sigma} + \gamma_n^- b_{n\sigma}) = \sqrt{\frac{\xi_0}{\pi}} d_\sigma^\dagger c_{0\sigma}, \quad (5.37)$$

这里我们假设哈密顿量5.1中的 $V_k$ 不依赖于 $k$ , 即 $V_k = V$ , 我们有

$$\sqrt{\xi_0/\pi} = V \quad (5.38)$$

算符 $c_{0\sigma}^{(\dagger)}$ 代表半无穷长链中的导带电子部分的第一个格点。这个算符与 $a_{n\sigma}^{(\dagger)}$ ,  $b_{n\sigma}^{(\dagger)}$ 是不正交的。我们用Gram-Schmidt方法由 $c_{0\sigma}^{(\dagger)}$  and  $a_{n\sigma}^{(\dagger)}$ ,  $b_{n\sigma}^{(\dagger)}$ 出发来求出一组新的相互正交的算符 $c_{n\sigma}^{(\dagger)}$ 。用这组算符重新表述的哈密顿量是

$$\begin{aligned} H &= H_{\text{imp}} + \sqrt{\frac{\xi_0}{\pi}} \sum_\sigma [d_\sigma^\dagger c_{0\sigma} + c_{0\sigma}^\dagger d_\sigma] \\ &+ \sum_{\sigma n=0}^{\infty} \left[ \varepsilon_n c_{n\sigma}^\dagger c_{n\sigma} + t_n (c_{n\sigma}^\dagger c_{n+1\sigma} + c_{n+1\sigma}^\dagger c_{n\sigma}) \right], \end{aligned} \quad (5.39)$$

算符 $c_{n\sigma}^{(\dagger)}$ 对应于Wilson链中的第 $n$ 个格点。 $\varepsilon_n$ 是格点占据能,  $t_n$ 是跃迁矩阵元。这些算符之间的关系是

$$\begin{aligned} a_{n\sigma} &= \sum_{m=0}^{\infty} u_{mn} c_{m\sigma}, \\ b_{n\sigma} &= \sum_{m=0}^{\infty} v_{mn} c_{m\sigma}, \\ c_{n\sigma} &= \sum_{m=0}^{\infty} [u_{nm} a_{m\sigma} + v_{nm} b_{m\sigma}]. \end{aligned} \quad (5.40)$$

根据 $c_{0\sigma}$ 的定义式 5.35, 我们有

$$u_{0m} = \frac{\gamma_m^+}{\sqrt{\xi_0}}, \quad v_{0m} = \frac{\gamma_m^-}{\sqrt{\xi_0}}. \quad (5.41)$$

剩余的系数 $u_{nm}$ ,  $v_{nm}$ 和参数 $\epsilon_n$ ,  $t_n$ 可以通过迭代的方法求出,例如可以参考[8]的附录A。对于一般情况下的杂化函数要使用数值求解。只有少数情况下可以解析写出这些系数的形式。对于在 $[-1, 1]$ 内是常数的杂化函数 $\Delta(\omega)$ , Wilson给出了解析的形式[66]

$$\epsilon_n = 0 \quad (5.42)$$

$$t_n = \frac{(1 + \Lambda^{-1})(1 - \Lambda^{-n-1})}{2\sqrt{1 - \Lambda^{-2n-1}}\sqrt{1 - \Lambda^{-2n-3}}} \Lambda^{-n/2}. \quad (5.43)$$

注意到当 $n$ 很大时我们有

$$t_n \longrightarrow \frac{1}{2} (1 + \Lambda^{-1}) \Lambda^{-n/2}. \quad (5.44)$$

$t_n$ 随着 $n$ 指数衰减是后面NRG迭代对角化可行的基础。而且正因为系数是指数衰减的我们只需要一个有限的链长就可以达到所要的精度。

### 5.2.3 迭代对角化

一直到现在, 我们只是做了模型的变换以便于下面的处理。在这一步我们才真正进入真正的重正化群的过程。哈密顿量5.34可以用一个序列来逼近, 定义为

$$H = \lim_{N \rightarrow \infty} \Lambda^{-(N-1)/2} H_N, \quad (5.45)$$

其中

$$H_N = \Lambda^{(N-1)/2} \left[ \epsilon_d n_d + U n_{d\uparrow} n_{d\downarrow} + \sqrt{\frac{\xi_0}{\pi}} \sum_{\sigma} (d_{\sigma}^{\dagger} c_{0\sigma} + c_{0\sigma}^{\dagger} d_{\sigma}) + \sum_{\sigma n=0}^N \epsilon_n c_{n\sigma}^{\dagger} c_{n\sigma} + \sum_{\sigma n=0}^{N-1} t_n (c_{n\sigma}^{\dagger} c_{n+1\sigma} + c_{n+1\sigma}^{\dagger} c_{n\sigma}) \right]. \quad (5.46)$$

公式5.46中的 $\Lambda^{(N-1)/2}$ 用来抵消系数 $t_n$ 的 $N$ 依赖性。这样重新标度是为了讨论不动点的需要, 不过本文对此不作具体讨论。

$H_n$ 序列的递推关系是

$$H_{N+1} = \sqrt{\Lambda}H_N + \Lambda^{N/2} \sum_{\sigma} \varepsilon_{N+1} c_{N+1\sigma}^{\dagger} c_{N+1\sigma} + \Lambda^{N/2} \sum_{\sigma} t_N \left( c_{N\sigma}^{\dagger} c_{N+1\sigma} + c_{N+1\sigma}^{\dagger} c_{N\sigma} \right), \quad (5.47)$$

序列的首项是

$$H_0 = \Lambda^{-1/2} \left[ \epsilon_d n_d + U n_{d\uparrow} n_{d\downarrow} + \sum_{\sigma} \varepsilon_0 c_{0\sigma}^{\dagger} c_{0\sigma} + \sqrt{\frac{\xi_0}{\pi}} \sum_{\sigma} \left( d_{\sigma}^{\dagger} c_{0\sigma} + c_{0\sigma}^{\dagger} d_{\sigma} \right) \right] \quad (5.48)$$

$H_0$ 对应NRG的处理的起始Wilson链，包括了杂质和第一个导带电子格点。如图5.2所示，我们每步增加一个格点。类似于DMRG,当链长达到一定长度时我们必须重正化以保持希尔伯特空间的维数不随格点数指数增长。相对于后来发展出来的DMRG，数值重正化群重正化基矢的方法比较简单。

假如现在的链长是 $N$ ，基矢是 $|r_N\rangle$ ，增加的第 $N+1$ 个格点的基矢是 $|s(N+1)\rangle$ ，那么重正化前的基矢是 $|r_N, s\rangle \equiv |r_N\rangle \otimes |s(N+1)\rangle$ 。在这个基矢中我们写出新的哈密顿量 $H_{N+1}$ ，对角化这个哈密顿量并选取能量最低的 $D$ 个本征态作为新的基矢。变换关系为

$$|r_{N+1}\rangle = \sum_{r_N, s} U(r_{N+1}, r_N s) |r_N; s\rangle \quad (5.49)$$

$U$ 是本征值最低的 $D$ 个本征矢组成的矩阵。

图5.3是NRG重正化步骤中间哈密顿量的本征值的变化示意图。NRG选取新的哈密顿量的最低能级作为新的基矢。这样做的根据可以从b)到c)的变化看出：增加一个格点之后，原来的能级劈裂为一系列新的能级，新的基态能级信息主要决定于原来的能量较低的能级。这里也可解释问什么NRG不能取很小的对数离散化参数 $\Lambda$ (比如很难取 $\Lambda < 1.3$ 的值)。 $\Lambda$ 越大，原来的能级劈裂后混合在一起的几率越小，这样原来能级的高能部分对下一步的低能部分的影响就越小，所以我们截去高能部分的这个近似也就越好。

### 5.3 从矩阵乘积态表象看NRG与DMRG

在上一张我们介绍了矩阵乘积态表象，以及如何用矩阵乘积态表象来描述DMRG。类似的我们可以用矩阵乘积态的语言来描述NRG[56, 43]。NRG增长

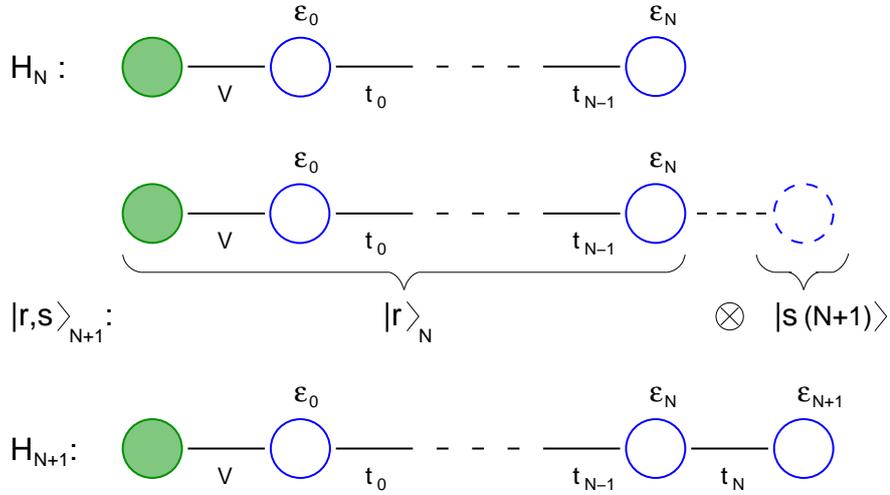


图 5.2: NRG迭代对角化的增长链长过程示意图。本图摘自[8]。

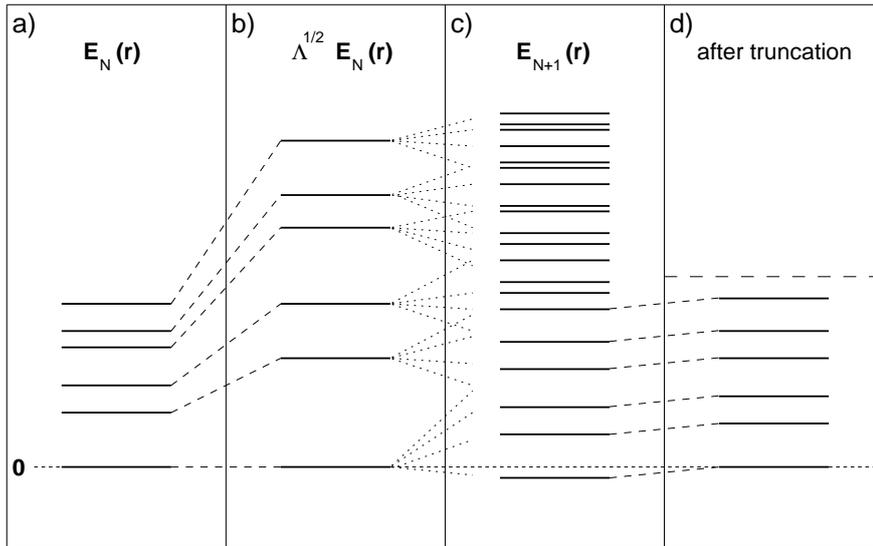


图 5.3: 数值重正化的能级重整示意图。本图摘自[8]。a)链长是 $N$ 时哈密顿量的能级。b)重新标度c)增加了一个格点后的新的哈密顿量的能级。d)截断高能部分,只保留最低的一些能级。

链长重正化新的基矢的公式5.49可以重新写为

$$|r_{N+1}\rangle = \sum_{r_N, s} U(r_{N+1}, r_N s) |r_N; s\rangle = \sum_{r_N, s} U[s]_{r_{N+1}, r_N} |r_N; s\rangle \quad (5.50)$$

反复迭代使用这个公式我们有最终的基矢为

$$|r_L\rangle = \sum_{\{s_i\}} U^L[s_L] U^{L-1}[s_{L-1}] \cdots U^0[s_0] |s_L s_{L-1} \cdots s_0\rangle \quad (5.51)$$

其中两段的变换矩阵是行矢量和列矢量，从而使得乘积是一个数。 $L$ 为最终的Wilson链长。波函数用这个基矢展开为

$$\begin{aligned} |\Psi\rangle &= \sum_{r_L} c_{r_L} |r_L\rangle \\ &= \sum_{r_L} c_{r_L} \sum_{\{s_i\}} U^L[s_L] U^{L-1}[s_{L-1}] \cdots U^0[s_0] |s_L s_{L-1} \cdots s_0\rangle \\ &= \sum_{\{s_i\}} c(\{s_i\}) U^L[s_L] U^{L-1}[s_{L-1}] \cdots U^0[s_0] |s_L s_{L-1} \cdots s_0\rangle \end{aligned} \quad (5.52)$$

实际上我们可以把 $c(\{s_i\})$ 归并到 $f(\{s_i\}) \equiv U^L[s_L] U^{L-1}[s_{L-1}] \cdots U^0[s_0]$ 中,并重新排列基矢顺序写为

$$|\Psi\rangle = \sum_{\{s_i\}} A^0[s_0] A^1[s_1] \cdots A^L[s_L] |s_0 s_1 \cdots s_L\rangle \quad (5.53)$$

这正是标准的矩阵乘积态的形式。与DMRG的变分方法求MPS矩阵不同的是，NRG选择 $U$ 矩阵的方法是使用哈密顿量的最低能级对应的波函数。

式5.53启发我们可以使用DMRG来处理Wilson链，由于DMRG的变分特质，我们期待在计算基态能时它能给出比NRG等好的结果。至少一个肯定比NRG好的方法是：首先用NRG来求出5.53形式的基态波函数，在用有限DMRG反复扫描来优化NRG的结果。

对本文的研究更加重要的是当我们将最初的量子杂质模型映射到是Wilson链形式后，杂质点本身保持了原来的形式，因此对于杂质点的性质我们可以通过使用DMRG中的各种方法（包括t-DMRG与FTDMRG）计算Wilson链来实现！这就将我们前面介绍的t-DMRG和FTDMRG推广到可以计算量子杂质的动力学与热力学问题。

下一章我们就来介绍一下迄今为止我们已经做的一些探索尝试。



## 第六章 用DMRG研究共振能级模型

这一章介绍一下我们对使用DMRG研究量子杂质系统的动力学和热力学性质的一些尝试。我们的主要目标是用t-DMRG研究哈密顿量含时的量子杂质系统，因为这种问题至今还没有一个通用的数值来处理。同时我们也测试了用DMRG研究静态哈密顿量的热力学性质和动力学关联函数等问题。

### 6.1 背景

近年来实验技术和工业技术的发展已经使人们有能力在微米纳米量级设计制造器件。在这个尺度，虽然与电子分子相比器件仍然是一个宏观系统，但是人们已经可以通过创造合适的条件利用特殊的系统来展现量子性质[51, 38, 34, 11]。

例如如图6.1所示是一个磁通量子比特(qubit)的隧道扫描电子显微镜照片及其示意图。照片右侧的回路由三个Josephson节组成，构成一个磁通量子比特。与之相连的大的回路是一个量子超导干涉器件(SQUID)。我们可以通过SQUID实现量子比特的写入与读出。

利用这类系统我们可以从实验上研究宏观物体的量子退相干等根本问题。另外对于实际应用非常重要的研究方向是利用现有的芯片制造技术和最新的纳米加工技术来制造的这类固态量子芯片。所谓量子芯片，或量子计算机就是利用量子力学的原理而不是经典电路原理来实现信息的处理。根据量子力学的带叠加原理可以在量子层次实现并行，实现经典计算机无法比拟的处理能力。

在这个尺度除了很容易体现出量子性质外，另一个重要的特点是环境的影响非常重要。环境往往即会造成能量的耗散又会造成退相干。这类系统可以归为量子耗散系统，可以用我们前面提到的量子杂质模型来描述。与前面我们研究的问题不同的是我们这里接触的系统是动态的，需要用含时的哈密顿量来描述。

对于哈密顿量含时的量子杂质系统，现有的一个较为通用数值处理方法是Anders和Schiller提出的含时数值重正化群(Time-dependent Numerical Renormalization Group, TD-NRG) [3, 4]。但是迄今为止TD-NRG只能处理淬

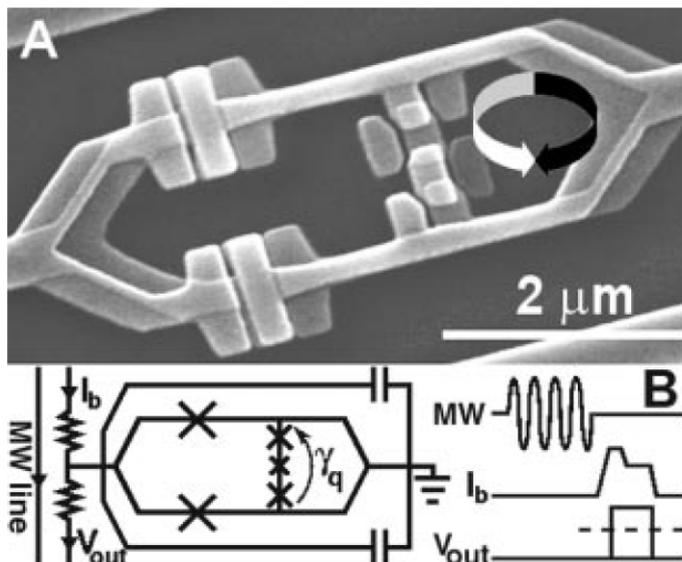


图 6.1: 实验的量子器件的隧道电子显微镜照片和示意图。具体实验细节请参考[11]。

火(quench)型的哈密顿量，也就是在 $t < 0$ 时是一个不随时间变化的哈密顿量，在 $t \geq 0$ 变成另一个不随时间变化的哈密顿量。人们在实验中遇到的往往是随时间一直变化的哈密顿量，TD-NRG迄今为止无法处理这类问题。所以我们迫切需要一种能够处理哈密顿量含时的杂质问题的通用的数值方法，来帮助实验物理学家研究这类系统。

在这一章我们测试用DMRG来研究这类哈密顿量含时的量子杂质问题的效果。我们的研究结果证明DMRG是一个很有前途的研究这类问题的备选方案。

## 6.2 模型与方法

为了测试DMRG选择了哈密顿量含时共振能级系统作为测试研究对象。之所以选择这个系统首先是因为它可以精确的求解，从而便于我们与DMRG的结果比较。其次，这个模型可以看作是描述耗散Landau-Zener系统的自旋-玻色子模型的一种特例，所以其本身也就有重要的研究价值。为了对这个模型的来源有个更好的了解，我们首先介绍一下Landau-Zener模型。

### 6.2.1 Landau-Zener模型

Landau-Zener模型的哈密顿量是

$$H(t) = \frac{vt}{2}\sigma_z + \Delta\sigma_x, \quad (6.1)$$

其中 $\sigma_z \equiv |\uparrow\rangle\langle\uparrow| - |\downarrow\rangle\langle\downarrow|$  和  $\sigma_x \equiv |\uparrow\rangle\langle\downarrow| + |\downarrow\rangle\langle\uparrow|$  是Pauli矩阵。这个模型描述了一个以速度 $v$ 进行能级交叉的自旋二能级系统。

在 $t = -\infty$ 时系统处于自旋向上的状态，当系统以一个有限的速度 $v$ 进行能级交叉时，在 $t = 0$ 附近，自旋会在两个能级之间跃迁，而当两个能级再次远离时这个跃迁几率又会逐渐衰减。所以最后在时间 $t = +\infty$ 时系统有一定的几率处于自旋向下的状态。这个问题可以精确的求解，我们这里只给出结果，最后系统跃迁到自旋向下的状态 $|\downarrow\rangle$ 的几率是

$$P_{\downarrow} = 1 - e^{-\frac{2\pi\Delta^2}{\hbar v}} \quad (6.2)$$

这就是著名的Landau-Zener跃迁几率,最早由Landau和Zener分别给出[29, 69]。

### 6.2.2 耗散Landau-Zener模型

假如上一节讨论的二能级系统处于外界的环境中，那么情况会变成怎样呢？这时我们可以用一些列相互之间没有耦合的谐振子系统代表环境。这样我们得到的就是含时的自旋-玻色子模型,也叫做耗散Landau-Zener模型[44]，哈密顿量是

$$H = \frac{vt}{2}\sigma_z - \frac{\Delta}{2}\sigma_x + \sum_i \omega_i b_i^\dagger b_i + \frac{1}{2}\sigma^z \sum_i \gamma_i (b_i + b_i^\dagger) \quad (6.3)$$

在上一章我们定义了谐振子库的谱函数为

$$J(\omega) = \pi \sum_i \lambda_i^2 \delta(\omega - \omega_i) \quad (6.4)$$

标准的参数化谱函数的方法记为

$$J(\omega) = 2\pi\alpha\omega_c^{1-s}\omega^s \quad (6.5)$$

$s = 1$ 的情况称作Ohmic耗散，这时模型6.3可以映射为各向异性Kondo模型。而对于 $s = 1$ 并且 $\alpha$ 在 $\frac{1}{2}$ 及其附近时，即谱函数为

$$J(\omega) \approx \pi\omega \quad (6.6)$$

的特殊情况，模型6.3可进一步映射为我们下面要讲的共振能级模型。

### 6.2.3 共振能级模型

上节介绍的自旋-玻色子模型映射得到的共振能级模型(Resonant-Level Model)[19, 30], 其哈密顿量是

$$H = \frac{vt}{2}\sigma^z + \hbar v_F \sum_k k c_k^\dagger c_k + V(\sigma^+ c + \sigma^- c^\dagger) + U\sigma^z(c^\dagger c - \frac{1}{2}) \quad (6.7)$$

这个模型就是哈密顿量含时的相互作用共振能级模型。对于 $U = 0$ 的无相互作用的情况, 这个模型是精确可解的。其参数与映射前的自旋-玻色子模型的参数的关系是

$$V = \frac{\hbar\Delta}{2}(\rho\hbar\omega_c)^{-1/2} \quad (6.8)$$

$$U = (1 - \sqrt{2\alpha})/2\rho \quad (6.9)$$

$\rho = (2\pi\hbar v_F)^{-1}$  费米面附近的态密度, 并且我们有假设了在整个能带范围内态密度是相同的。 $c$  is Wannier 算符, 定义为

$$c \equiv L^{-1/2} \sum_k c_k \quad (6.10)$$

$c_k$  是导带内具有动量 $k$ 的无自旋费米子的湮灭算符.  $L$ 是归一化常数, 使得波矢 $k$ 取值 $k = 2\pi/L \cdot n$ ,  $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$  关于具体的映射的方法可以参考文献[30]和[19]。

为了使用DMRG来研究这个杂质模型我们要把它变换到Wilson链的形式。首先把哈密顿量6.7在能量表象写出为

$$\begin{aligned} \frac{H}{D} &= \frac{vt}{2D}\sigma^z + \int_{-1}^1 \epsilon a_\epsilon^\dagger a_\epsilon d\epsilon + \left(\frac{\Gamma}{\pi D}\right)^{1/2} \int_{-1}^1 d\epsilon (a_\epsilon^\dagger \sigma^- + \sigma^+ a_\epsilon) \\ &+ \frac{U\rho}{D}\sigma^z \left( \int_{-1}^1 a_\epsilon^\dagger d\epsilon \int_{-1}^1 a_\epsilon d\epsilon - \frac{1}{2} \right) \end{aligned} \quad (6.11)$$

其中 $\Gamma \equiv \pi\rho V^2$ ,  $D$  半能带宽度。 $a_\epsilon^\dagger$ 和 $a_\epsilon$  是导带中的无自旋费米子算符。

按照我们在5.2节中讲到的方法, 我们将哈密顿量6.11变换为Wilson链的形式

$$\begin{aligned} \frac{H}{D} &= \frac{vt}{2D}\sigma_z + \frac{1}{2}(1 + \Lambda^{-1}) \sum_{n=0}^{\infty} \Lambda^{-n/2} \xi_n [f_n^\dagger f_{n+1} + f_{n+1}^\dagger f_n] \\ &+ \left(\frac{2\Gamma}{\pi D}\right)^{1/2} (f_0^\dagger \sigma^- + \sigma^+ f_0) + \frac{2U\rho}{D}\sigma^z (f_0^\dagger f_0 - \frac{1}{2}) \end{aligned} \quad (6.12)$$

其中

$$\xi_n = (1 - \Lambda^{-n-1})(1 - \Lambda^{-2n-1})^{-1/2}(1 - \Lambda^{-2n-3})^{-1/2} \quad (6.13)$$

算符  $f_n^\dagger$  和  $f_n$  是 Wilson 导带格点  $n$  的产生和湮灭算符。

哈密顿量 6.12 就是我们可以用 DMRG 处理的形式。在下面的计算中我们选取  $D = 1$  作为能量单位。我们还可以用无自旋的费米子算符来代替 Pauli 矩阵

$$\sigma^+ = d^\dagger, \quad \sigma^- = d, \quad \sigma^z = d^\dagger d - \frac{1}{2} \quad (6.14)$$

这样哈密顿量变为

$$\begin{aligned} H = & \frac{vt}{2}n_d + \frac{1}{2}(1 + \Lambda^{-1}) \sum_{n=0}^{\infty} \Lambda^{-n/2} \xi_n [f_n^\dagger f_{n+1} + f_{n+1}^\dagger f_n] \\ & + \left(\frac{2\Gamma}{\pi}\right)^{1/2} (f_0^\dagger d + d^\dagger f_0) + 2U\rho(d^\dagger d - \frac{1}{2})(f_0^\dagger f_0 - \frac{1}{2}) \end{aligned} \quad (6.15)$$

### 6.3 用DMRG研究静态共振能级模型

我们首先不考虑杂质上的能量不随时间变化，同时也不考虑相互作用，这样我们得到静态共振能级模型：

$$H = \epsilon_d n_d + \sum_k \epsilon_k c_k^\dagger c_k + V \sum_k (d^\dagger c_k + c_k^\dagger d) \quad (6.16)$$

它的 Wilson 链形式的哈密顿量是

$$\begin{aligned} H = & \epsilon_d n_d + \frac{1}{2}(1 + \Lambda^{-1}) \sum_{n=0}^{\infty} \Lambda^{-n/2} \xi_n [f_n^\dagger f_{n+1} + f_{n+1}^\dagger f_n] \\ & + \left(\frac{2\Gamma}{\pi}\right)^{1/2} (f_0^\dagger d + d^\dagger f_0) \end{aligned} \quad (6.17)$$

哈密顿量 6.16 可以用格林函数的运动方程来求解。在宽能带极限下  $D \rightarrow \infty$  求得的杂质谱函数是

$$A_d(\omega) = \frac{\Gamma/\pi}{(\omega - \epsilon_d)^2 + \Gamma^2} \quad (6.18)$$

对于有限带宽情况我们令  $D = 1$  作为能量单位，这时求得的谱函数是

$$A_d(\omega) = \begin{cases} \frac{\Gamma/\pi}{\left(\omega - \epsilon_d - \frac{\Gamma}{2\pi} \ln \left[1 + \frac{4(\omega - \epsilon_d)}{(\omega - \epsilon_d - 1)^2}\right]\right)^2 + \Gamma^2}, & \omega \in (-1, 1) \\ 0, & \omega \leq -1 \text{ or } \omega \geq 1 \end{cases} \quad (6.19)$$

根据谱函数我们就可以求出杂质的热力学和动力学性质。例如后面马上就要用到的杂质上的占据数是

$$n_d(\epsilon_d) = \int_{-D}^D f(\omega) A_d(\omega) d\omega \quad (6.20)$$

其中 $f(\omega)$ 是Fermi分布函数

$$f(\omega) = \frac{1}{1 + e^{\beta\omega}} \quad (6.21)$$

动力学关联函数 $\langle d^\dagger(t)d(0) \rangle$ 的虚部是

$$Im[\langle d^\dagger(t)d(0) \rangle] = - \int_{-1}^1 A_d(\omega) \left(1 - \frac{1}{1 + e^{\beta\omega}}\right) \sin(\omega t) d\omega \quad (6.22)$$

### 6.3.1 热力学性质

首先我们用FTDMRG来研究杂质的热力学性质，具体的我们想要知道在不同的温度下，杂质上的粒子数如何随着杂质上的占据能变化，即我们要求不同温度下的 $n_d(\epsilon_d)$ 。

用FTDMRG求温度为 $\beta$ 时的 $n_d(\epsilon)$ 与用FTDMRG研究一般的一维问题没有什么不同，甚至更简单，因为我们只需要求出Wilson链的第一个格点也就是杂质格点的占据数。我们取一些列的 $\epsilon_d$ 的点，给定一个 $\epsilon_d$ 我们就给定了一个哈密顿量。用FTDMRG计算温度为 $\beta$ 时每一个哈密顿量的杂质格点上的占据数，我们就得到了温度为 $\beta$ 时的 $n_d(\epsilon_d)$ 。

图6.2是三个不同的温度 $\beta = 0.1$ ,  $\beta = 1$ 和 $\beta = 10$ 用FTDMRG求出的 $n_d(\epsilon_d)$ 和精确解的比较。可以看出在很宽的温度范围内，DMRG与精确解都符合的相当的好。

### 6.3.2 动力学关联函数

图6.3和图6.4分别是我们在零温和有限温时计算的格点上的动力学关联函数的虚部。我们令 $\epsilon_d = 0$ ，因此我们使用的哈密顿量的Wilson链的形式是

$$H = \frac{1}{2}(1 + \Lambda^{-1}) \sum_{n=0}^{\infty} \Lambda^{-n/2} \xi_n [f_n^\dagger f_{n+1} + f_{n+1}^\dagger f_n] + \left(\frac{2\Gamma}{\pi}\right)^{1/2} (f_0^\dagger d + d^\dagger f_0) \quad (6.23)$$

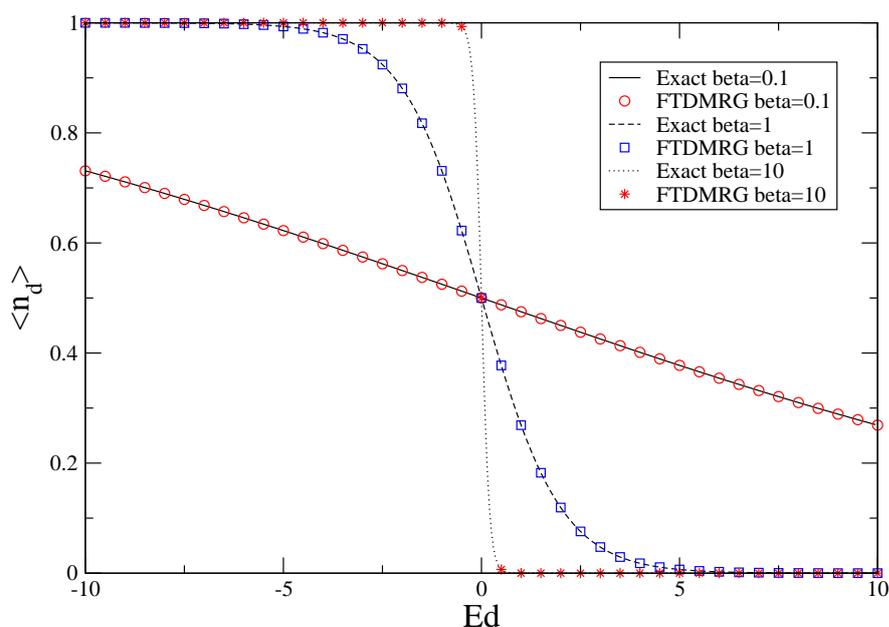


图 6.2: 不同温度下杂质上的占据数 $n_d$ 对杂质的占据能 $\epsilon_d$ 的依赖关系。比较了精确解与FTDMRG的结果。DMRG使用的参数是杂化参数 $\Gamma = 0.01$ , 对数离散化参数 $\Lambda = 1.5$ , Wilson链长 $L = 100$ , 虚时演化步长 $\tau = 0.05$ , DMRG保留200个状态。精确解我们使用了无限带宽极限下的公式6.18, 因为 $\Gamma$ 很小, 所以这是一个很好的近似。

杂化参数为 $\Gamma = 0.05$ , Suzuki-Trotter步长是 $\tau = 0.1$ 。

零温时DMRG的每一步的极端误差很小, 在仅仅保留100个状态时误差的数量级是 $10^{-7}$ 。由图6.3我们可以看出时间不是很长时DMRG与精确解符合的非常好。过了一定时间之后, DMRG的结果产生了以精确解为中心的逐渐增大的震荡。通过取更靠近与1的对数离散化参数我们可以有效的减小这种震荡。

有限温度下, 杂质与能带之间的纠缠度会随着时间迅速变大, 所以DMRG的截断误差变得更加重要。从图6.4所示的有限温动力学关联函数和相应的DMRG每步截断误差我们可以看出我们在有限温度时计算的时间关联函数远不如在零温时精确。所以需要长时间的有限温动力学关联函数信息, 我们就需要保留很多的状态数目。

当然对于计算动力学关联函数从而计算谱函数的问题现有的数值重正化群已经能够很好的解决, 所以并不是很迫切的需要用DMRG来计算。这里我们只是测试了一下DMRG计算这类问题的效果供以后的研究参考。

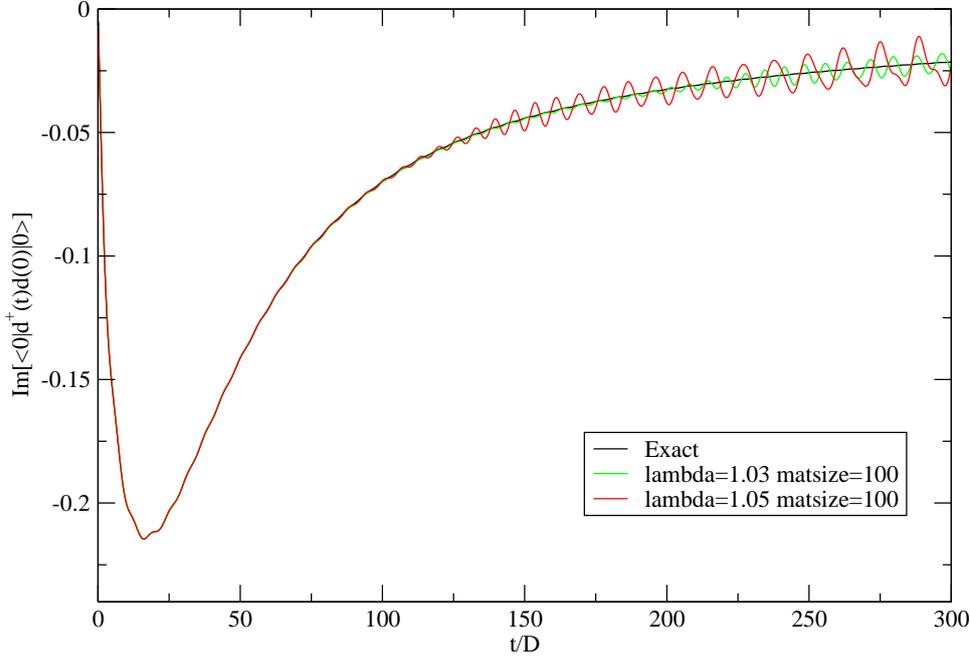


图 6.3:  $T = 0$ 时动力学关联函数的虚部  $Im[\langle 0|d^\dagger(t)d(0)|0 \rangle]$ .  $\lambda(\Lambda)$ 是对数离散化参数,  $matsize$  是DMRG保留的状态数目。  $|0 \rangle$ 是基态。  $\Lambda = 1.05$ 时我们所用的Wilson链长是240,  $\Lambda = 1.03$ 时链长是400。

#### 6.4 用DMRG研究哈密顿量含时的共振能级模型的动力学

下面我们来研究无相互作用的哈密顿量含时的共振能级模型。哈密顿量的原始形式是

$$\hat{H}(t) = \epsilon_d(t)d^\dagger d + \sum_k \epsilon_k c_k^\dagger c_k + V \sum_k (d^\dagger c_k + c_k^\dagger d). \quad (6.24)$$

转换成Wilson链的形式是

$$\begin{aligned} \hat{H}(t) = & \epsilon_d(t)d^\dagger d + \left(\frac{2\Gamma D}{\pi}\right)^{1/2}(f_0^\dagger d + d^\dagger f_0) \\ & + \frac{D}{2}(1 + \Lambda^{-1}) \sum_{n=0}^{\infty} \Lambda^{-n/2} \xi_n (f_n^\dagger f_{n+1} + f_{n+1}^\dagger f_n), \end{aligned} \quad (6.25)$$

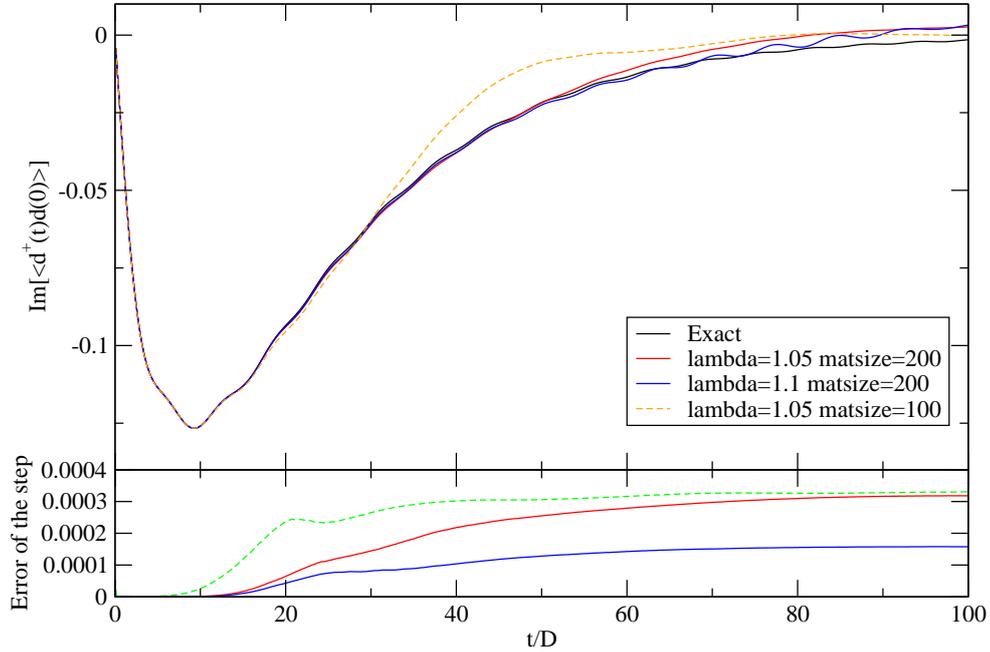


图 6.4: 温度是  $\beta = 20$  时动力学关联函数  $\langle d^\dagger(t)d(0) \rangle_\beta$  的虚部。下图是 DMRG 每一步的截断误差。  $\Lambda = 1.05$  时的 Wilson 链长为 240,  $\Lambda = 1.1$  时的链长为 140。

这里我们重新定义

$$\epsilon_d(t) = Dvt \quad (6.26)$$

$D$  是半能带宽度, 如上面的讨论一样我们令  $D = 1$  作为能量单位。  $v$  是能级移动速度。在具体的计算中我们只能计算有限的时间尺度, 因此我们实际使计算的时间长度是  $t \in [-30, 70]$  或者  $t \in [-50, 50]$ , 另外如果没有特别指明, 我们使用的能级移动速度是  $v = 1$ 。初始时刻  $t_0 = -30$  或  $t = -50$  时的格点占据能远低于费米面, 因此初始时刻哈密顿量的基态是对  $t_0 \rightarrow -\infty$  时的基态的很好的近似。

在  $t_0$  时刻杂质上有一个粒子占据, 随着时间杂质能级逐渐升高, 离能带越来越远, 这时杂质与能带交换粒子的几率越来越大。当杂质能级跃过能带之后, 杂质与能级交换粒子的几率逐渐减小。所以当  $t \rightarrow \infty$  时, 杂质上的粒子数期望

值要小于1。我们希望具体的来研究这个过程，比如我们想知道 $n_d$ 如何随时间变化，即求 $n_d(t)$ 。

#### 6.4.1 精确解

首先我们用严格的方法来解决这个问题。哈密顿量6.24可以写成二次型的形式

$$\hat{H}(t) = (a_0^\dagger, a_1^\dagger, a_2^\dagger, \dots, a_{L-1}^\dagger) H(t) \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_{L-1} \end{pmatrix}, \quad (6.27)$$

其中 $a_0 \equiv d$ ,  $a_i \equiv f_{i-1}$ .  $H(t)$ 是一个 $L \times L$ 的厄米矩阵,  $L$ 是Wilson链的长度。

对角化矩阵 $H(t_0)$ 我们得到

$$\hat{H}(0) = \sum_k E_k c_k^\dagger c_k. \quad (6.28)$$

第 $k$ 个单粒子能级是

$$|k\rangle = c_k^\dagger |0\rangle = \sum_i u_{ik} a_i^\dagger |0\rangle, \quad (6.29)$$

$u_{ik}$ 是 $H(0)$ 的本征矢, 满足

$$\sum_j H(0)_{ij} u_{jk} = E_k u_{ik}. \quad (6.30)$$

在 $t_0$ 系统处于热力学平衡态, 单粒子状态服从费米分布

$$f(k) = \frac{1}{1 + e^{\beta E_k}}. \quad (6.31)$$

零温时就是一个简单的阶梯函数

$$f(k) = \begin{cases} 0, & E_k > 0 \\ 1, & E_k < 0 \end{cases}. \quad (6.32)$$

系统的初始密度矩阵是

$$\hat{\rho}(t_0) = \sum_k f(k) |k\rangle \langle k|. \quad (6.33)$$

密度矩阵的演化服从von Neumann方程

$$i\frac{\partial\hat{\rho}(t)}{\partial t} = [\hat{H}(t), \hat{\rho}(t)]. \quad (6.34)$$

这个方程可以用一般的常微分方程求解方法，例如Matlab的ode45，方便的解出来。然后我们就可以求出算符在某一时刻的期望值，比如 $\hat{n}_d(t)$ 为

$$n_d(t) = Tr[\hat{n}_d\hat{\rho}(t)] = Tr[a_0^\dagger a_0\hat{\rho}(t)]. \quad (6.35)$$

### 6.4.2 精确解结果

我们用精确解来分析不同参数对这个问题的影响。在计算 $n_d(t)$ 中我们用到的参数分为两类，一类是问题本身的参数包括能级移动速度 $v$ ，温度 $\beta$ ，这类参数是客观的参数。另一类是对数离散化能带时用的参数包括 $\Lambda$ ，Wilson链的长度 $L$ ，这类参数是主观参数，我们需要综合考虑它们对结果精度和计算量的影响来选择尽可能好的参数值。

#### 6.4.2.1 对数离散化参数

首先我们看主观的对数离散化参数。我们使用的外势是 $\epsilon_d(t) = t - 50$ 其中 $t \in [0, 100]$ 。

图6.5所示为不同的Wilson链长对结果的影响。可以看出随着链长的正常，结果迅速收敛，在链长超过 $L = 50$ 以后结果变换很小，后面的实际计算中对于 $\Lambda = 1.08$ 时的情况我们取链长为 $L = 160$ 。

图6.6比较了不同 $\Lambda$ 对结果的影响。可以看到， $\Lambda$ 较大时，在越过能带后会有较大的人为的震荡。使用接近与1的 $\Lambda$ 可以有效的消除这些震荡，经过试验我们发现使用 $\Lambda = 1.08$ 几乎消除了所有人为造成的震荡，进一步减小 $\Lambda$ 对结果已经没有明显影响。对于仍然存在的震荡和拍我们会在后面给出物理上的解释。

我们也测试了使用 $z$ 平均（参考附录B）来消除人为震荡的效果。如图6.7所示我们比较了不是用 $z$ 平均和另外两种 $z$ 平均的效果。可以看出 $z$ 平均可以一定程度上减小人为震荡，但是效果远不如使用较小的 $\Lambda$ 。图6.8比较了使用较小的 $\Lambda$ 与使用 $z$ 平均来消除人为震荡的效果。使用较为接近于1的对数离散化参数 $\Lambda$ 可以在计算量小于 $z$ 平均的前提下取得远比 $z$ 平均好得多的效果。这在另一个较多也体现出了DMRG的优越性，因为它可以使用非常接近于1的 $\Lambda$ ，而NRG则不行。

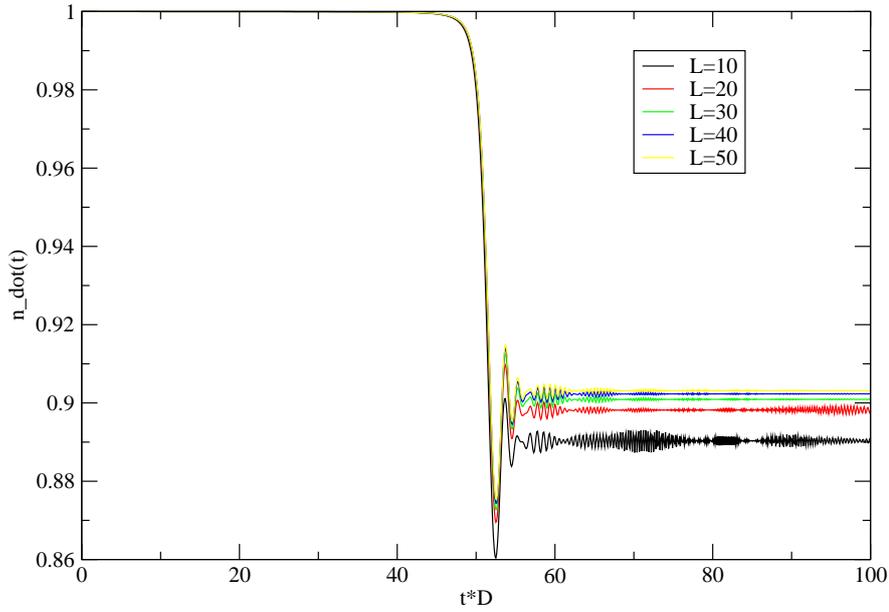


图 6.5: 不同的Wilson链长对结果的影响。我们使用的其他参数是 $\Lambda = 1.08$ ,  $\Gamma = 0.05$ ,  $\tau = 0.1$ , 温度 $T = 0$ 。

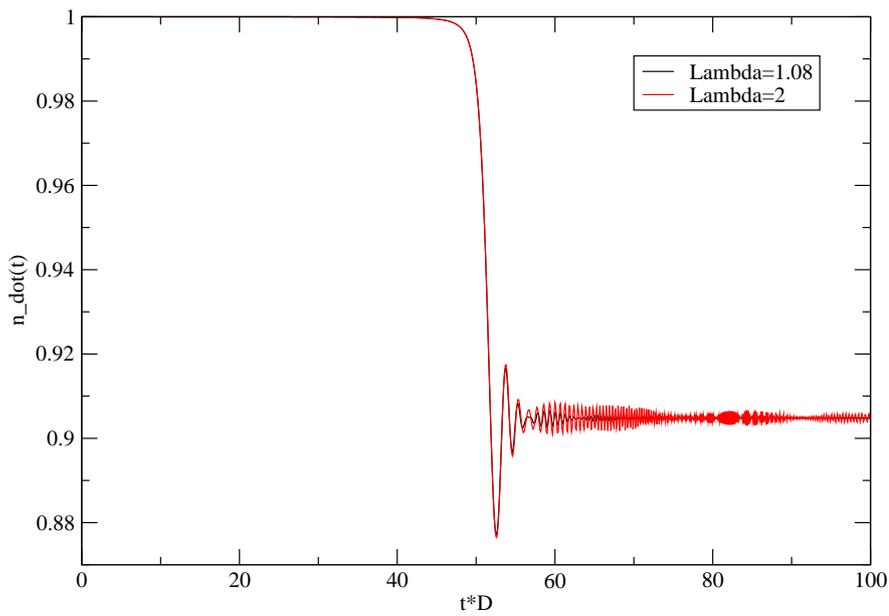


图 6.6: 不同的 $\Lambda$ 对结果的影响。我们使用的其他参数是 $L = 160$ ,  $\Gamma = 0.05$ ,  $\tau = 0.1$ , 温度 $T = 0$ 。

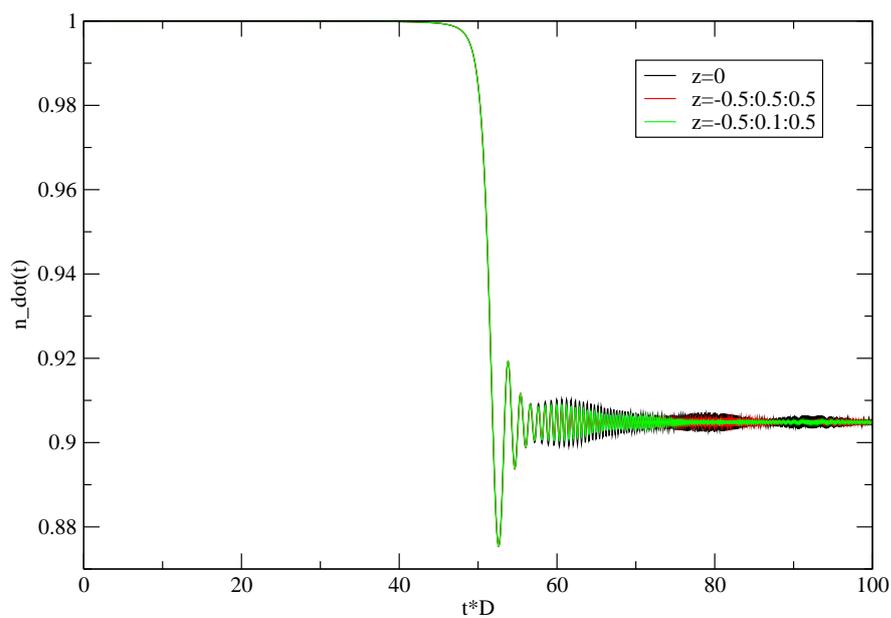


图 6.7: 使用 $z$ 平均 (参考附录B) 来消除人为震荡的效果。 $z = 0$ 不是用 $z$ 平均,  $z = -0.5 : 0.5 : 0.5$ 是取 $z = -0.5, 0, 0.5$ 三种情况作平均,  $z = -0.5 : 0.1 : 0.5$ 是从-0.5到0.5每隔0.1取一个 $z$ 值, 然后做平均。

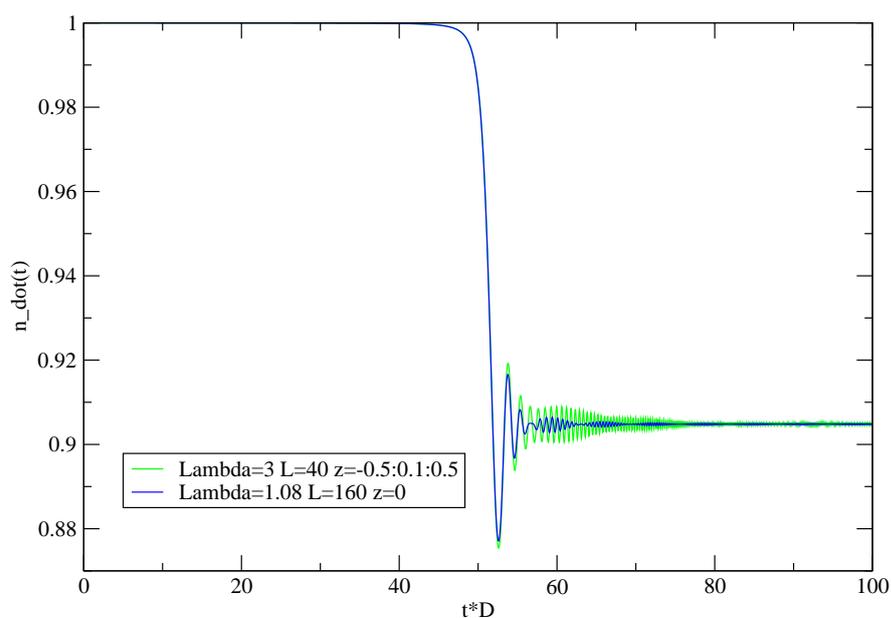


图 6.8: 使用 $z$ 平均与使用较小的对数离散化参数 $\Lambda$ 对于消除人为震荡的效果的比较。

### 6.4.2.2 问题相关参数

我们这里研究的与问题相关的参数是温度 $\beta = 1/T$ 和能级移动的速度。图6.9是不同温度下的 $n_d(t)$ 。

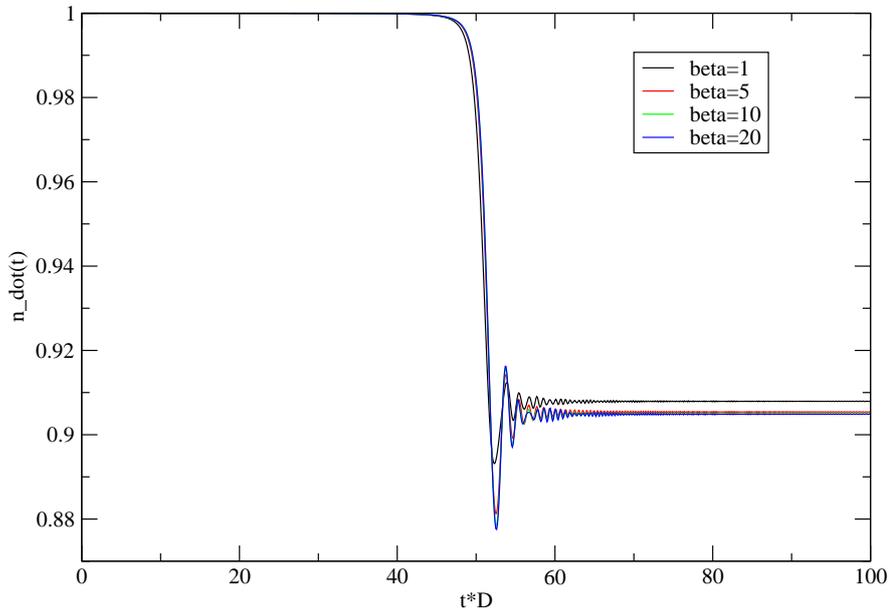


图 6.9: 不同温度下的 $n_d(t)$ 。

图6.10是不同的能级移动速度对于该问题的影响。能级移动的越慢，粒子最终就有越大的几率跃迁到能带上。极限情况是准静态过程， $t \rightarrow \infty$ 粒子完全跃迁的能带上。

### 6.4.3 DMRG结果

图 6.11给出了零温时的精确解和DMRG的结果。图 6.12 给出了DMRG结果的误差。可以看出DMRG的结果是非常精确的。仅仅保留100个状态我们得到的最大相对误差的数量级是 $10^{-4}$ ，我们可以通过增加保留的状态数目进一步有效的减小误差。

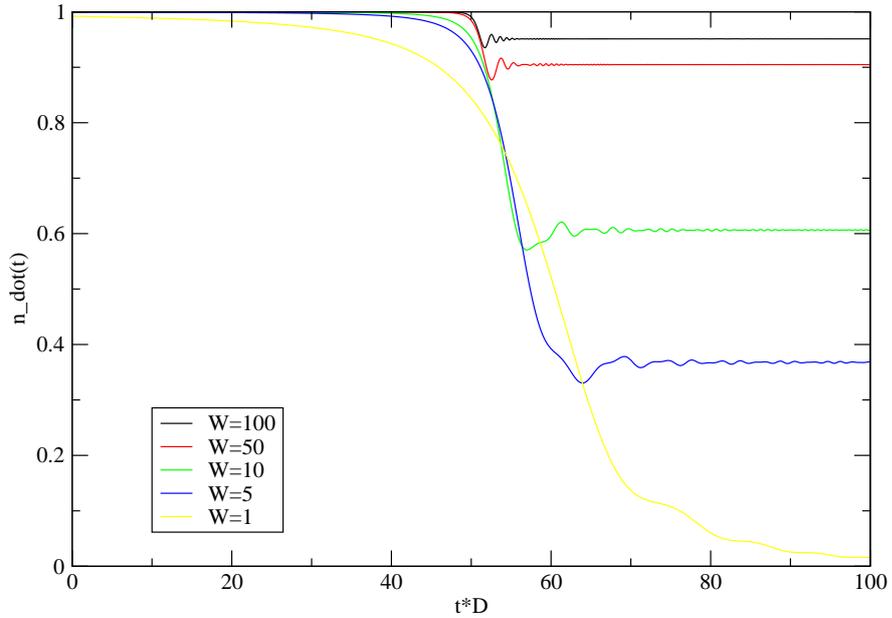


图 6.10: 不同能级移动速度。其中我们使用了  $\epsilon_d(t) = \frac{2W}{T}t - W$ ,  $T = 100$ 。

#### 6.4.4 物理分析

下面我们对上面的结果做一个直观的物理上的理解。首先我们研究一个最简单的静态的二能级系统，其哈密顿量是

$$H = E_0 d^\dagger d + E_1 c_1^\dagger c_1 - \gamma(d^\dagger c_1 + c_1^\dagger d), \quad (6.36)$$

矩阵形式是

$$H = \begin{pmatrix} E_0 & -\gamma \\ -\gamma & E_1 \end{pmatrix}. \quad (6.37)$$

我们要问关于这个模型动力学的一个基本问题：假如在  $t_0$  系统处于能级  $|d\rangle = d^\dagger|0\rangle$ ，那么在  $t$  时刻系统仍然处于  $|d\rangle$  的几率是什么？顺便指出如果我们使用  $\epsilon_d(t)$  代替  $E_0$  这就变成了最初的 Landau-Zener 问题。

用哈密顿量 (6.36) 的两个本征矢  $|\alpha\rangle, |\beta\rangle$  展开  $|d\rangle$  我们有

$$|\phi(0)\rangle = |d\rangle = a|\alpha\rangle + b|\beta\rangle \quad (6.38)$$

在  $t$  时刻这个状态演化成为

$$|\phi(t)\rangle = ae^{-iE_\alpha t}|\alpha\rangle + be^{-iE_\beta t}|\beta\rangle, \quad (6.39)$$

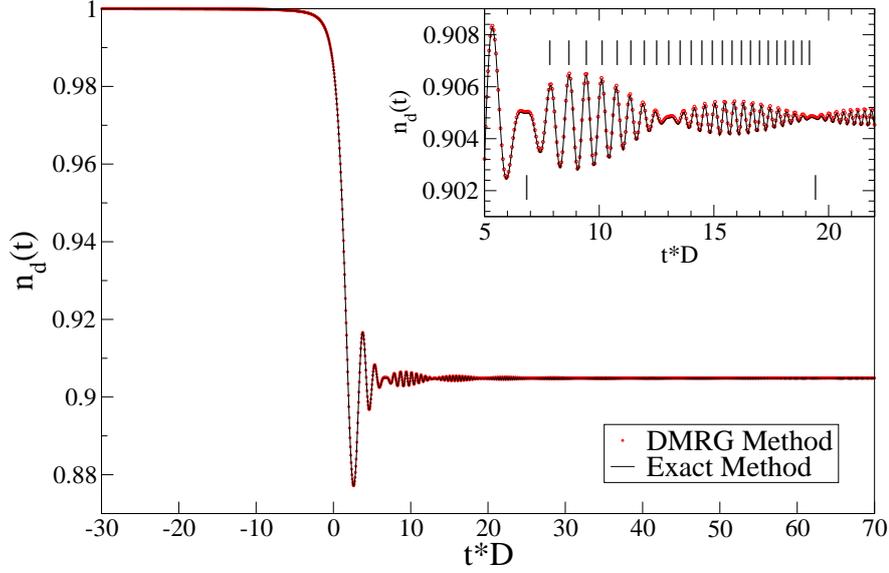


图 6.11: 零温时用DMRG和精确解计算的杂质上粒子占据数随时间的变化。我们使用的参数是Wilson链长 $L = 160$ , 对数离散化参数 $\Lambda = 1.08$ , 杂化参数 $\Gamma = 0.05$ , 杂质上的势能是 $\epsilon_d(t) = t - 30$  with  $t \in [0, 100]$ 。对t-DMRG我们使用的Suzuki-Trotter步长是 $\tau = 0.05$ , 保留100个状态。嵌入图是对震荡和拍的局部放大。上下部的标记是为了比较数值结果与我们下一节要介绍的一个简单的物理直观理解。

其中 $E_\alpha$ 和 $E_\beta$ 是两个本征能量。

在 $t$ 时刻发现状态仍然是 $|d\rangle$ 的几率是

$$\begin{aligned} |\langle \phi(0) | \phi(t) \rangle|^2 &= |a|^4 + |b|^4 + 2|a|^2|b|^2 \cos\left(\frac{E_\beta}{\hbar} - \frac{E_\alpha}{\hbar}\right)t \\ &= 1 - A + A \cos \omega t, \end{aligned} \quad (6.40)$$

其中

$$A = 2\gamma^2 / (4\gamma^2 + (E_1 - E_0)^2) \quad (6.41)$$

$$\omega = \sqrt{4\gamma^2 + (E_1 - E_0)^2} \quad (6.42)$$

当 $E_0$ 随时间变化时上面的频率就变为瞬时频率

$$\omega(t) = \sqrt{4\gamma^2 + (E_1 - E_0(t))^2}, \quad (6.43)$$

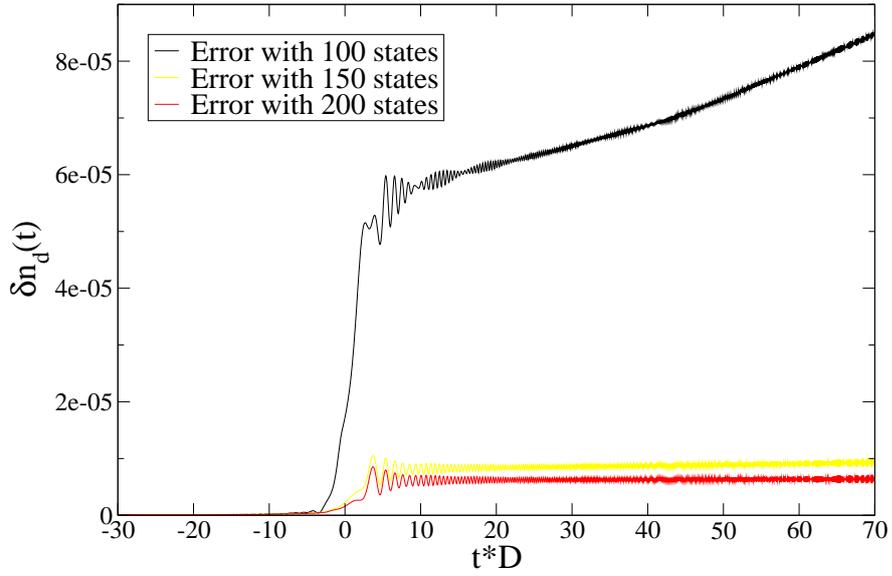


图 6.12: 零温时保留不同数目的状态时的DMRG的误差。y轴定义为 $\delta n_d(t) \equiv n_d^{\text{DMRG}}(t) - n_d^{\text{Exact}}(t)$ 。其他参数与图 6.11相同。

公式 (6.40)中的余弦项变为 $\cos \left[ \int_0^t \omega(s) ds \right]$ 。

我们现在回到原来的问题，用上面的物理图像来解释结果中的振荡频率和拍的周期。能带对这个问题的贡献分为两部分：一是费米面下的被占据的能级，二是费米面上未被占据的能级。与能级的移动速度 $v = 1$ 相比图 6.11中的杂化参数 $\Gamma = 0.05$ 非常小，这意味着粒子只有很小的概率跃迁到能带上面。因为费米面下被占据的能级对粒子跃迁的影响远小于费米面上部未被占据的能级。作为近似我们忽略费米面下的能级而只考虑未占据能级的影响。我们将所有未占据能级的 $E_1$ 的影响加起来，将式(6.40)中的振动项对 $E_1$ 积分得：

$$\begin{aligned} \tilde{A}(t) &\equiv \int_0^1 \cos \left( \int_0^t (E_1 - s + 30) ds \right) dE_1 \\ &= \frac{2}{t} \sin \left( \frac{t}{2} \right) \cos \left[ \frac{t}{2} (t - 61) \right]. \end{aligned} \quad (6.44)$$

在上式中我们同样忽略了 $\omega(t)$ 中的 $4\gamma^2 = 8\Gamma D/\pi$ 。除了能级移动到能带附近时这是一个很好的近似。

式 (6.44)可以用来理解图Fig. 6.11中的震荡和拍。 $\tilde{A}(t)$ 的因子 $\sin \left( \frac{t}{2} \right)$ 描述的是拍。拍的周期是 $T_{\text{beats}} = \frac{2\pi}{1/2} \approx 12.6$ 。我们在图 6.11的嵌入图中曲线的下侧标出的两个标度的距离是12.6，我们可以看出这个周期与图中的数据吻合的很好。

图片上侧的标记是我们解

$$\frac{t}{2}(t - 61) = 2m\pi + \text{const} \quad (6.45)$$

得到的，其中 $m$ 是整数。我们选择const使得标志正好对准震荡的峰值。我们可以看到标记与震荡吻合的很好。

## 第七章 总结与展望

本文介绍了DMRG的最新进展t-DMRG与FTDMRG，以及它们在一维量子问题和量子杂质问题上的应用。从我们的一些测试结果可以看出将DMRG应用到计算一维量子系统的有限温度下的动力学和量子杂质问题的动力学问题上是很有前景的。

DMRG自从1992年提出以来它的应用范围就不断的被拓展，特别是将DMRG用矩阵乘积态语言表述之后，得益于相关领域的研究，DMRG更是突飞猛击的发展。在DMRG的发展过程中一个引人注意的特点是DMRG的拓展性很强，它常常能与其他的方法相结合，从而架起了连接两个不同领域的桥梁。例如t-DMRG和FTDMRG本身就是和量子领域互相借鉴的结果。另外就在最近几个月Sandvik和Vidal[45]以及Schuch[48]等人分别尝试了将DMRG与量子蒙特卡洛相结合来计算二维量子模型，取得了很有希望的结果。这个方向的研究还涉及到拓扑量子计算等相关领域，是最近开始的一个热点研究领域。

作为一个数值方法，DMRG仍处于迅速发展的初始阶段。可以预见作为一个非常灵活而且能够将不同领域联系起来的桥梁的方法，必然能够在促进自身的发展的同时对相关领域的发展起到有益的推动作用。



## 附录 A 波函数变换

波函数变换又叫波函数预测，更准确的说应该叫做波函数表象变换。是DMRG算法的一个重要组成部分。在有限DMRG中波函数变换用来寻找一个好的初始的试探波函数以便加快迭代算法求总系统基态的收敛速度[64]。而在t-DMRG中波函数变换则是不可缺少的组成步骤。

如图A.1所示，加入我们现在有一个链长为 $L$ 的系统，采用开放边界条件。我们想把上面构型的表象向右移动一个格点变成下面构型的表象。上面构型的表象的基矢是 $|l\rangle|m_{l+1}\rangle|m_{l+2}\rangle|l+3\rangle$ ，我们约定 $|x\rangle$ 在最前面时表示从第1个格点到第 $x$ 个格点，在最后面时表示从第 $x$ 个格点到最后一个格点 $L$ ， $|m_x\rangle$ 表示第 $x$ 个格点。我们想把这个表象变成下面构型的 $|l+1\rangle|m_{l+2}\rangle|m_{l+3}\rangle|l+4\rangle$ 表象。要做这样一个表象变换也就是要把所有的算符和波函数在这个新的表象中表示出来。

对于算符，正如我们在正文介绍传统DMRG所指出的，我们仅仅保留了格点和块的算符在各自的表象中的形式而没有把他们显式的在总系统的表象中表示出来。所以算符的变换仅仅是在新的块表象的变换。对于右侧块的算符，因为右侧块减少了一个格点而退回到更前一部，所以我们只需要重新读出已经保存了的上一步的右块信息即可。而对于左块，增加了一个格点，希尔伯特空间扩大了，所以我们就要像无限DMRG那样对左块的算符进行重正化。

假如上面构型中的波函数：

$$|\Psi\rangle = \sum_{l, m_{l+1}, m_{l+2}, l+3} \Psi_{l, m_{l+1}, m_{l+2}, l+3} |l\rangle|m_{l+1}\rangle|m_{l+2}\rangle|l+3\rangle \quad (\text{A.1})$$

那么我们利用这个波函数构造的左块的约化密度矩阵

$$\rho_L = \text{Tr}_R |\Psi\rangle\langle\Psi| \quad (\text{A.2})$$

来求出变换矩阵 $L[m_{l+1}]$ 构造出重正化后的新的左块的基：

$$|l+1\rangle = \sum_{m_{l+1}, l} L[m_{l+1}]_{l+1, l} |l\rangle|m_{l+1}\rangle \quad (\text{A.3})$$

所有的新左块的算符要在这个基的下面重新写出来。

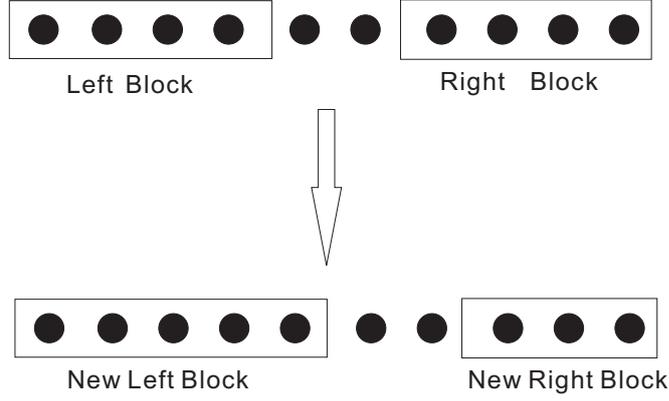


图 A.1: 波函数变换示意图

由上一步保存的变换信息我们知道:

$$|l+3\rangle = \sum_{m_{l+3}, l+4} R[m_{l+3}]_{l+3, l+4} |m_{l+3}\rangle |l+4\rangle \quad (\text{A.4})$$

利用 $L[m_{l+1}]$ 和 $R[m_{l+3}]$ 我们可以很容易的把波函数变换到新的表象中:

$$|\Psi'\rangle = \sum_{l+1, m_{l+2}, m_{l+3}, l+4} \Psi'_{l+1, m_{l+2}, m_{l+3}, l+4} |l+1\rangle |m_{l+2}\rangle |m_{l+3}\rangle |l+4\rangle \quad (\text{A.5})$$

这个变换是近似的但是因为

$$\sum_{l+1} |l+1\rangle \langle l+1| \approx 1 \quad (\text{A.6})$$

所以这是一个很好的近似, 这样做能使得 $|\langle \Psi | \Psi' \rangle|^2$ 非常接近于1。波函数的变换关系是:

$$\Psi'_{l+1, m_{l+2}, m_{l+3}, l+4} \approx \sum_{l, m_{l+1}, l+3} L[m_{l+1}]_{l+1, l} \Psi_{l, m_{l+1}, m_{l+2}, l+3} R[m_{l+3}]_{l+3, l+4} \quad (\text{A.7})$$

要注意的是在实际写程序时三个矩阵的连乘效率很低, 需要先乘两个矩阵再将所得的结果与另一个矩阵相乘。

## 附录 B $z$ 平均

$z$ 平均是NRG中的一个常用技巧，在不减小 $\Lambda$ 的情况下通过平均不同位置的对数分割来达到更加逼近连续能带的效果。

如图B.1所示，假如我们只用一种对数分割最左边的那种情况

$$x_n = \Lambda^{-n}, n = 0, 1, 2, \dots \quad (\text{B.1})$$

其中我们用了 $\Lambda = 2$ 。可以看出对于远离费米面的那部分能带，我们只用了很少几个能级来表示，对于有些问题，这样的近似过于粗糙。NRG方法本身又限制了我們想通过减小 $\Lambda$ 的方法来增加表述这部分能带的能级的数目。

Frota和Oliveira[17]首先提出可以通过移动离散化的位置做多次计算然后取平均来优化结果。具体是我们这样来选取分割点

$$x_n = \begin{cases} 1 & : n = 0 \\ \Lambda^{-(n+Z)} & : n \geq 1, \end{cases} \quad (\text{B.2})$$

利用上式给定一个 $Z \in [0, 1)$ 我们就有一组离散化矢量。通过计算个 $z$ 然后平均做后的结果，我们就能在一定程度上消除人为离散化能带的影响。

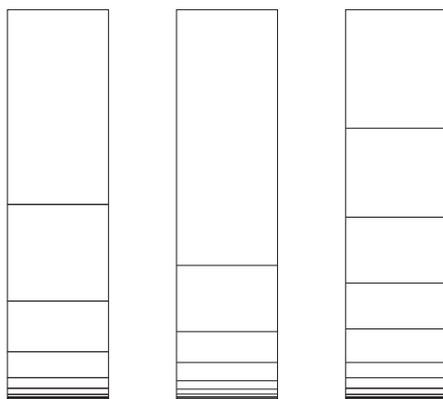


图 B.1:  $z$ 平均示意图。只画出了能带的上半部分, 下端是费米面。三个图都使用  $x_n = 2^{-n+z}$  分割, 三个图的  $z$  取值不同。如果我们用很多不同的  $z$  的分割来计算一个问题, 然后平均结果就可以在某种程度上更加逼近连续能带的情况。

## 附录 C 英文术语缩写及翻译对照表

缩写	英文全称	中文翻译
DMRG	Density Matrix Renormalization Group	密度矩阵重正化群
t-DMRG	Adaptive time-dependent DMRG	自适应含时密度矩阵重正化群
FTDMRG	Finte Temperature DMRG	有限温密度矩阵重正化群
	Static time-dependent DMRG	静态含时密度矩阵重正化群
TMRG	Transfer Matrix Renormalization Group	转移矩阵重正化群
NRG	Numerical Renormalization Group	数值重正化群
TD-NRG	Time-dependent NRG	含时数值重正化群
MPS	Matrix Product State (Representation)	矩阵乘积态 (表象)
TEBD	Time-evolve Block Decimation	
iTEBD	Infinite TEBD	

表 C.1: 英文术语缩写及翻译对照表



## 参考文献

- [1] Ian Affleck, Tom Kennedy, Elliott H. Lieb, and Hal Tasaki. Rigorous results on valence-bond ground states in antiferromagnets. *Phys. Rev. Lett.*, 59(7):799–802, Aug 1987.
- [2] K. A. Al-Hassanieh, A. E. Feiguin, J. A. Riera, C. A. Büsser, and E. Dagotto. Adaptive time-dependent density-matrix renormalization-group technique for calculating the conductance of strongly correlated nanostructures. *Phys. Rev. B*, 73:195304, 2006.
- [3] Frithjof B. Anders and Avraham Schiller. *Phys. Rev. Lett.*, 95:196801, 2005.
- [4] Frithjof B. Anders and Avraham Schiller. Spin precession and real-time dynamics in the kondo model: Time-dependent numerical renormalization-group study. *Physical Review B (Condensed Matter and Materials Physics)*, 74(24):245113, 2006.
- [5] P. W. Anderson and G. Yuval. Exact results in the kondo problem: Equivalence to a classical one-dimensional coulomb gas. *Phys. Rev. Lett.*, 23(2):89–92, Jul 1969.
- [6] R. Bulla, T. Pruschke, and A. C. Hewson. *J. Phys.:Condens. Matter*, 9:10463, 1997.
- [7] Ralf Bulla, Theo Costi, and Thomas Pruschke. *Rev. Mod. Phys.*, 80:395, 2008.
- [8] Ralf Bulla, Hyun-Jung Lee, Ning-Hua Tong, and Matthias Vojta. Numerical renormalization group for quantum impurities in a bosonic bath. *Phys. Rev. B*, 71:045122, 2005.
- [9] R. J. Bursill, T. Xiang, and G. A. Gehring. *J. Phys.: Condens. Matter*, 8:L583, 1996.

- [10] M. A. Cazalilla and J. B. Maston. *Phys. Rev. Lett.*, 88:256403, 2002.
- [11] I. Chiorescu, Y. Nakamura, C. J. P. M. Harmans, and J. E. Mooij. *Science*, 299:1869, 2003.
- [12] A J Daley, C Kollath, U Schollwöck, and G Vidal. *J. Stat. Mech.*, page 04005, 2004.
- [13] S. Daul, I. Ciofini, C. Daul, and S. R. White. *Int. J. Quantum Chem.*, 79:331, 2000.
- [14] G. Fano, F. Ortolani, and L. Ziosi. *Chem. Phys.*, 108:9246, 1998.
- [15] Adrian E. Feiguin and Steven R. White. *Phys. Rev. B*, 72:020404, 2005.
- [16] Adrian E. Feiguin and Steven R. White. *Phys. Rev. B*, 72:220401, 2005.
- [17] H. O. Frota and L. N. Oliveira. Photoemission spectroscopy for the spin-degenerate anderson model. *Phys. Rev. B*, 33(11):7871–7874, Jun 1986.
- [18] D. Gobert, C. Kollath, U. Schollwöck, and G. Schütz. Real-time dynamics in spin-1/2 chains with adaptive time-dependent dmrg. *Phys. Rev. E*, 71:036102, 2005.
- [19] F. Guinea, V. Hakim, and A. Muramatsu. Bosonization of a two-level system with dissipation. *Phys. Rev. B*, 32(7):4410–4418, Oct 1985.
- [20] Karen A. Hallberg, Peter Horsch, and Gerardo Martínéz. Numerical renormalization-group study of the correlation functions of the antiferromagnetic spin-1/2 heisenberg chain. *Phys. Rev. B*, 52(2):R719–R722, Jul 1995.
- [21] Patrik Henelius. Two-dimensional infinite-system density-matrix renormalization-group algorithm. *Phys. Rev. B*, 60(13):9561–9565, Oct 1999.

- 
- [22] S. Iblisdir, R. Orús, and J. I. Latorre. Matrix product states algorithms and continuous systems. *Physical Review B (Condensed Matter and Materials Physics)*, 75(10):104305, 2007.
- [23] Eric Jeckelmann. Dynamical density-matrix renormalization-group method. *Phys. Rev. B*, 66(4):045114, Jul 2002.
- [24] A. K. Kolezhuk, H.-J. Mikeska, and Shoji Yamamoto. Matrix-product-states approach to heisenberg ferrimagnetic spin chains. *Phys. Rev. B*, 55(6):R3336–R3339, Feb 1997.
- [25] C. Kollath, U. Schollwöck, J. von Delft, and W. Zwerger. One-dimensional density waves of ultracold bosons in an optical lattice. *Phys. Rev. A*, 71:053606, 2005.
- [26] C. Kollath, U. Schollwöck, and W. Zwerger. Spin-charge separation in cold fermi-gases: a real time analysis. *Phys. Rev. Lett*, 75:176401, 2005.
- [27] H. R. Krishna-murthy, J. W. Wilkins, and K. G. Wilson. Renormalization-group approach to the anderson model of dilute magnetic alloys. ii. static properties for the asymmetric case. *Phys. Rev. B*, 21(3):1044–1083, Feb 1980.
- [28] Till D. Kühner and Steven R. White. Dynamical correlation functions using the density matrix renormalization group. *Phys. Rev. B*, 60(1):335–343, Jul 1999.
- [29] L. D. Landau. *Phys. Z. Sowjetunion*, 2:46, 1932.
- [30] A. J. Leggett, S. Chakravarty, A. T. Dorsey, Matthew P. A. Fisher, Anupam Garg, and W. Zwerger. Dynamics of the dissipative two-state system. *Rev. Mod. Phys.*, 59(1):1–85, Jan 1987.
- [31] H. G. Luo, T. Xiang, and X. Q. Wang. *Phys. Rev. Lett.*, 91:049701, 2003.

- [32] Nobuya Maeshima, Yasuhiro Hieida, Yasuhiro Akutsu, Tomotoshi Nishino, and Kouichi Okunishi. Vertical density matrix algorithm: A higher-dimensional numerical renormalization scheme based on the tensor product state ansatz. *Phys. Rev. E*, 64(1):016705, Jun 2001.
- [33] Ian P. McCulloch. From density-matrix renormalization group to matrix product states. *arXiv:cond-mat/0701428v3*.
- [34] Y. Nakamura, Yu. A. Pashkin, and J. S. Tsai. *Nature*, 398:786, 1999.
- [35] T. Niemeijer. *Physica(Amsterdam)*, 36:377, 1967.
- [36] Satoshi Nishimoto, Eric Jeckelmann, Florian Gebhard, and Reinhard M. Noack. Application of the density matrix renormalization group in momentum space. *Phys. Rev. B*, 65(16):165114, Apr 2002.
- [37] R. M. Noack, S. R. White, and D. J. Scalapino. Correlations in a two-chain hubbard model. *Phys. Rev. Lett.*, 73(6):882–885, Aug 1994.
- [38] William D. Oliver, Yang Yu, Janice C. Lee, Karl K. Berggren, Leonid S. Levitov, and Terry P. Orlando. Mach-zehnder interferometry in a strongly driven superconducting qubit. *Science*, 310:1653, 2005.
- [39] Stellan Östlund and Stefan Rommer. Thermodynamic limit of density matrix renormalization. *Phys. Rev. Lett.*, 75(19):3537–3540, Nov 1995.
- [40] Franco Pellegrini, Simone Montangero, Giuseppe E. Santoro, and Rosario Fazio. *arXiv:0801.4475*, 2008.
- [41] D. Perez-Garcia, F. Verstraete, M. M. Wolf, and J. I. Cirac. Matrix product state representations. *Quantum Inf. Comput.*, 7:401, 2007.
- [42] S. Ramasesha, S. K. Pati, H. R. Krishnamurthy, Z. Shuai, and J. L. Brédas. *Synth. Met.*, 85:1019, 1997.
- [43] Hamed Saberi, Andress Weichselbaum, and Jan von Delft. *arXiv:0804.0193*, 2008.

- 
- [44] Keiji Saito, Martijn Wubs, Sigmund Kohler, Yosuke Kayanuma, and Peter Hänggi. Dissipative landau-zener transitions of a qubit: Bath-specific and universal behavior. *Physical Review B (Condensed Matter and Materials Physics)*, 75(21):214308, 2007.
- [45] A. W. Sandvik and G. Vidal. Variational quantum monte carlo simulations with tensor-network states. *Phys. Rev. Lett.*, 99:220602, 2007.
- [46] P. Schmitteckert. *Phys. Rev. B*, 70:121302, 2004.
- [47] Ulrich Schollwöck. *J. Phys. Soc. Jpn.*, 74:246, 2005.
- [48] Norbert Schuch, Michael M. Wolf, Frank Verstraete, and J. Ignacio Cirac. Simulation of quantum many-body systems with strings of operators and monte carlo tensor contractions. *Phys. Rev.*, 100:040501, 2008.
- [49] S. Singh, H.-Q. Zhou, and G. Vidal. Matrix product decomposition and classical simulation of quantum dynamics in the presence of a symmetry. *arXiv:cond-mat/0701427v1*.
- [50] Jesko Sirker and Andreas Klümper. Real-time dynamics at finite temperature by the density-matrix renormalization group: A path-integral approach. *Physical Review B (Condensed Matter and Materials Physics)*, 71(24):241101, 2005.
- [51] Caspar H. van der Wal, A. C. J. ter Haar, F. K. Wilhelm, R. N. Schouten, C. J. P. M. Harmans, T. P. Orlando, Seth Lloyd, and J. E. Mooij. Quantum superposition of macroscopic persistent-current states. *Science*, 290:773, 2000.
- [52] F. Verstraete and J. I. Cirac. Renormalization algorithms for quantum-many body systems in two and higher dimensions. *arXiv:cond-mat/0407066v1*.
- [53] F. Verstraete and J. I. Cirac. Matrix product states represent ground states faithfully. *Physical Review B (Condensed Matter and Materials Physics)*, 73(9):094423, 2006.

- [54] F. Verstraete, J. J. García-Ripoll, and J. I. Cirac. Matrix product density operators: Simulation of finite-temperature and dissipative systems. *Phys. Rev. Lett.*, 93(20):207204, Nov 2004.
- [55] F. Verstraete, D. Porras, and J. I. Cirac. Density matrix renormalization group and periodic boundary conditions: A quantum information perspective. *Phys. Rev. Lett.*, 93(22):227205, Nov 2004.
- [56] F. Verstraete, A. Weichselbaum, U. Schollwöck, J. I. Cirac, and Jan von Delft. *cond-mat/0504305*, 2005.
- [57] G. Vidal. Classical simulation of infinite-size quantum lattice systems in one spatial dimension. *Physical Review Letters*, 98(7):070201, 2007.
- [58] G. Vidal. Classical simulation of infinite-size quantum lattice systems in one spatial dimension. *Physical Review Letters*, 98(7):070201, 2007.
- [59] Guifré Vidal. Efficient classical simulation of slightly entangled quantum computations. *Phys. Rev. Lett.*, 91(14):147902, Oct 2003.
- [60] Xiaoqun Wang and Tao Xiang. Transfer-matrix density-matrix renormalization-group theory for thermodynamics of one-dimensional quantum systems. *Phys. Rev. B*, 56(9):5061–5064, Sep 1997.
- [61] S. R. White. *Phys. Rev. B*, 48:345, 1993.
- [62] S. R. White and R. L. Martin. *Chem. Phys.*, 110:4127, 1999.
- [63] Steven R. White. Density matrix formulation for quantum renormalization groups. *Phys. Rev. Lett.*, 69(19):2863–2866, Nov 1992.
- [64] Steven R. White. Spin gaps in a frustrated heisenberg model for *cav4o9*. *Phys. Rev. Lett.*, 77(17):3633–3636, Oct 1996.
- [65] Steven R. White and Adrian E. Feiguin. *Phys. Rev. Lett.*, 93:076401, 2004.
- [66] Kenneth G. Wilson. The renormalization group: Critical phenomena and the kondo problem. *Rev. Mod. Phys.*, 47(4):773–840, Oct 1975.

- 
- [67] T. Xiang. Density-matrix renormalization-group method in momentum space. *Phys. Rev. B*, 53(16):R10445–R10448, Apr 1996.
- [68] Tao Xiang, Jizhong Lou, and Zhaobin Su. Two-dimensional algorithm of the density-matrix renormalization group. *Phys. Rev. B*, 64(10):104414, Aug 2001.
- [69] C. Zener. *Proc. R. Soc. London*, 137:696, 1932.



## 发表文章目录

- [1] 郭成, 太阳帆的热力学分析, 大学物理, 24卷6期62页, 2005。
- [2] Cheng Guo, Andreas Weichselbaum, Stefan Kehrein, Jan von Delft, Tao Xiang *Using DMRG to Study Quantum Impurity Models with Time-Dependent Hamiltonians*, submitted to Phys. Rev. B.



## 致 谢

自2004年我来到理论所做本科毕业论文到现在已经四年有余。从一个对未来充满憧憬的本科毕业生到逐渐成熟，踌躇满志的即将毕业的研究生，我体会到了自己的进步。这些长进是与我在这四年里有幸认识的师长同学和朋友是分不开的。

首先我要感谢我的导师向涛老师。通过平时的激烈的讨论，组会上细致的讲解，我从您那里学到的不仅仅是知识，更让我受益的是您对做科研的态度和分析处理问题的方法，这些潜移默化的影响对我今后的学习和工作是一笔巨大的财富。

非常感谢现在和曾经在理论所工作的罗洪刚老师，覃绍京老师，刘承师老师和于禄老师，在你们组织的讨论会和平时的交谈中，从一点一滴具体的知识到做科研的经验和方法，我学到了很多。

我要感谢在我刚来到理论所时帮助关心过我的胡峰师兄，昌俊师兄，苏跃华师兄，文渝川师兄，赵继泽师兄和甘景玉师姐。和你们在一起的理论所最初日子一直是我的一段美好的回忆。感谢和我一起在学习和生活过很长一段时间的陆汉涛师兄，封晓勇师兄，杨丽平师姐，胡时杰师兄，司铁岩师兄，席斌师兄，李淑明同学，王智慧同学，马峰杰同学，许文虎师弟，陈巧妮师妹以及即将来到中科院学习的谢志远师弟，魏忠超师弟和秦明普师弟。和你们在一起的丰富多彩的学习生活给我很多的快乐。作为独生子，和师兄师姐师弟师妹们在一起让我体会到了大家庭的感觉。

感谢和我同一届的19位同学。你们的睿智，你们的幽默，你们的博学，你们的关爱让我感到非常充实，我很荣幸能和你们一起在理论所共同学习。

感谢我的室友全海涛师兄，周杰同学，刘静师兄和徐卫水师兄。你们以积极进取的精神，乐观的处世态度和宽大的胸怀成为我学习的榜样。

感谢我在中科院和理论所认识的很多同学和朋友，请原谅我在这里不能一一提及你们的名字，但是我会一直记得和你们在这里的一段交集。

感谢Jan von Delft教授邀请我去慕尼黑大学访问学习并给我以研究和生活中的诸多支持。感谢在慕尼黑期间帮助过我的朋友，特别是Andreas

Weichselbaum, Barbara Englert, Michael Möckel, Theresa Hecht, Hamed Saberi, Wolfgang Mündler, 免疫所的Reinhard Obst以及来自中国的王沛同学对我的非常热情好客的帮助。

感谢孙昌璞老师和他的学生。你们组会上的有趣课题和热烈争论让我受益良多。

最后要感谢我的家人特别是我的父母和小姨对我的支持和关爱。感谢在北京工作的两位表姨对我在京期间生活上的照顾。