

# Motivation

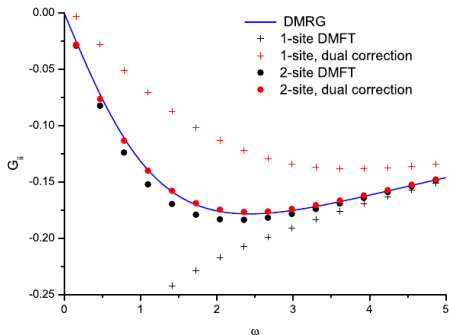


FIG. 4: (color online) Local Matsubara Green function on the Matsubara axis obtained from DMRG for  $T = 0$  in comparison with the results obtained from DMFT and from fully self-consistent dual fermion calculations. For the 2-site free cluster DMFT the renormalization of the vertex has a small effect since the CDMFT is already a good starting point. For the single site calculation the renormalization is essential since DMFT even gives a qualitatively wrong answer, while the dual fermion result correctly predicts the system to be an insulator.

Abbildung: Hafermann et al, Cluster Dual Fermion Approach to Nonlocal Correlations, cond-mat/0707.4022v1

# Density Matrix Renormalization Group

Lewin Boehnke

12. Juni 2008

## Motivation

### Renormierungsgruppe - Systematische Reduktion des Problems

- Numerische RG auf dem Gitter

- Einfaches Beispiel

- Zusammenbruch des einfachen Beispiels

## DMRG

- Aufbau einer DMRG-Kette

- Eine gefällige Basis

- Ablauf von DMRG

- Erwartungswerte

  - Lokale Erwartungswerte

  - Erwartungswerte von Korrelatoren

  - Dynamische Erwartungswerte

## Numerische RG

Idee der RG:

1. Gehe von einem Problem zu einem größeren (Hilbertraum vergrößern)
2. Löse das (größere) Problem
3. Vereinfache die Darstellung der Lösung des größeren Problems (Hilbertraum verkleinern)

## “Spielzeug” beispiel

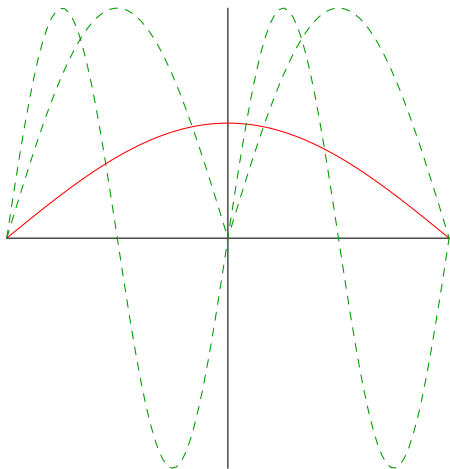
Einzelnes Teilchen auf einer Tight-Binding Kette:

$$H = - \sum_{l=1}^{L-1} (|l\rangle \langle l+1| + |l+1\rangle \langle l|) + 2 \sum_{l=1}^L |l\rangle \langle l|$$

Vorgehen im Rahmen der NRG:

1. Hamiltonoperator  $H_A$  für  $L$ -site Gitter aufstellen.  $H_A$  lebt in einem  $M$ -Dimensionalen Hilbertraum
2. Hamiltonoperator  $H_{AA}$  für ein aus 2 Blöcken zusammengesetztes System aufstellen.  $H_{AA}$  hat Hilbertraumdimension  $M^2$
3. Finden der  $M$  niedrigsten Energieeigenzustände von  $H_{AA}$  (Lanczos)
4. Projektion von  $H_{AA}$  auf diese  $M$  Zustände
5.  $\Rightarrow$  2

## Warum das *nicht* klappt

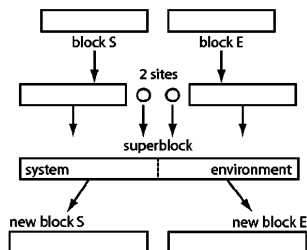


- ▶ Obiger Hamiltonoperator impliziert für endliches System feste Randbedingungen
- ▶ Maximum des Grundzustandes des  $AA$ -Blockes bei Knoten der  $A$ -Blöcke
- ▶ *Wenige* Energieeigenzustände der  $A$ -Blöcke reichen nicht aus

## Lösungsideen:

- ▶ Nicht so dämlich sein, feste Randbedingungen zu benutzen
- ▶ Wähle eine Basis, in der der Grundzustand gut dargestellt werden kann

## DMRG / Aufbau einer DMRG-Kette



- ▶ System der Länge  $l$  in  $M$ -dimensionalem Hilbertraum mit Zuständen  $\{|m_l\rangle\}$
- ▶  $H_l$  ist bekannt in dieser Basis  $\langle m_l | H_l | \tilde{m}_l \rangle$
- ▶ Füge eine weitere Site hinzu mit den Zuständen  $|\sigma\rangle$
- ▶  $\Rightarrow$  Produktzustände  $\{|m_l \sigma\rangle\} \equiv \{|m_l\rangle |\sigma\rangle\}$
- ▶ Das ganze wird eingebettet in eine *Umgebung*, die genauso erstellt wird



- ▶ Auswahl des Zustandes, der interessiert (Zielzustand).  
Üblicherweise der Grundzustand
- ▶ Wahl einer Basis, in der der Zielzustand möglichst gut dargestellt wird
- ▶ Entwicklung des Hamiltonoperators (und aller anderen interessierenden Operatoren) in diese Basis

## Eine gefällige Basis

- ▶ Zentraler Punkt der DMRG!!!!
- ▶ Zielzustand  $|\psi\rangle$  wird in Produktbasis des Superblocks  $\{|m_l^S \sigma^S\rangle\} \{|m_l^E \sigma^E\rangle\}$  bestimmt (Für den Grundzustand z.B. mit Lanczos)

$$\bullet |\psi\rangle = \sum_{m^S=1}^{M^S} \sum_{\sigma^S=1}^{N_{site}} \sum_{\sigma^E=1}^{N_{site}} \sum_{m^E=1}^{M^E} \psi_{m^S \sigma^S \sigma^E m^E} |m^S \sigma^S\rangle |m^E \sigma^E\rangle$$

- ▶ Der Superblock sei in Zustand  $|\psi\rangle$ . Das System wird dann beschrieben durch  $\rho = \text{Tr}_E |\psi\rangle \langle\psi|$

$$\rho = \text{Tr}_E |\psi\rangle \langle\psi|$$

- ▶  $\rho$  ist  $N \equiv M \times N_{\text{site}}$ -dimensional, hat also  $N$  Eigenvektoren zu  $N$  Eigenwerten  $\rho |w_\alpha\rangle = w_\alpha |w_\alpha\rangle$  mit  $\sum_\alpha w_\alpha = 1$
- ▶ Ist  $\{|w_\alpha\rangle\}$  die geeignete Basis?

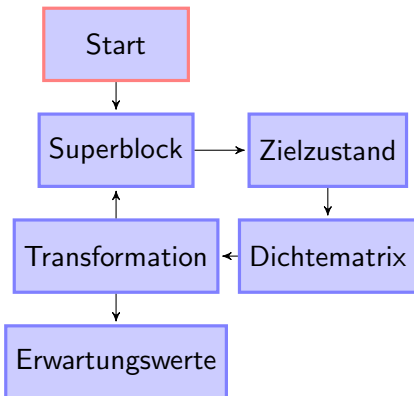
## Erwartungswert eines beschränkten Operators

- ▶ Beschränkter Operator  $\hat{A}$ ,  $\|\hat{A}\| = \max_{\phi} \left| \frac{\langle \phi | \hat{A} | \phi \rangle}{\langle \phi | \phi \rangle} \right| \equiv C$
- ▶  $\langle \hat{A} \rangle = \frac{\langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} = \text{Tr}_S \rho \hat{A}$
- ▶  $\langle \hat{A} \rangle = \sum_{\alpha=1}^{N^S} \langle w_{\alpha} | \rho \hat{A} | w_{\alpha} \rangle = \sum_{\alpha=1}^{N^S} w_{\alpha} \langle w_{\alpha} | \hat{A} | w_{\alpha} \rangle$
- ▶ Beschränken auf die  $M$  Eigenvektoren zu den höchsten Eigenwerten:
- ▶  $\Rightarrow \left| \langle \hat{A} \rangle_{approx} - \langle \hat{A} \rangle \right| \leq \left( \sum_{\alpha > M^S}^{N^S} w_{\alpha} \right) C = \epsilon_{\rho} C$
- ▶ mit dem abgeschnittenen Gewicht  $\epsilon_{\rho} = 1 - \sum_{\alpha=1}^{M^S} w_{\alpha}$

### Bemerkungen:

- ▶ Für den Erwartungswert eines *bestimmten* Operators kann man sicherlich eine bessere Basis finden
- ▶ Der Fehler in den Erwartungswerten ist *beschränkt*.  $\Rightarrow$  Ein Fehlermaß ist gegeben durch  $\epsilon_\rho$
- ▶ Offensichtlich wird  $\epsilon_\rho$  kleiner je größer  $M$  ist

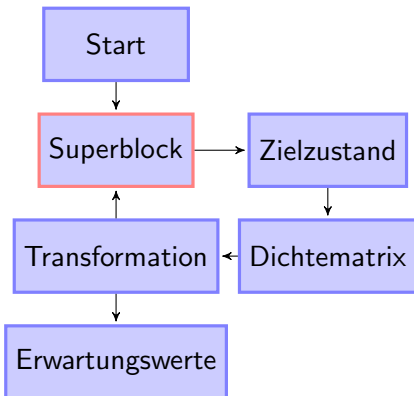
# Ablaufplan



Start:

- ▶ Wähle ein System mit nur wenigen Plätzen
- ▶ Bestimme Darstellung von  $H$  in dieser Basis

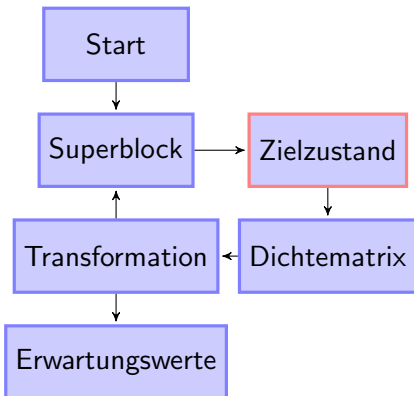
# Ablaufplan



## Superblock:

- ▶ Füge zu System und Umgebung je eine Site hinzu
- ▶ Setze daraus den Superblock zusammen
- ▶  $H_{2l+2}$  könnte in dieser Basis bestimmt werden

# Ablaufplan

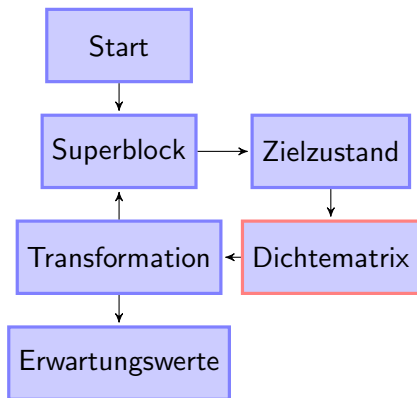


Zielzustand:

- ▶ Zielzustand ist der Grundzustand und evtl. weitere Zustände
- ▶ Bestimme den Grundzustand  $|\psi\rangle$  von  $H_{2l+2}$  mit Lanczos



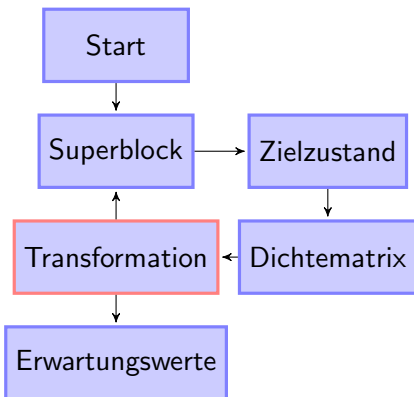
# Ablaufplan



## Dichtematrix:

- ▶ Trace über die Umgebungszustände  
 $|\rho\rangle = \text{Tr}_E |\psi\rangle \langle\psi|$
- ▶ Finden der Eigenzustände und Eigenwerte der Dichtematrix
- ▶ Behalten der  $M$  Eigenzustände zu den höchsten Eigenwerten
- ▶ Erstelle die  $N \times M$  Transformationsmatrix  $T$  mit den Einträgen  $\langle m_I \sigma | m_{I+1} \rangle$
- ▶ Das gleiche für den Umgebungsblock

# Ablaufplan

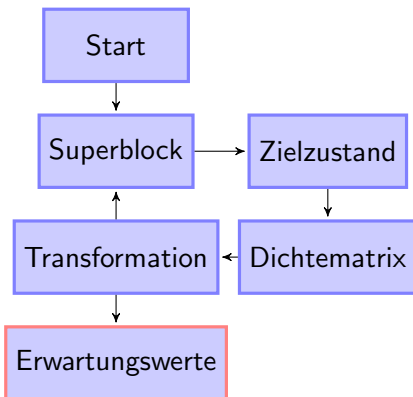


Transformation:

- ▶ Bestimme Darstellung von  $H$  in der reduzierten Basis:  

$$H_{l+1}^{tr} = T^\dagger H_{l+1} T$$
- ▶ Wenn die gewünschte Länge erreicht ist,  $\rightarrow$  Erwartungswerte, sonst  $\rightarrow$  Superblock mit  $l+1 \rightarrow l$ ,  $H_{l+1}^{tr} \rightarrow H_l$ ,  $\{|m_l\rangle\} \rightarrow \{|m_{l+1}\rangle\}$

# Ablaufplan



Erwartungswerte:

- ▶ Die Grundzustandsenergie wird in jedem Schritt bestimmt
- ▶ Für weitere Grundzustandserwartungswerte von lokalen Observablen:
- ▶ reicht der Platz nicht

# Ablaufplan

Erwartungswerte:  $O_i$  lokaler Erwartungswert,  $i \in S$

- ▶  $\langle \psi | O_i | \psi \rangle =$   
 $\sum_{m^S \tilde{m}^S \sigma^S \sigma^E m^E} \langle \psi | m^S \sigma^S \sigma^E m^E \rangle \langle m^S | O_i | \tilde{m}^S \rangle \langle \tilde{m}^S \sigma^S \sigma^E m^E | \psi \rangle$
- ▶  $\langle m^S | O_i | \tilde{m}^S \rangle$  ist nicht bekannt
- ▶ Mit aufbauen

## Lokale Erwartungswerte in der DMRG-Basis

Betrachte einen Operator  $O_i$ , der auf dem Platz  $i$  wirkt, z.B.  $\hat{n}_i$

- ▶ Wenn Platz  $i$  hinzugefügt wird:

- ▶ Bestimme  $\langle \sigma | O_i | \tilde{\sigma} \rangle$

- ▶  $\langle m_{l+1} | O_i | \tilde{m}_{l+1} \rangle = \sum_{m_l \tilde{\sigma}} \langle m_{l+1} | m_l \sigma \rangle \langle \sigma | O_i | \tilde{\sigma} \rangle \langle m_l \tilde{\sigma} | \tilde{m}_{l+1} \rangle$

- ▶  $\langle m_{l+1} | m_l \sigma \rangle$  sind gerade die Transformationsmatrix  $T$

- ▶ In jedem weiteren Schritt:

- ▶  $\langle m_{l+1} | O | \tilde{m}_{l+1} \rangle = \sum_{m_l \tilde{m}_l} \langle m_{l+1} | m_l \sigma \rangle \langle m^S | O_i | \tilde{m}^S \rangle \langle \tilde{m}_l | \tilde{m}_{l+1} \rangle$

- ▶ Zum Auswerten des Erwartungswertes

- ▶  $\langle \psi | O_i | \psi \rangle = \sum_{m^S \tilde{m}^S \sigma^S \sigma^E m^E} \langle \psi | m^S \sigma^S \sigma^E m^E \rangle \langle m^S | O_i | \tilde{m}^S \rangle \langle \tilde{m}^S \sigma^S \sigma^E m^E | \psi \rangle$

## Erwartungswerte von Korrelatoren

Betrachte einen Operator  $O_i O_j$ , der auf den Plätzen  $i$  und  $j$  wirkt, z.B. die Dichte-Dichte Korrelation  $\hat{n}_i \hat{n}_j$

- ▶ Naive Idee: Genau wie im vorherigen Fall mit
- ▶  $\langle m | O_i O_j | \tilde{m} \rangle = \sum_{m'} \langle m | O_i | m' \rangle \langle m' | O_j | \tilde{m} \rangle$
- ▶ FUNKTIONIERT NICHT!
- ▶ Die eingeschobene  $\mathbb{1}$  ist eine gute Näherung nur für die Projektion von Target-Zuständen

Statt dessen (oBdA  $j > i$ ):

- ▶ Wenn Site  $j$  hinzugefügt wird: Wie oben
- ▶ Wenn Site  $i$  hinzugefügt wird:

- ▶  $\langle m_{l+1} | O_i O_j | \tilde{m}_{l+1} \rangle =$   
$$\sum_{m_l \tilde{m}_l \sigma \tilde{\sigma}} \langle m_{l+1} | m_l \sigma \rangle \langle m_l | O_j | \tilde{m}_l \rangle \langle \sigma | O_i | \tilde{\sigma} \rangle \langle \tilde{m}_l \tilde{\sigma} | \tilde{m}_{l+1} \rangle$$

- ▶ Update und Auswertung wie gehabt

# Motivation

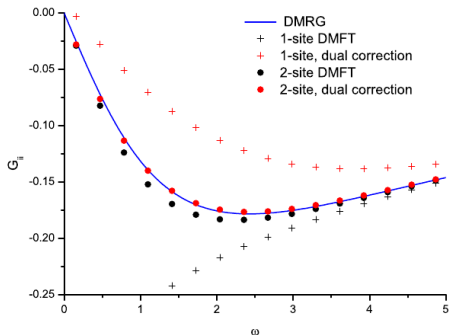


FIG. 4: (color online) Local Matsubara Green function on the Matsubara axis obtained from DMRG for  $T = 0$  in comparison with the results obtained from DMFT and from fully self-consistent dual fermion calculations. For the 2-site free cluster DMFT the renormalization of the vertex has a small effect since the CDMFT is already a good starting point. For the single site calculation the renormalization is essential since DMFT even gives a qualitatively wrong answer, while the dual fermion result correctly predicts the system to be an insulator.

Abbildung: Hafermann et al, Cluster Dual Fermion Approach to Nonlocal Correlations, cond-mat/0707.4022v1



## Dynamische Erwartungswerte

Grundzustandsgreensfunktion:  $G_A(\omega) = \langle 0 | A^\dagger \frac{1}{E_0 + \omega - H} A | 0 \rangle$

Abkürzung:  $z = E_0 + \omega$

- ▶  $|\phi_0\rangle = \frac{A|0\rangle}{\sqrt{\langle 0|A^\dagger A|0\rangle}}$
- ▶  $(z - H)(z - H)^{-1} = \mathbb{1}$
- ▶  $\sum_n \langle \phi_m | z - H | \phi_n \rangle \langle \phi_n | (z - H)^{-1} | \phi_p \rangle = \delta_{mp}$
- ▶ Betrachte  $p = 0$  und benenne  $x_n = \langle \phi_n | (z - H)^{-1} | \phi_0 \rangle$
- ▶  $\sum_n \langle \phi_m | z - H | \phi_n \rangle x_n = \delta_{m0}$
- ▶ Interessiert sind wir an  $x_0 = \langle \phi_0 | (z - H)^{-1} | \phi_0 \rangle$

Wie ist das lösbar?

$$\blacktriangleright \sum_n \underbrace{\langle \phi_m | z - H | \phi_n \rangle}_{\equiv B} x_n = \delta_{n0}$$

$$\blacktriangleright \Rightarrow Bx = \delta_{n0} \equiv c$$

$\blacktriangleright B$  ist tridiagonal in der Lanczos-Basis:

$$\blacktriangleright \begin{pmatrix} a_0 & b_1 & & & \\ b_1 & a_1 & b_2 & & \\ & b_2 & a_2 & \ddots & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & & \ddots \end{pmatrix}$$

$$\blacktriangleright \text{Cramers Regel: } x_i = \frac{\det(B^{(i)})}{\det(B)}$$

$\blacktriangleright$  mit  $B^{(i)}$  der Matrix, bei der die  $i$ -te Spalte durch  $c$  ersetzt ist

$\blacktriangleright$  Hier:  $B^{(0)} = B_0$

$$x_0 = \frac{\det(B_0)}{\det(B)} \text{ Bekannt aus Lanczos-Vortrag}$$

$$\Rightarrow G_A(\omega) = \frac{\langle 0|A^\dagger A|0\rangle}{z - a_0 - \frac{b_1^2}{z - a_1 - \frac{b_2^2}{z - \dots}}}$$

Bemerkungen:

- ▶ Die Lanczos-Zustände lassen sich nicht gut darstellen
  - ▶ → verlieren schnell an orthogonalität
  - ▶ Lanczos-Zustände müssen den Zielzuständen hinzugefügt werden
  - ▶ Üblicherweise reichen wenige  $\simeq 3$  Lanczos-Zustände als Zielzustände um viele  $\simeq 100$  Lanczos-Zustände noch ausreichend orthogonal zu halten ( $\langle \phi_m | \phi_0 \rangle \leq 1\%$ )

Vielen Dank