

# O Método de Lanczos e a sua Comparação com a Teoria de Perturbações em Mecânica Quântica

Domingos Alves

Orientador: Prof. Dr. Guillermo Gerardo Cabrera Oyarzún

Este exemplar corresponde à redação final  
da Tese defendida pelo aluno  
Domingos ALVES  
e aprovado pela Comissão Julgadora

Cidade Universitária "Zeferino Vaz";  
20 de dezembro de 1993

Guillermo Cabrera

Dissertação apresentada ao Instituto de Física "Gleb Wataghin" da Universidade Estadual de Campinas como parte dos requisitos à obtenção do título de Mestre em Física

- Outubro de 1993

*À Magali e à praia do Sono.*

## Agradecimentos

Ao Prof. Guillermo Gerardo Cabrera pelo apoio, confiança, paciência e eficiência na orientação deste trabalho.

Ao Prof. Bernardo Laks, pelas críticas perspicazes e fundamentais.

Aos Profs. Djalma Medeiros, J.A.Roversi e Edmundo Capelas, pelo apoio e revisão deste manuscrito.

Ao sempre amigo Gian, que com seu jeito mostra, invariavelmente, que o simples é inesgotável e belo.

Aos meus pais Domingos e Néria, que mesmo sem entenderem muito bem, sempre apoiaram meu trabalho.

À minha filha Bárbara, pelos seus dois anos.

Ao CNPQ pelo apoio financeiro.

## Resumo

Faz-se uma revisão completa das propriedades e usos do bem conhecido método de Lanczos, dando-se uma visão mais física do processo. Compara-se o método com a teoria de perturbações em mecânica quântica. Para isso a função de prova que inicializa o processo de Lanczos é escolhida como sendo uma autofunção do Hamiltoniano não perturbado, com a idéia de compará-lo com a teoria de perturbações ordinária "a la Rayleigh-Schrödinger". Esta escolha reduz a eficiência potencial do método, porém este converge mais rapidamente que a série de perturbações e funciona inclusive em situações onde esta série diverge.

## Abstract

It is made a complete revision of the properties and uses of well behaved Lanczos method, ascribing to the process a more physical meaning. The method is compared with Quantum Mechanical perturbation theory. Therefore the trial function that initializes the process is chosen as an eigenfunction of the unperturbed hamiltonian, in order to compare it with the ordinary perturbation theory of Rayleigh-Schrödinger. This choice reduces the potential efficiency of the method, however, its convergence occurs faster than the perturbation series and it works indeed in situations where the series diverges.

# Conteúdo

<b>Agradecimentos</b>	<b>ii</b>
<b>Resumo</b>	<b>iii</b>
<b>Abstract</b>	<b>iv</b>
<b>Conteúdo</b>	<b>vi</b>
<b>1 O Método de Lanczos</b>	<b>2</b>
1.1 Descrição do Método . . . . .	4
1.2 Convergência, Rapidez e Estocagem . . . . .	11
1.3 O modelo da cadeia . . . . .	15
1.4 O método de Lanczos e o método dos momentos . . . . .	21
1.5 Simetrias . . . . .	28
<b>2 O método de Lanczos como método perturbativo</b>	<b>32</b>
2.1 Revisitando a teoria de perturbações em Mecânica Quântica . . . . .	34
2.2 O modelo da cadeia perturbado . . . . .	42
2.3 O método de Lanczos e a teoria de perturbações . . . . .	47

2.4 Um exemplo: o oscilador harmônico perturbado . . . . .	51
<b>3 Conclusões</b>	<b>63</b>
<b>Apêndice A: Como Implementar Lanczos no Computador</b>	<b>65</b>
<b>Bibliografia</b>	<b>75</b>

Adeus, fantasia minha!  
(Uma palavra eu teria a dizer,  
mas não é este o momento:  
de todas as palavras e expressões  
de um homem, a melhor  
é a que se dá no lugar adequado  
– e, dado o seu significado,  
eu continuo a guardar a minha  
até o fim.)

Walt Whitman.

# Capítulo 1

## O Método de Lanczos

Em 1950 C. Lanczos [1] propôs um método iterativo, através do qual reduzimos matrizes simétricas reais à forma tridiagonal. Em seu trabalho, Lanczos aplica este método a operadores diferenciais e integrais, mostrando uma grande eficiência para calcular alguns autovalores e autovetores do espectro através da diagonalização de pequenas matrizes que são obtidas a cada passo do método.

Este fato fez com que tradicionalmente o método fosse visto como um dispositivo para diagonalizar matrizes de grande porte (o que até certo ponto é acidental; como veremos), apresentando grande confiabilidade e estabilidade no cálculo numérico.

De uma maneira resumida o método funciona a partir de uma matriz simétrica real  $\mathbf{H}$  de ordem  $(n \times n)$  e um vetor inicial  $|v_1\rangle$ .

$$\mathbf{H} |v_1\rangle = \alpha_1 |v_1\rangle + \beta_1 |v_2\rangle \quad (1.1)$$

$$\mathbf{H} |v_2\rangle = \beta_1 |v_1\rangle + \alpha_2 |v_2\rangle + \beta_2 |v_3\rangle \quad (1.2)$$

$$\mathbf{H} |v_3\rangle = \beta_2 |v_2\rangle + \alpha_3 |v_3\rangle + \beta_3 |v_4\rangle \quad (1.3)$$

$$\vdots$$

$$\mathbf{H} |v_n\rangle = \beta_{n-1} |v_{n-1}\rangle + \alpha_n |v_n\rangle + \beta_n |v_{n+1}\rangle \quad (1.4)$$

Cada vetor  $|v_{n+1}\rangle$  é obtido ortogonalizando-se  $\mathbf{H} |v_n\rangle$  com respeito a  $|v_n\rangle$  e  $|v_{n-1}\rangle$ . Na base dos  $|v_n\rangle$ 's, então vemos que

$$\mathbf{H} \rightarrow \begin{bmatrix} \alpha_1 & \beta_1 & 0 & 0 & \cdots \\ \beta_1 & \alpha_2 & \beta_2 & 0 & \cdots \\ 0 & \beta_2 & \alpha_3 & \beta_3 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix}, \quad (1.5)$$

já é escrita diretamente numa forma tridiagonal. Este outro fato levou muitos pesquisadores, durante muito tempo, a condenar o método, pois do ponto de vista numérico este mecanismo era superado por outros dois métodos matematicamente equivalentes, de Givens e Householder [2].

Só recentemente, estudiosos de vários campos da física (e de outras áreas) redescobriram o método e mostraram ser ele de grande utilidade, com resultados que têm surpreendido a todos.

Apesar de nem sempre a equivalência matemática ser a mesma, este método tem sido aplicado em física nuclear [3], física estatística [4], em física do estado sólido [5] como meio de calcular densidade de estados; além de sua extensão de aplicabilidade à química.

Nas próximas seções revisitaremos o método de Lanczos, de uma maneira um tanto quanto diferente de como ele vem sendo apresentado na literatura, procurando

de uma forma simplificada e geral ilustrar uma série de ligações interessantes e muito importantes em matemática e principalmente em física. A intenção desta parte do trabalho é de servir como uma espécie de manual de uso e extensões do método para as várias áreas onde ele pode (ou poderá) ser utilizado.

Deixamos de lado, até certo ponto, a análise numérica do método, considerando que isto já está feito de uma forma completa na literatura [6], e por fugir dos objetivos deste trabalho. Começamos pela descrição matemática do modelo, seus atrativos computacionais; bem como sua ligação com o método dos momentos e portanto à teoria dos polinômios ortogonais e frações contínuas. Do ponto de vista de soluções recursivas da equação de Schrödinger, veremos as várias faces do método; desde variacional até perturbativa.

Vale a pena frisar, por fim, que este capítulo, apesar de ser uma revisão do método de Lanczos, contém não só uma análise matemática completa do método, bem como uma aproximação maior com a sua significação física, sempre de uma maneira simples e concisa o que, como já foi dito, não pode ser encontrado na literatura existente.

## 1.1 Descrição do Método

Para construirmos um algoritmo para o processo de Lanczos, primeiramente trabalharemos com matrizes hermiteanas ao invés de matrizes simétricas, especificamente consideradas por Lanczos em seu trabalho original. Futuramente estenderemos os resultados aqui obtidos à matrizes não-hermiteanas com autovalores reais e

complexos. Além dessa pequena diferença em relação ao trabalho de Lanczos, nós o adaptamos ao simbolismo da Mecânica Quântica para indicar vetores e multiplicação de matrizes por vetores.

Portanto, seguindo Lanczos, consideramos uma matriz hermiteana  $\mathbf{H}$  e operamos com ela sobre um vetor inicial  $|v_1\rangle$ . O que nós queremos estabelecer é uma combinação linear do vetor iterado  $\mathbf{H}|v_1\rangle$  com  $|v_1\rangle$ . Nós não podemos esperar, entretanto, que esta combinação linear esteja inicialmente correta, porém podemos aproximar tal combinação de maneira a fazer com que o módulo do novo vetor seja tão pequeno quanto possível. Logo, nós queremos escolher como novo vetor  $|v_2\rangle$  a combinação:

$$|v_2\rangle = \mathbf{H}|v_1\rangle - \alpha_1 |v_1\rangle \quad (1.6)$$

onde, tomamos inicialmente  $\alpha_1$  como um número complexo (por causa da generalidade de  $|v_1\rangle$ ).

Explorando a hermiticidade de  $\mathbf{H}$ , nós calculamos:

$$\langle v_2|v_2\rangle = \langle v_1|\mathbf{H}^2|v_1\rangle - 2\alpha_1 \langle v_1|\mathbf{H}|v_1\rangle + \alpha_1^2 \langle v_1|v_1\rangle. \quad (1.7)$$

A minimização de  $\langle v_2|v_2\rangle$  com respeito ao parâmetro variacional  $\alpha_1$  nos leva a manipular a eq.1.7 fazendo-se

$$0 = \frac{\partial \langle v_2|v_2\rangle}{\partial \alpha_1} = -2 \langle v_1|\mathbf{H}|v_1\rangle + 2\alpha_1 \langle v_1|v_1\rangle \quad (1.8)$$

e portanto,

$$\alpha_1 = \frac{\langle v_1|\mathbf{H}|v_1\rangle}{\langle v_1|v_1\rangle}, \quad (1.9)$$

que é real ( $\mathbf{H}$  é hermiteana) independentemente do campo em que  $|v_1\rangle$  é inicialmente definido.

Além disso, é fácil ver que o novo vetor  $|v_2\rangle$  definido na eq. 1.6 é ortogonal ao vetor original  $|v_1\rangle$ , por causa da eq. 1.9.

Nós agora continuamos o nosso processo. De  $|v_2\rangle$  vamos obter uma combinação linear do vetor iterado  $\mathbf{H}|v_2\rangle$  com  $|v_2\rangle$  e  $|v_1\rangle$ ,

$$|v_3\rangle = \mathbf{H}|v_2\rangle - \alpha_2|v_2\rangle - \beta_1|v_1\rangle, \quad (1.10)$$

com a condição de que a amplitude do novo vetor torne-se tão pequena quanto possível. Agora  $\alpha_2$  e  $\beta_1$  são os novos parâmetros variacionais. Desde que  $\mathbf{H}$  é hermiteana, nós podemos provar que  $\alpha_2$  e  $\beta_1$  são números reais, como verificado anteriormente para  $\alpha_1$ .

A amplitude do vetor  $|v_3\rangle$  é

$$\langle v_3|v_3\rangle = \langle v_2|\mathbf{H}^2|v_2\rangle - 2\alpha_2\langle v_2|\mathbf{H}|v_2\rangle - 2\beta_1\langle v_2|\mathbf{H}|v_1\rangle + \alpha_2^2\langle v_2|v_2\rangle + \beta_1^2\langle v_1|v_1\rangle. \quad (1.11)$$

Da condição de mínimo, estabelecemos que

$$\frac{\partial \langle v_3|v_3\rangle}{\partial \alpha_2} = 0 \quad \text{e} \quad \frac{\partial \langle v_3|v_3\rangle}{\partial \beta_1} = 0,$$

obtendo-se respectivamente,

$$\alpha_2 = \frac{\langle v_2|\mathbf{H}|v_2\rangle}{\langle v_2|v_2\rangle} \quad (1.12)$$

$$\beta_1 = \frac{\langle v_1|\mathbf{H}|v_2\rangle}{\langle v_1|v_1\rangle} = \frac{\langle v_2|v_2\rangle}{\langle v_1|v_1\rangle}. \quad (1.13)$$

O processo pode ser continuado e nós devemos pensar, por analogia, que para o próximo passo a melhor combinação é do tipo

$$|v_4\rangle = \mathbf{H}|v_3\rangle - \alpha_3|v_3\rangle - \beta_2|v_2\rangle - \gamma|v_1\rangle. \quad (1.14)$$

Mas nós podemos mostrar que, na eq.1.14,  $\gamma = 0$ ; realmente, da condição de mínimo para o comprimento de  $|v_4\rangle$ , fazemos

$$0 = \frac{\partial \langle v_4|v_4\rangle}{\partial \gamma} = -\langle v_1|\mathbf{H}|v_3\rangle - \langle v_3|v_1\rangle + 2\gamma\langle v_1|v_1\rangle \quad (1.15)$$

ou,

$$\gamma = \frac{\langle v_1|\mathbf{H}|v_3\rangle + \langle v_3|v_1\rangle}{2\langle v_1|v_1\rangle}, \quad (1.16)$$

o que do fato de  $|v_3\rangle$  ser ortogonal aos vetores prévios, nós facilmente mostramos na eq.1.16 que  $\gamma$  vai a zero. Do discutido fica claro ainda, que a construção da base para Lanczos é mais sutil comparada à ortogonalização de Schimdt, a qual usa todos os vetores em cada estágio.

Portanto, como já havia sido notado por Lanczos, “a característica mais marcante deste processo de minimizações sucessivas é que a melhor combinação linear nunca inclui mais que três termos...” [1]. Ou seja, todo novo passo do processo de minimização requer somente dois termos de correção.

Nós podemos sumarizar o método de Lanczos escrevendo a hierarquia da melhor combinação linear, começando de  $|v_1\rangle$ .

$$|v_{n+1}\rangle = \mathbf{H}|v_n\rangle - \alpha_n|v_n\rangle - \beta_{n-1}|v_{n-1}\rangle, \quad (1.17)$$

para  $n \geq 1$ ;  $|v_0\rangle = 0$  e,

$$\alpha_n = \frac{\langle v_n | \mathbf{H} | v_n \rangle}{\langle v_n | v_n \rangle}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (1.18)$$

$$\beta_n = \frac{\langle v_n | \mathbf{H} | v_{n+1} \rangle}{\langle v_n | v_n \rangle} = \frac{\langle v_{n+1} | v_{n+1} \rangle}{\langle v_n | v_n \rangle} n = 1, 2, 3, \dots \quad (1.19)$$

Se o conjunto de vetores ortogonais  $\{|v_1\rangle, |v_2\rangle, \dots\}$  é então normalizado e usado como uma base para a matriz  $\mathbf{H}$ , nós obtemos sua forma tridiagonal (eq.1.5) com elementos diagonais  $\{\alpha_1, \alpha_2, \dots\}$  e os elementos fora da diagonal  $\{\beta_1, \beta_2, \dots\}$ .

O processo terminará automaticamente quando o conjunto de vetores  $\{|v_1\rangle, \dots\}$  expandirem o espaço inteiro de  $\mathbf{H}$  (se ela for finita). Isto ocorrerá quando o novo vetor tiver comprimento zero. O término do processo de Lanczos, significa que o menor subespaço invariante contendo o vetor inicial é dimensionalmente finito e expandido pelos vetores obtidos no processo. Vale frisar ainda, que cada um destes vetores tem a dimensão da matriz  $\mathbf{H}$ . Deve ser notado aqui também que se  $|v_1\rangle$  é ortogonal a qualquer autovetor de  $\mathbf{H}$ , então a série de operações descritas nas equações 1.17 a 1.19 termina depois de  $m$  passos, isto é, para algum  $m < n$ ,  $\beta_n = 0$ . Um caso importante para o qual isto pode acontecer é quando  $\mathbf{H}$  tem algum autovalor degenerado. Neste evento um novo vetor pode ser escolhido ortogonal aos  $|v_i\rangle$ 's já obtidos, e as operações indicadas pelas equações 1.17 a 1.19 são continuadas e/ou repetidas (cf. seção 1.5).

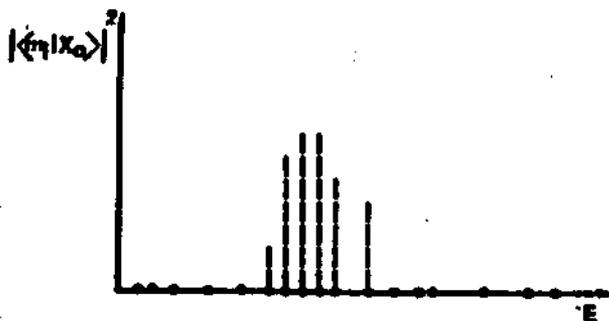
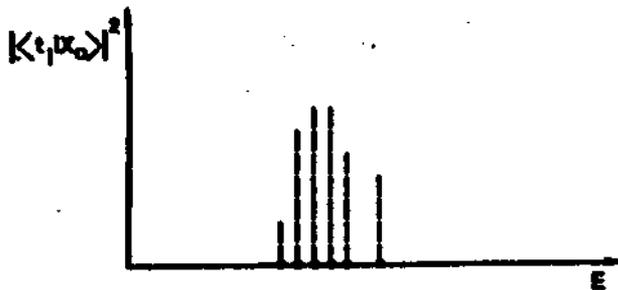
(a) diagonalização de  $M$ (b) diagonalização de  $T$ 

Figura 1: Os autovetores de  $M$  (aqui suposta hermiteana) são indicados por  $|m_i\rangle$ , e os autovalores são reportados no eixo real  $E$ . Os autovetores da matriz tridiagonal gerados por  $|x_0\rangle$  são denotados por  $|t_i\rangle$ ; os autovalores selecionados pelo estado teste são também indicados por conveniência.

A característica mais atraente do método de Lanczos é não precisarmos completar o processo para termos precisão nas estimativas de alguns dos autovalores extremos de  $\mathbf{H}$ , ou seja, podemos “truncar” a cada passo o processo e então diagonalizar as pequenas matrizes tridiagonais obtidas; os autovalores destas serão excelentes aproximações de alguns autovalores de  $\mathbf{H}$ , mesmo para poucos passos do processo (cf. apêndice I e seção 1.2).

Na figura 1 da página anterior fazemos um quadro esquemático para o método de Lanczos, onde partimos de um vetor de teste inicial  $|x_0\rangle$  e uma matriz  $\mathbf{M}$  grande. Depois da tridiagonalização de  $\mathbf{M}$  obtemos pequenas matrizes tridiagonais  $\mathbf{T}$ .

Uma outra característica do método, um tanto óbvia a esta altura, é que  $\mathbf{H}$  não necessita ser uma matriz, ela pode ser um operador abstrato (o hamiltoniano) e os  $|v\rangle$ 's podem ser combinações lineares de vetores abstratos (os estados nos quais o hamiltoniano atua). Para formar  $\mathbf{H}|v_i\rangle$  nós usamos as regras para operar com  $|v_i\rangle$  ao invés da multiplicação ordinária de matrizes (cf. seção 1.3 e 1.4).

Em geral os autovalores que aparecem e convergem melhor, são aqueles com o maior “overlap” com o estado inicial. Se por exemplo, sabe-se que um vetor  $|v_1\rangle$  envolve os mais baixos autovalores de  $\mathbf{H}$ , nós podemos escolhê-lo como vetor inicial e determinar com certa confiança o mais baixo autovalor de  $\mathbf{H}$ .

Para finalizar esta seção, mostramos o procedimento a ser seguido em Lanczos para quando  $\mathbf{H}$  é não hermiteana. A diferença essencial é que nós devemos agora operar com  $\mathbf{H}$  e  $\mathbf{H}^\dagger$ . Nós temos então que considerar o conjunto de vetores biortog-

nais,

$$\{|v_1\rangle, |v_2\rangle, \dots\} \text{ e } \{|\tilde{v}_1\rangle, |\tilde{v}_2\rangle, \dots\}, \quad (1.20)$$

cuja definição é a generalização de 1.17, ou seja,

$$\begin{aligned} |v_1\rangle &= |\tilde{v}_1\rangle \\ |v_2\rangle &= \mathbf{H}|v_1\rangle - \alpha_1|v_1\rangle \\ |\tilde{v}_2\rangle &= \mathbf{H}^\dagger|\tilde{v}_1\rangle - \alpha_1^*|\tilde{v}_1\rangle \\ |v_{n+1}\rangle &= \mathbf{H}|v_n\rangle - \alpha_n|v_n\rangle - \beta_{n-1}|v_{n-1}\rangle \\ |v_{n+1}^\sim\rangle &= \mathbf{H}^\dagger|\tilde{v}_n\rangle - \alpha_n^*|v_n\rangle - \beta_{n-1}^*|v_{n-1}^\sim\rangle, \end{aligned} \quad (1.21)$$

com a prescrição de que ao se fazer produtos escalares entre vetores opostos, não consideramos a amplitude  $\langle \tilde{v}_n | v_n \rangle$  e procuramos por extremos ( no apêndice I fazemos a transformação numérica do método para matrizes reais e simétricas, mas a partir do discutido anteriormente fica fácil a extensão do método.).

Outros refinamentos de técnica original de Lanczos vêm sendo amplamente usados em vários ramos da física, tais como cálculos em modelos de camadas na física nuclear [8], determinação da densidade de estados em matéria condensada [5], solução de modelos em teoria de campos [11], além de outras aplicações importantes em diversas áreas da computação científica [12].

## 1.2 Convergência, Rapidez e Estocagem

Nesta seção discutimos algumas características importantes do Método de Lanczos do ponto de vista computacional.

Como já foi discutido na seção anterior, a característica mais interessante do método é a de conseguirmos boa precisão nas estimativas de alguns autovalores do espectro de  $\mathbf{H}$ . Para entendermos um pouco melhor esta propriedade do método (além de podermos otimizá-la em alguns problemas), vamos definir a truncagem da base de  $N$  vetores da matriz tridiagonal  $N \times N$  (eq.1.5), que representa  $\mathbf{H}$  na base finita  $\{|v_1\rangle, |v_2\rangle, \dots, |v_n\rangle\}$ . Para isto tomamos esta base dos  $n$  vetores obtidos por meio de Lanczos. A matriz  $\mathbf{H}$  em nossa base truncada é obviamente representada por  $\mathbf{H}^{(n)}$ , a matriz  $n \times n$  no canto superior de  $\mathbf{H}$ .

O determinante  $\det |\lambda \mathbf{I} - \mathbf{H}^{(n)}|$ , o qual produz o polinômio característico pertencente a  $\mathbf{H}^{(n)}$ , possui propriedades [4] que nos garantem que os autovalores de  $\mathbf{H}$  em nosso espaço truncado têm propriedades variacionais. Isto é, nós podemos cortar arbitrariamente a sequência de operações definidas pelas eqs.1.17 e 1.18, depois de obter  $n$  vetores  $|v_i\rangle$ , gerando  $\mathbf{H}^{(n)}$ . Além disso, ficamos seguros de que os autovalores de  $\mathbf{H}^{(n)}$ , tomados em ordem ascendente, são maiores que o correspondente autovalor exato de  $\mathbf{H}$  no espaço completo. Ou seja, se denotarmos os autovalores de  $\mathbf{H}^{(m)}$ , em ordem ascendente, por  $\eta_1^{(m)}, \eta_2^{(m)}, \dots, \eta_m^{(m)}$ ,

$$\eta_i^{(m)} > \eta_i^{(m+1)} > \dots > \lambda_i, \quad (1.22)$$

com  $\lambda_i$  sendo o  $i$ -ésimo autovalor de  $\mathbf{H}$  tomado em ordem ascendente. A possibilidade, portanto, definitivamente existe de que muitos dos menores autovalores  $\eta_i$  convergirão com grande precisão muito antes de que o espaço de Hilbert seja completamente percorrido.

Como um exemplo simples deste fenômeno, consideremos um Hamiltoniano

$\mathbf{H}$  com o menor autovalor sendo  $\lambda_0$ , distinto dos outros. Escolhendo um vetor inicial  $|v_1\rangle$ , o qual não é deficiente do estado fundamental deste Hamiltoniano, nós podemos expandir  $|v_1\rangle$  em termos dos autovalores exatos  $|\psi_i^{Ex}\rangle$ , e então operarmos sobre  $|v_1\rangle$  com potências de  $\mathbf{H}$  obtendo-se

$$\mathbf{H}^r |v_1\rangle = a_0 \lambda_0^r |\psi_0^{Ex}\rangle + \sum_{i=1}^N a_i \lambda_i^r |\psi_i^{Ex}\rangle. \quad (1.23)$$

Eventualmente o termo  $a_0 \lambda_0^r |\psi_0^{Ex}\rangle$  irá sobrepujar todos os outros; o valor de  $r$  para o qual o lado direito normalizado da eq.1.23 é considerado uma boa aproximação dependerá apenas fracamente do tamanho do espaço de Hilbert e dependerá principalmente da separação de  $\lambda_0$  dos outros autovalores. Este valor de  $r$  deve, de fato, estar simplesmente relacionado à dimensão do espaço truncado necessário para descrever o estado fundamental de  $\mathbf{H}$ .

De uma maneira geral, podemos observar que autovalores bem isolados perto dos extremos do espectro podem ser “encontrados” depois de um pequeno número de passos (20 ou 30 iterações) independentemente da ordem da matriz  $\mathbf{H}$ . Uma convergência rápida também ocorre para autovalores bem separados do centro do espectro ou que estejam bem representados no vetor inicial  $|v_1\rangle$  (cf. seção 1.4); no entanto, se o autovalor desejado estiver nos extremos do espectro, porém pouco separado do resto do espectro, sua convergência será lenta. Aproximações acuradas aos correspondentes autovetores também podem ser calculadas. Neste caso é necessário reter na memória os vetores  $\{|v_1\rangle, |v_2\rangle, \dots, |v_n\rangle\}$  obtidos no processo. A convergência pode ser monitorada numericamente diagonalizando a matriz tridiagonal depois de cada passo e observando a variação dos autovalores e autovetores

Da seção precedente observamos (no mínimo teoricamente) que para a recursão básica de Lanczos, a ortogonalização com respeito aos dois vetores gerados mais recentemente é suficiente para garantir que cada vetor sucessivo é ortogonal com respeito aos gerados previamente. O procedimento de Lanczos pode ser visto portanto como uma ortogonalização de Gram-Schmidt do conjunto de vetores  $\{|v_1\rangle, |Hv_1\rangle, \dots, |H^{(n-1)}v_n\rangle\}$  (vetores de Krylov [6]). No entanto, em cálculos computacionais, erros de arredondamento nas operações aritméticas básicas levam à perda de ortogonalidade dos vetores  $\{|v_1\rangle, |v_2\rangle, \dots, |v_n\rangle\}$ , fazendo com que as quantidades computadas pelo algoritmo diverjam fortemente dos seus valores na aritmética exata. O próprio Lanczos, diante deste comportamento, sugeriu uma reortogonalização completa de cada novo vetor gerado no processo, a todos os previamente obtidos. O custo deste novo arranjo do procedimento original, é uma maior demanda em termos de memória e tempo de processamento, limitando em alguns casos o número de autovalores que podem ser computados, tanto quanto o tamanho da matriz a ser guardada.

Através de uma análise numérica detalhada do método de Lanczos, Paige [8] elaborou uma variante computacional do algoritmo de Lanczos que não usa reortogonalização. Mesmo com a perda total de ortogonalidade, é possível obter autovalores acurados usando o método de forma iterativa. Na verdade, a ortogonalidade dos vetores não é realmente necessária, mas somente uma conveniência para alguns outros usos. O requerimento real é que os vetores sejam linearmente independentes. Paige mostrou que os autovalores obtidos no processo necessariamente convergem quando a dimensão da matriz truncada aumenta, e que diferem dos autovalores de  $\mathbf{H}$  por

quantidades que dependem da precisão da máquina. Erros de arredondamento são minimizados e boa convergência é obtida mesmo para autovalores muito próximos. Além disto, necessitamos menos memória, desde que somente dois vetores ao longo do processo de iteração necessitam ser armazenados.

O método de Lanczos aparece então como uma poderosa ferramenta para calcular o estado fundamental de Hamiltonianos (matrizes) com grandes dimensões, com a imensa vantagem de não ser preciso uma diagonalização direta da matriz completa. A convergência é acelerada se o vetor  $|v_1\rangle$ , que inicializa o processo, contém todas as simetrias da solução (cf. figura 1 e seção 1.5 ). Ainda, com a escolha do vetor inicial, podemos explorar diferentes regiões do espectro, e conseqüentemente o método não se limita apenas à determinação do estado fundamental (cf. seção 2.4).

### 1.3 O modelo da cadeia

Uma das características destacadas do método de Lanczos era o fato de podermos trabalhar com as matrizes e vetores envolvidos, interpretando-os como, por exemplo, hamiltonianos e estados nos quais estes atuam. Com isso abrimos a perspectiva de ir além da importância matemática do método e olhá-lo como um modo de melhor entender um sistema físico particular.

Para trabalharmos os aspectos físicos do método vamos partir de outro método recursivo, formulado por Haydoch [10], no qual se propõe a transformação de um modelo quântico geral em um dito modelo da cadeia, partindo-se da premissa de que tal transformação sempre pode ser feita para qualquer modelo da mecânica quântica

e então resolve-lo.

O ponto inicial da transformação é algum modelo quântico geral que nós investigaremos convertendo-o a um modelo da cadeia. O modelo geral consiste de um conjunto de estados, sua interpretação física, e um hamiltoniano que determina o movimento do sistema entre seus estados. O modelo pode ser especificado por funções de onda e um operador diferencial. A menos que o sistema físico seja unidimensional de algum modo fundamental, o hamiltoniano conectará cada estado com muitos (ou um número infinito) de outros estados. O método aqui apresentado é um procedimento estável de gerar uma representação tridiagonal de um dado operador.

Consideremos então, o operador hamiltoniano  $H$  (supomos aqui ele sendo hermitiano). Escolhemos um estado inicial  $|u_1\rangle$  normalizado. Esta escolha irá nos direcionar ao sistema que a cadeia representa. Por exemplo, se nós queremos explorar a estrutura eletrônica numa superfície, então  $|u_1\rangle$  deve ser um estado localizado na superfície metálica, ou mais simplesmente, se quisermos estudar o espectro e os estados de um oscilador harmônico, podemos escolher  $|u_1\rangle$  como sendo o estado fundamental ou o primeiro estado excitado do oscilador. Cada escolha de  $|u_1\rangle$  produz uma cadeia diferente, e portanto nós escolhemos  $|u_1\rangle$  para obtermos uma cadeia contendo a informação que queremos.

A partir disso, nós construímos uma hierarquia de estados ortonormais de acordo com o seguinte esquema de recorrência:

$$\begin{aligned}
\beta_1 |u_2\rangle &= H |u_1\rangle - \alpha_1 |u_1\rangle \\
\beta_2 |u_3\rangle &= H |u_2\rangle - \alpha_2 |u_2\rangle - \beta_1 |u_1\rangle \\
&\vdots \\
\beta_n |u_{n+1}\rangle &= H |u_n\rangle - \alpha_n |u_n\rangle - \beta_{n-1} |u_{n-1}\rangle
\end{aligned} \tag{1.24}$$

onde,

$$\begin{cases} \alpha_n = \langle u_n | H | u_n \rangle & , n = 1, 2, 3, \dots \\ e \\ \beta_n = \langle u_n | H | u_{n+1} \rangle & , n = 1, 2, 3, \dots \end{cases} \tag{1.25}$$

Nós geramos então uma cadeia de variáveis com elementos da diagonal da matriz  $\alpha_n$  e a interação de vizinhos mais próximos  $\beta_n$ , os quais descrevem a ação do hamiltoniano  $\mathbf{H}$  sobre os estados por meio de uma relação de recorrência com tres termos e simétrica. A recorrência é chamada simétrica por causa da componente  $|u_{n+1}\rangle$  em  $\mathbf{H} |u_n\rangle$  ser a mesma daquela de  $|u_n\rangle$  em  $\mathbf{H} |u_{n+1}\rangle$ . Isto é particularmente um resultado da hermiticidade do hamiltoniano.

Na fig.2.a fazemos um quadro esquemático do modelo em uma simples rede quadrada bi-dimensional.

O esquema mostrado na fig. 2.b equivale a escrever o modelo Hamiltoniano  $\mathbf{H}$  como

$$\mathbf{H} = \alpha_1 |u_1\rangle \langle u_1| + \beta_1 |u_1\rangle \langle u_2| + \beta_1 |u_2\rangle \langle u_1| + \dots + \alpha_n |u_n\rangle \langle u_n| \dots$$

A seqüência de estados  $|u_1\rangle, |u_2\rangle, \dots$  definida pelas equações 1.24 e 1.25 é formalmente equivalente a sequência de vetores definida nas equações 1.17 a 1.19 do método de Lanczos; a única (não essencial) diferença é que nós preferimos construir, começando do requerimento de normalização, de modo que  $|u_i\rangle$  constitui um conjunto ortonormal, com interação de vizinhos próximos.

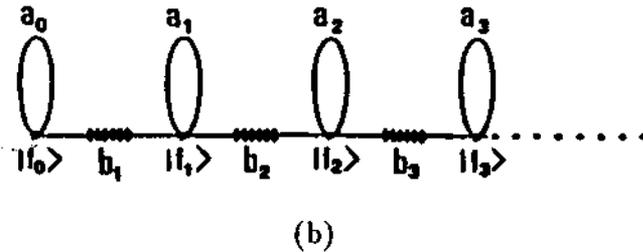
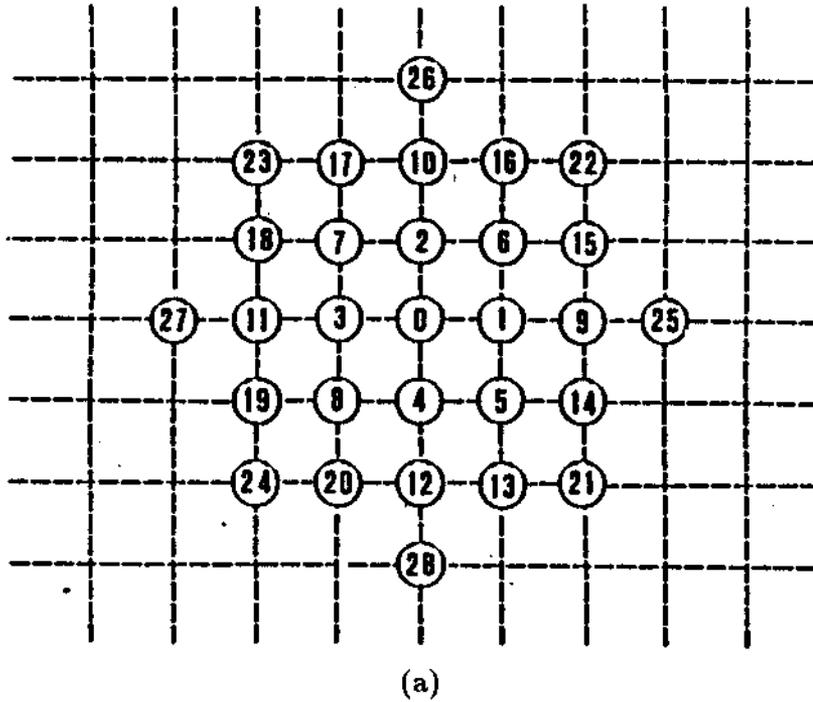


Figura 2: Rede quadrada bidimensional (a) no esquema de recursão (b). Definindo-se

$|\psi_0\rangle = |f_0\rangle = |\phi_0\rangle$ ;  $|\psi_1\rangle = \sum_1^4 |\phi_i\rangle$ ;  $|\psi_2\rangle = \sum_5^8 |\phi_i\rangle$ ;  $|\psi_3\rangle = \sum_9^{12} |\phi_i\rangle$ ;  $|\psi_4\rangle = \sum_{13}^{20} |\phi_i\rangle$ ;  $|\psi_5\rangle = \sum_{21}^{24} |\phi_i\rangle$ ;  $|\psi_6\rangle = \sum_{25}^{28} |\phi_i\rangle$ ; os primeiros estados  $f_i$  são dados por  $|f_0\rangle = |\psi_0\rangle$ ;  $|f_1\rangle = |\psi_1\rangle$ ;  $|f_2\rangle = 2|\psi_2\rangle + |\psi_3\rangle$ ;  $|f_3\rangle = 2|\psi_4\rangle + |\psi_6\rangle$ ; e os primeiros parâmetros  $b_i^2$  são  $b_1^2 = 4$ ,  $b_2^2 = 5$ ,  $b_3^2 = 19/2, \dots$

Este modelo é matematicamente equivalente a expressar o hamiltoniano  $H$  em uma forma tridiagonal como em 1.5. Como no procedimento de Lanczos, podemos diagonalizar a cada passo da cadeia, dada a sua característica recursiva, e todas as propriedades observadas em Lanczos permanecem válidas na construção deste modelo. Originalmente porém, este método recursivo, em oposição ao de Lanczos não focalizava a diagonalização de 1.5, mas sim a construção dos elementos da matriz da função de Green associada a um operador particularmente estudado. Voltaremos a este ponto na próxima secção com ênfase no uso do processo de Lanczos.

Há também que se ressaltar aqui uma interpretação física do modelo da cadeia (até onde isso é possível de se fazer). Da figura 2.a precedente, fica claro que a partir de um estado inicial do sistema, a cadeia estabelece uma ordem de estados da base em termos de como muitos estados intermediários devem ser passados para alcançar um dado estado. Outro modo de expressar isto é dizer que o comportamento do sistema inicialmente em  $|u_1\rangle$  é mais fortemente influenciado por  $|u_2\rangle$  e menos portanto, por cada um dos estados sucessivos da cadeia. A maior influência no movimento do sistema vem de estados próximos no sentido de serem acessíveis por meio de poucos estados intermediários. O modelo da cadeia é a expressão matemática do conceito de condições locais. Cada estado na cadeia representa uma parte mais distante das condições do estado inicial e os parâmetros de recorrência especificam o efeito daquelas condições no movimento do sistema.

A cadeia descreve a evolução do sistema a partir de um estado inicial. Os estados que não estão acoplados ao estado inicial não aparecem na cadeia. A ortonormal-

idade dos estados na cadeia significa simplesmente que a recorrência será simétrica para um hamiltoniano hermiteano.

Podemos dizer que uma cadeia é um autoestado generalizado. A cadeia simples contém um estado  $|v_1\rangle$ , e neste caso a equação 1.24 torna-se

$$\mathbf{H} |v_1\rangle = \alpha_1 |v_1\rangle , \quad (1.26)$$

que quer dizer obviamente que  $|v_1\rangle$  é um autoestado de  $\mathbf{H}$  (este é o caso em que o primeiro vetor gerado em Lanczos tem comprimento nulo, ou seja, o nosso estado teste é exatamente a solução do problema). Uma cadeia maior, no sentido de serem necessárias mais iterações para expandir o espaço inteiro de  $\mathbf{H}$ , representa um subespaço invariante contendo o espaço inicial, tal que  $\mathbf{H}$  atuando sobre qualquer estado, dá outro estado no subespaço. O modelo da cadeia corresponde ao menor subespaço invariante contendo o estado inicial, ou ainda, qualquer outro estado da cadeia. Isto nos leva (como já observado) a utilizar um número de estados reduzido em todo o processo; nós estudamos somente estados translacionalmente invariantes (usamos condições de contorno periódicas do começo ao fim).

Do colocado aqui, vamos à próxima secção discutir alguns resultados interessantes para ilustrar as propriedades observadas anteriormente.

## 1.4 O método de Lanczos e o método dos momentos

Nossa preocupação agora, é de estabelecer alguma relação entre o método de Lanczos e de momentos e com isso ligar Lanczos com a teoria de polinômios ortogonais e frações contínuas, bem como a possibilidade de obtenção de uma função de Green ligada a um operador particular. Porém, vale frisar, será feito o tratamento mais elementar possível, ressaltando apenas alguns resultados, deixando de lado muitas das ramificações possíveis. Meramente nos preocupamos em mostrar algumas conexões interessantes, colocando uma vasta literatura [2] [9] [11] [12] à disposição para um estudo mais apurado da questão.

Um grande número de problemas físicos são descritos por operadores os quais, em geral são muito complicados para uma diagonalização direta mas são ainda suficientemente manipuláveis para permitir, de um modelo razoavelmente simples, o cálculo dos momentos. Neste caso nós podemos obter informações preciosas sobre o sistema físico de interesse através de uma expansão em frações contínuas da função de Green de um dado operador. Este procedimento matemático é conhecido como o problema dos momentos, que tem sido amplamente estudado, em geral, tendo-se em mente operadores hermiteanos (problema dos momentos clássico). Consideremos então uma matriz  $\mathbf{H}$  hermiteana e um vetor  $|v\rangle$  arbitrário. Nós definimos uma matriz de momentos geral como tendo os elementos

$$\mu_n = \langle v | H^n | v \rangle , \quad (1.27)$$

com a ajuda da identidade

$$1 = \sum_{\alpha} |\Psi_{\alpha}\rangle \langle \Psi_{\alpha}| , \quad (1.28)$$

onde  $|\Psi_{\alpha}\rangle$  denota os autoestados de  $\mathbf{H}$  com energia (real)  $E_{\alpha}$ . Podemos escrever a eq. 1.28 como

$$\mu_n = \sum_{\alpha} E_{\alpha}^n |\langle \Psi_{\alpha}|v\rangle|^2 . \quad (1.29)$$

Se a dimensão de  $\mathbf{H}$  é densamente ocupada sobre a região de energia a eq. 1.29 torna-se

$$\mu_n = \int E^n n(E) dE , \quad (1.30)$$

e aqui  $\mu_n$  fica sendo o  $n$ -ésimo momento da distribuição

$$n(E) = a^2(E)P(E) , \quad (1.31)$$

onde  $a^2(\lambda)$  é a média quadrada da projeção de  $|v\rangle$  com um autovetor de  $\mathbf{H}$ , e  $P(E)$  o número de autovalores entre  $E$  e  $E + dE$  (densidade de autovalores). Se  $|v\rangle$  é tal que  $a^2(E)$  é constante (os  $|\langle \Psi_{\alpha}|v\rangle|^2$  são iguais na distribuição discreta)  $n(E)$  fica sendo justamente a densidade de estados.

Considerando-se os determinantes:

$$L_n = \begin{vmatrix} 1 & \mu_1 & \mu_2 & \dots & \mu_n \\ \mu_1 & \mu_2 & \dots & & \mu_{n+1} \\ \dots & & & & \vdots \\ \mu_n & \dots & \dots & & \mu_{2n} \end{vmatrix} , \quad (1.32)$$

$$M_n = \begin{vmatrix} 1 & \mu_1 & \dots & \mu_{n-1} & \mu_{n+1} \\ \mu_1 & \mu_2 & \dots & \mu_n & \mu_{n+2} \\ \dots & & & & \vdots \\ \mu_n & \dots & \dots & \mu_{2n-1} & \mu_{2n+1} \end{vmatrix} . \quad (1.33)$$

Podemos construir uma matriz simétrica tridiagonal associada com os momentos dados, com elementos diagonais

$$a_i = M_{i-1}/L_{i-1} - M_{i-2}/L_{i-2} \quad (1.34)$$

e elementos fora da diagonal

$$b_i = \sqrt{L_i L_{i-2}} / L_{i-1} , \quad (1.35)$$

com  $M_{-1} = 0$ ,  $M_0 = \mu$ ,  $L_0 = 1$ .

Os  $a$ 's e os  $b$ 's podem ser olhados como "momentos reduzidos" no sentido de que eles carregam informação sobre a distribuição de momentos. A solução do problema é agora como segue: os autovalores e autovetores dessa matriz tridiagonal construída a partir dos  $a$ 's e  $b$ 's são os mesmos da matriz dos momentos definidos na equação 1.27 . Mais do que essa característica o procedimento acima nos dá uma sequência de soluções no sentido de se aproximar mais e mais da distribuição original, o que para algum propósito específico pode ser o suficiente. Portanto, truncando-se o procedimento de se obter a matriz tridiagonal associada aos momentos a qualquer ordem  $i$ , produz-se uma solução tal que seus  $2i - 1$  momentos independentes concordam exatamente com os primeiros  $2i - 1$  momentos da solução exata. Apesar desse importante resultado, este procedimento requer que calculemos determinantes como os das equações 1.32 e 1.33, o que vem a ser um procedimento extremamente instável, resultando na necessidade de se conhecer os momentos com quão pequena que seja a precisão e carregar esta precisão através dos cálculos. Então para uma precisão

aritmética finita, em geral, as delicadas relações que garantem que os momentos correspondem a uma distribuição são violadas.

Para o problema da matriz dos momentos portanto, nós podemos ver o método de Lanczos como um modo alternativo de se obter a matriz tridiagonal, sem realmente calcular os momentos o que, como observado anteriormente, garante mais estabilidade e maior precisão. Então, se nós quisermos formar a matriz  $n \times n$  da matriz tridiagonal associada aos momentos nós necessitamos somente fazer  $n$  passos do procedimento de Lanczos.

Esta estreita relação entre Lanczos e os Momentos nos permite especular um pouco mais sobre a convergência dos autovalores de  $\mathbf{H}$  no processo de Lanczos. Note-mos em primeiro lugar que passando-se  $\mathbf{H} \rightarrow \mathbf{H} - \mu_1 \mathbf{I}$ , com  $\mathbf{I}$  sendo a identidade, meramente fazemos com que  $a_i \rightarrow a_i - \mu_1$ , com os  $b$ 's permanecendo os mesmos. Isto corresponde a representar os momentos dados pela equação 1.28 como momentos centrais ou momentos sobre a média. Agora os altos momentos centrais são muito sensíveis aos autovalores extremos, mas depois de  $k$  passos nós calculamos, com efeito, o  $(2k - 1)$ -ésimo momento exatamente (ou tão precisamente quanto for necessário para calcular os  $a$ 's e os  $b$ 's). Então a convergência aos autovalores extremos é uma consequencia do poder do método para calcular altos momentos. Não é correto que o fato de os autovalores extremos convergirem primeiro, eles dependem dos baixos momentos.

Continuando nossa "busca" de algumas conexões interessantes com o método de Lanczos, vamos estudar os autoestados e autovalores do modelo original obtidos

pelo método (ou se quisermos, na transformação para a cadeia). Isto nos levará a teoria de polinômios ortogonais (o que já era esperado da relação com os momentos derivada anteriormente).

Suponhamos portanto, que se queira achar os autoestados de uma dada matriz tridiagonal correspondendo aos autovalores desta. Para isso precisamos resolver a equação matricial

$$(1.36) \quad \begin{bmatrix} E - a_1 & -b_1 & 0 & 0 & \cdots \\ -b_1 & E - a_2 & -b_2 & 0 & \cdots \\ 0 & -b_2 & E - a_3 & -b_3 & \cdots \\ 0 & 0 & -b_3 & E - a_4 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix} \begin{bmatrix} p_1 \\ p_2 \\ p_3 \\ p_4 \\ \vdots \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \end{bmatrix}$$

a qual é justamente a equação de Schrödinger independente do tempo

$$\mathbf{H} \sum_{n=1}^{\infty} \mathbf{P}_n |u_n\rangle = E \sum_{n=1}^{\infty} \mathbf{P}_n |u_n\rangle \quad (1.37)$$

A equação 1.36 ainda define um conjunto de equações lineares as quais podem ser consideradas na relação de recorrência

$$b_n P_{n+1}(E) = (E - a_n) P_n(E) - b_{n-1} P_{n-1}(E), \quad (1.38)$$

que é a relação de recorrência fundamental para uma família de polinômios ortogonais  $\{P_n(E)\}$ . Esta sequência infinita (ou finita) termina se nós considerarmos os valores  $E = E_i$  nos quais  $P_n(E)$  vai a zero, ou seja, os autovalores da matriz truncada a  $n \times n$  são os zeros do polinômio de grau  $n$ ,  $P_n(E)$ . A recorrência apresentada em

1.38 é a contrapartida, em teoria de polinômios ortogonais, da relação 1.24 obtida na construção do modelo da cadeia (ou ainda a equação 1.17 do processo de Lanczos).

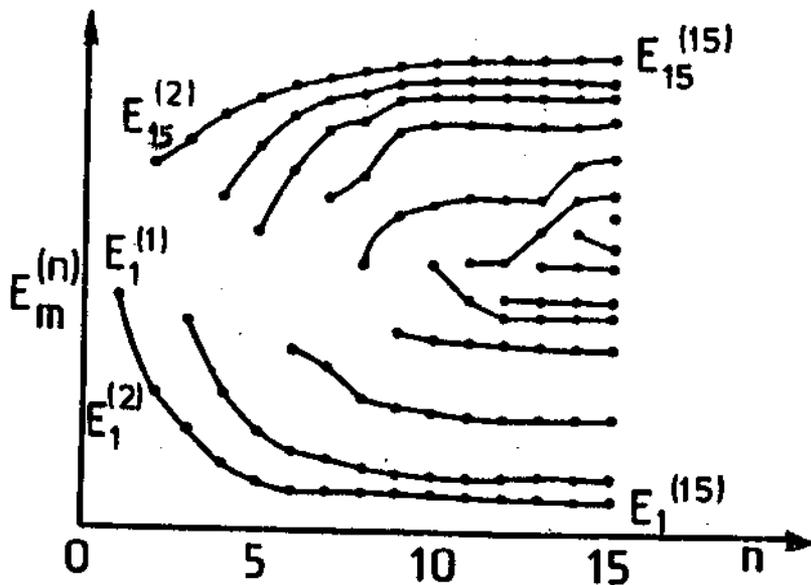


Figura 3: Comportamento esquemático das raízes de  $P_n(E)$  como uma função de  $n$

Voltando-se a questão da convergência dos autovalores, desde que são uma função de  $n$ , seus extremos convergem rapidamente e os centrais mais vagorosamente. Se nós calcularmos as raízes  $\{E_m^{(n)}\}$  de  $\{P_n(E)\}$  nós achamos que as maiores e menores raízes variam pouco com  $n$ .

Esta convergência move-se do extremo do espectro para o centro. Uma explicação qualitativa para este fenômeno é que  $(H - a_n) |u_n\rangle$  contém proporcionalmente

autovalores mais distantes de  $a_n$ ; isto é contrabalançado pela subtração de  $b_{n-1} |u_{n-1}\rangle$ . Para cada autovalor há um valor de  $n$  para o qual as subtrações sobrepujam as multiplicações e as raízes correspondentes cessam de variar (um esquema desse fenômeno é plotado na figura 3).

Para finalizar esta secção vamos agora focar nossa atenção na construção da função de Green (ou resolvente) recursivamente, tendo os momentos como ingrediente. Esta aproximação é muito mais conveniente para manusearmos operadores com um contínuo no espectro de energia, bem como, de um ponto de vista mais particular, calcular a densidade de estados para alguma distribuição. Portanto, tomando-se os momentos definidos na equação 1.29 podemos escrever a função de Green  $G(E)$ , relativa a estes momentos como :

$$G(E) = \sum_{n=1}^{\infty} \mu_n / E^{n+1} \quad (1.39)$$

para propósitos computacionais a função  $G(E)$  pode ser expandida na forma de frações continuadas ficando:

$$G(E) = \frac{1}{E - a_1 - \frac{b_1}{E - a_2 - \frac{b_2}{E - a_3 - \dots}}} \quad (1.40)$$

com os  $a_n$ 's e os  $b_n$ 's dados respectivamente por 1.34 e 1.35. Aqui os valores assintóticos (desde que a distribuição  $n(E)$  nos quais os momentos estão relacionados é tomada num contínuo de energia) para  $a_n$  e  $b_n$  produzem importantes informações físicas; de fato  $a_{\infty}$  é a posição do centro da banda de energia, enquanto a largura da banda é obtida de  $b_{\infty}$ .

Mais uma vez, obtemos parâmetros de recursão que são os mesmos dos gerados

no processo de Lanczos, nos permitindo agora escrever o resolvente iterativamente, de uma forma mais precisa e estável que quando trabalhado a partir do método dos momentos.

Existe uma vasta literatura a ser consultada [11] para uma análise mais profunda dos resultados derivados nesta seção, e por fugir ao escopo deste trabalho, não foi levada a cabo.

## 1.5 Simetrias

Como já observado anteriormente (cf.seção 1.2), tomando-se vantagem da simetria em um hamiltoniano, podemos economizar tempo e estocagem na computação do processo de Lanczos, ou simplificar consideravelmente o processo analítico de se obter as iterações de Lanczos, (transformação a uma cadeia). Ainda, uma simplificação do problema pode ser obtida com a escolha do estado inicial, além de com isso ser possível explorar todo o espectro de soluções. A única dificuldade é que uma análise mais apurada das simetrias pode consumir muito tempo ou ainda ser complicada por si só. Nesta seção, nós estudamos brevemente a aplicação de simetria à transformação do modelo da cadeia.

A simetria do hamiltoniano pode levar a degenerescência em seu espectro. Seja  $\mathbf{H}$  um hamiltoniano com autovalores  $E_n$ , possivelmente degenerados, correspondendo a uma escolha de autovetores ortonormais  $\{|\omega_\alpha\rangle\}$ . Se em termos dos  $\{|\omega_\alpha\rangle\}$ ,  $\mathbf{T}$  é a representação unitária de alguma simetria de  $\mathbf{H}$ , então  $\mathbf{H}$  e  $\mathbf{T}$  comutam

$$\mathbf{TH} = \mathbf{HT}, \quad (1.41)$$

portanto

$$\mathbf{H}\{|\omega_\alpha\rangle\} = E_\alpha\{|\omega_\alpha\rangle\}, \quad (1.42)$$

implica em

$$\mathbf{HT}\{|\omega_\alpha\rangle\} = E_\alpha\mathbf{T}\{|\omega_\alpha\rangle\} \quad (1.43)$$

Então  $\mathbf{T}\{|\omega_\alpha\rangle\}$  é também um autoestado de  $\mathbf{H}$  com a mesma energia que  $\{|\omega_\alpha\rangle\}$ . A menos que  $\exp(i\Phi_\alpha)|\omega_\alpha\rangle = \mathbf{T}|\omega_\alpha\rangle$ , para todo  $\alpha$ ,  $\mathbf{T}|\omega_\alpha\rangle$  é linearmente independente de  $|\omega_\lambda\rangle$  para algum  $\lambda$  e  $E_\lambda$  é então degenerado. Inversamente, supondo  $E_\lambda = E_\mu$ , para  $\lambda \neq \mu$ , e  $\mathbf{I}$  sendo a identidade; nós podemos construir uma transformação unitária

$$\mathbf{T} = \mathbf{I} - \{|\omega_\lambda\rangle - |\omega_\mu\rangle\}\{\langle\omega_\lambda| - \langle\omega_\mu|\} \quad (1.44)$$

O que neste caso é fácil verificar que  $\mathbf{T}$  comuta com  $\mathbf{H}$  e portanto representa uma simetria de  $\mathbf{H}$ . Não é sempre possível dar uma interpretação física para transformações que comutam com  $\mathbf{H}$ , mas nós as tratamos todas do mesmo modo.

Em contrapartida a possibilidade de simetria do hamiltoniano (e uma possível degenerescência), o modelo da cadeia não tem simetrias. Isto segue da natureza não degenerada do espectro de autovalores da cadeia. Para os propósitos desta seção, nós podemos ampliar o entendimento do modelo contendo estados de simetria simples somente, todas as outras simetrias tendo sido “jogadas fora”.

Quanto a escolha do estado inicial, o uso mais eficiente da transformação ao modelo da cadeia, resulta quando este estado pertence a uma representação irreduzível das simetrias de  $\mathbf{H}$ . Quando este é o caso, os únicos estados acoplados a  $|u_1\rangle$  (e portanto aparecendo no modelo) são aqueles pertencentes a mesma linha da

mesma representação irredutível das simetrias de  $\mathbf{H}$ . Isto quer dizer que somente tais estados necessitam ser retidos, e portanto na computação a mesma resolução pode ser guardada com muito menos estocagem e gasto de tempo porque a dimensionalidade da matriz  $\mathbf{H}$  é reduzida.

As cadeias produzidas por estados iniciais correspondentes a diferentes linhas da mesma representação irredutível são similares. Supondo  $\mathbf{T}$  como sendo uma representação unitária que leva  $|u_1\rangle$  em  $\mathbf{T}|u_1\rangle$ ; então porque  $\mathbf{T}$  comuta com  $\mathbf{H}$ , o  $n$ -ésimo estado  $|u_n\rangle$  na cadeia, gerado por  $|u_1\rangle$  vai para  $\mathbf{T}|u_n\rangle$ , o  $n$ -ésimo estado na cadeia gerado por  $\mathbf{T}|u_1\rangle$  e os parâmetros da cadeia são idênticos. Isto significa portanto que, um modelo da cadeia necessita ser calculado somente uma vez para cada representação irredutível.

Do colocado acima, enfatizamos que uma “boa” escolha do nosso vetor inicial simplifica o problema de transformação ao modelo da cadeia. Este fato nos sugere a possibilidade de algum sub-modelo para se obter um bom vetor inicial. Essa possibilidade, a nosso ver, seria um outro trabalho elaborado em um sentido um tanto diferente do que aqui nos propomos, e portanto deixamos essa possibilidade como uma sugestão de trabalho futuro. Entretanto, de modo a ampliar o sugerido, partimos da afirmação de que qualquer modelo quântico (aqui representado por uma hamiltoniana e os estados nos quais ela atua) complicado no sentido de suas simetrias, pode ser reduzido a uma “soma” (ou acoplamento) de modelos simples os quais sabemos sobre suas simetrias com isso podemos sempre escolher, pelo menos em princípio, como um “bom” estado inicial, o pertencente ao espaço de estados de algum desses modelos

simples componentes do modelo estudado efetivamente.

Voltaremos a discutir um pouco mais essa questão de uma maneira mais pragmática no próximo capítulo para esclarecer melhor a proposição.

## Capítulo 2

# O método de Lanczos como método perturbativo

Recentemente Znojil [14] e [15] trabalhou o método de Lanczos como um método perturbativo, usando para isso a parte não perturbada do hamiltoniano na forma tridiagonal via o uso de um operador propagador tridiagonal, sempre com vistas à relação de Lanczos com frações continuadas. Além disso, no espírito do método recursivo para se resolver a equação de Schrödinger, Haydock [10] desenvolveu nos anos 70 seu modelo da cadeia perturbada, calculando os parâmetros e a base que tornam o Hamiltoniano tridiagonal; aplicando esses resultados para calcular funções de Green e ao problema de transições eletrônicas.

Neste capítulo tratamos o método de Lanczos para um Hamiltoniano perturbado do ponto de vista de sua filosofia original, indo com efeito à diagonalização da matriz tridiagonal a cada passo do processo, obtendo os autovalores e autoestados deste Hamiltoniano. De uma maneira geral, aqui cada passo para Lanczos será interpretado como uma melhoria na aproximação dos autovalores do Hamiltoniano

perturbado. Isto fará com que cada passo de Lanczos contenha sempre muitos termos da teoria de perturbação ordinária. Esta nova versão da velha idéia original de Lanczos distancia-se das considerações perturbativas do método até aqui apresentadas na literatura, não só pela maior simplicidade em sua estrutura, bem como (por se manter a universalização do método) sua aplicabilidade pode ser estendida a vários outros sistemas físicos. Além disso, a melhor convergência do método de Lanczos do que a teoria de perturbações do tipo Rayleigh-Schrödinger é destacada neste capítulo, além do fato de Lanczos funcionar mesmo em situações onde a teoria de perturbações não é mais aplicável.

Começamos então fazendo uma revisão das teorias de perturbação em Mecânica Quântica, nos permitindo ressaltar as diferenças com a nova aproximação apresentada aqui.

Na seção posterior, apresentamos uma versão simplificada do modelo da cadeia perturbada de Haydock [10], nos permitindo visualizar a estrutura matemática desta transformação e compará-la com a idéia, da teoria de perturbação, de se fazer expansões em potências de um parâmetro de perturbação.

Finalmente, as últimas seções serão dedicadas à comparação de fato entre o procedimento de Lanczos com a teoria de perturbação em mecânica quântica, destacando os resultados que são a motivação central deste trabalho, discutindo-os através de um exemplo simples.

## 2.1 Revisitando a teoria de perturbações em Mecânica Quântica

Descrevemos aqui os principais pontos ([16] e [17]) da teoria de perturbações em Mecânica Quântica, no sentido de se considerar perturbações na função de onda. As duas formas de perturbações discutidas aqui, são as conhecidas formulações de Rayleigh-Schrödinger (R-S) e Brillouin-Wigner (B-W). Estas formulações serão úteis no decorrer deste capítulo e seus resultados serão largamente usados, sempre a nível de comparação com os resultados obtidos nas seções subseqüentes (o que já justifica esta seção).

Em toda esta seção estaremos trabalhando sempre com o caso correspondente a estados ligados, isto é, o caso de autovalores discretos para a equação de Schrödinger, além de vislumbrarmos estados estacionários.

Consideremos então qualquer sistema quântico com sua hamiltoniana sendo dada por:

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}_0 + \mathbf{V}, \quad (2.1)$$

onde  $\mathbf{H}_0$  é a parte do problema idealizado, o hamiltoniano não perturbado, cujos autovalores e autofunções normalizados são conhecidos exatamente.

$$(\mathbf{H}_0 - \epsilon_n) |n\rangle = 0, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (2.2)$$

$\epsilon_0$  é o autovalor correspondente ao autoestado do sistema não perturbado  $|0\rangle$ , o qual

é assumido não degenerado. O operador  $\mathbf{V}$  é o termo extra, o operador perturbação, que pode ser parte do hamiltoniano total ou a energia potencial de um efeito externo (campo). A perturbação  $\mathbf{V}$  é assumida aqui “pequena”.

O problema a ser resolvido é o de calcular os autovalores  $E_n$  e os autoestados  $|N\rangle$  do hamiltoniano  $\mathbf{H}$ , dados por

$$(E_n - \mathbf{H}_0 - \mathbf{V}) |N\rangle = 0 \quad (2.3)$$

Assumimos que os autoestados de  $\mathbf{H}_0$  são normalizados a 1,  $\langle n|n\rangle = 1$ , e vamos escolher a normalização de  $|N\rangle$  de modo que

$$\langle n|N\rangle = 1. \quad (2.4)$$

Então de 2.2 e 2.3 é fácil obter

$$\langle N|\mathbf{H}_0|n\rangle = \epsilon_n \langle N|n\rangle, \quad (2.5)$$

e

$$\langle n|\mathbf{H}_0|N\rangle + \langle n|\mathbf{V}|N\rangle = E_n \langle n|N\rangle. \quad (2.6)$$

Subtraindo-se 2.5 de 2.6, usando-se a hermiticidade de  $\mathbf{H}_0$  e a condição de normalização, nós obtemos

$$E_n - \epsilon_n = \langle n|\mathbf{V}|N\rangle, \quad (2.7)$$

que é exatamente a fórmula para a diferença de níveis de energia  $E_n - \epsilon_n$ . Como pode ser visto, a equação 2.7 não é de valor prático, pois ela envolve a função de onda  $|N\rangle$ , não conhecida.

Para encontrarmos uma expressão para a função de onda perturbada, introduzimos um operador projeção  $\mathbf{P}_n$ , o qual, quando aplicado a um ket arbitrário  $| \rangle$  dá a sua componente  $\langle n | \rangle$  multiplicada por  $|n\rangle$ . Então

$$\mathbf{P} |N\rangle = |n\rangle \quad (2.8)$$

e portanto

$$\begin{aligned} |N\rangle &= |n\rangle + (\mathbf{1} - \mathbf{P}) |N\rangle \\ &= |n\rangle + \mathbf{Q}_n |N\rangle, \end{aligned} \quad (2.9)$$

onde 2.10 define um novo operador  $\mathbf{Q}_n$ . Desde que  $\mathbf{P}^2 = \mathbf{P}$ , segue da definição que  $\mathbf{Q}_n^2 = \mathbf{Q}_n$  e portanto,  $\mathbf{Q}$  também é um operador projeção. Nós temos também de 2.3, a possibilidade de se trabalhar com um  $\xi$  arbitrário, de forma que

$$(\xi - \mathbf{H}_0) |N\rangle = (\xi - E_n + \mathbf{V}) |N\rangle, \quad (2.10)$$

que pode ser reescrita equivalentemente como

$$|N\rangle = \frac{1}{\xi - \mathbf{H}_0} (\xi - E_n + \mathbf{V}) |N\rangle. \quad (2.11)$$

Voltando-se com 2.11 em 2.10, ficamos com

$$|N\rangle = |n\rangle + \frac{\mathbf{Q}_n}{\xi - \mathbf{H}_0} (\xi - E_n + \mathbf{V}) |N\rangle. \quad (2.12)$$

Iterando 2.12

$$|N\rangle = \sum_{k=0}^{\infty} \left\{ \frac{\mathbf{Q}_n}{\xi - \mathbf{H}_0} (\xi - E_n + \mathbf{V}) \right\}^k |n\rangle, \quad (2.13)$$

Neste ponto retornamos à equação 2.7 para a diferença de níveis e achamos

$$E_n - \epsilon_n = \sum_{k=0}^{\infty} \left\langle n \left| \mathbf{V} \left\{ \frac{\mathbf{Q}_n}{\xi - \mathbf{H}_0} (\xi - E_n + \mathbf{V}) \right\}^k \right| n \right\rangle. \quad (2.14)$$

Da arbitrariedade de  $\xi$  temos a generalidade de 2.13 e 2.14 e destas equações podemos obter as duas versões da teoria de perturbações. Primeiramente fazemos  $\xi = E_n$ , a energia do sistema perturbado, encontramos a formulação para a teoria de B-W,

$$|N\rangle = \sum_{k=0}^{\infty} \left\{ \frac{\mathbf{Q}_n}{E_n - \mathbf{H}_0} \mathbf{V} \right\}^k |n\rangle \quad (2.15)$$

e

$$E_n - \epsilon_n = \sum_{k=0}^{\infty} \left\langle n \left| \mathbf{V} \left\{ \frac{\mathbf{Q}_n}{E_n - \mathbf{H}_0} \mathbf{V} \right\}^k \right| n \right\rangle. \quad (2.16)$$

A característica principal deste formalismo é termos uma energia não conhecida aparecendo dos dois lados de 2.16. Isto está em contraste com a teoria do tipo R-S, a qual, tomando-se agora  $\xi = \epsilon_n$ , nos leva às equações para  $|N\rangle$  e  $E_n - \epsilon_n$ , como sendo

$$|N\rangle = \sum_{k=0}^{\infty} \left\{ \frac{\mathbf{Q}_n}{\epsilon_n - \mathbf{H}_0} (\epsilon_n - E_n + \mathbf{V}) \right\}^k |n\rangle, \quad (2.17)$$

e

$$E_n - \epsilon_n = \sum_{k=0}^{\infty} \left\langle n \left| \mathbf{V} \left\{ \frac{\mathbf{Q}_n}{\epsilon_n - \mathbf{H}_0} (\epsilon_n - E_n + \mathbf{V}) \right\}^k \right| n \right\rangle \quad (2.18)$$

respectivamente. Destas equações podemos obter tanto a função de onda perturbada como a diferença de níveis, a qualquer ordem desejada em  $\mathbf{V}$ .

Desenvolvido o formalismo para uma teoria de perturbações, a mais geral possível, vamos agora nos ater à estrutura dos termos das séries derivadas até aqui. Para isso inicialmente desenvolvemos as séries para a energia e o estado perturbado advindos do método (B-W). Esta escolha particular se deve a essa teoria nos prover de uma generalização mais conveniente para termos de ordem alta (apesar de não ser prática para cálculos, desde que envolve a energia não perturbada ao invés da perturbada). De 2.2 e da estrutura de 2.8 e 2.10, podemos construir o operador projeção como

$$\mathbf{Q}_n = \sum_{r \neq n} |r\rangle \langle r| = \mathbf{1} - |n\rangle \langle n| \quad (2.19)$$

(fica claro aqui que  $\mathbf{Q}_n$  comuta com  $\mathbf{H}_0$ ). Além disso, podemos voltar em 2.15 e definir

$$\mathbf{R}_n = (E_n - \mathbf{H}_0)^{-1} \mathbf{Q}_n = \mathbf{Q}_n (E_n - \mathbf{H}_0)^{-1}. \quad (2.20)$$

Com esta definição podemos escrever a expansão 2.15 como

$$|N\rangle = |n\rangle + \mathbf{R}_n \mathbf{V} |n\rangle + (\mathbf{R}_n \mathbf{V})^2 |n\rangle + (\mathbf{R}_n \mathbf{V})^3 |n\rangle + \dots \quad (2.21)$$

Nós podemos ainda somar esta série infinita geométrica para nos dar

$$|N\rangle = (\mathbf{1} - \mathbf{R}_n \mathbf{V})^{-1} |n\rangle. \quad (2.22)$$

Esta solução formal exata é de pouco valor computacional, contudo nos servirá em discussões futuras.

Para produzirmos uma expansão para os autovalores de energia, voltamos com 2.21 em 2.16 e obtemos

$$E_n = \epsilon_n + \langle n | \mathbf{V} | N \rangle, \quad (2.23)$$

ou ainda

$$E_n = \epsilon_n + \langle n | \mathbf{V} | n \rangle + \langle n | \mathbf{V} (\mathbf{R}_n \mathbf{V}) | n \rangle + \langle n | \mathbf{V} (\mathbf{R}_n \mathbf{V})^2 | n \rangle + \dots \quad (2.24)$$

Se ainda quisermos introduzir a representação espectral do operador  $\mathbf{R}_n$ ,

$$\mathbf{R}_n = \sum_{m \neq n} \frac{|m\rangle \langle m|}{E_n - \epsilon_m}, \quad (2.25)$$

nós obtemos uma forma mais familiar da expansão para a perturbação:

$$E_n = \epsilon_n + \langle n | \mathbf{V} | n \rangle + \sum_{m \neq n} \frac{\langle n | \mathbf{V} | m \rangle \langle m | \mathbf{V} | n \rangle}{E_n - \epsilon_m} + \sum_{m \neq n} \sum_{m' \neq n} \frac{\langle n | \mathbf{V} | m \rangle \langle m | \mathbf{V} | m' \rangle \langle m' | \mathbf{V} | n \rangle}{(E_n - \epsilon_m)(E_n - \epsilon_{m'})} + \dots \quad (2.26)$$

que é uma expressão não explícita para  $E_n$ , pois como já observado anteriormente,  $E_n$  não é conhecida. Se quisermos calcular  $E_n$  na teoria de perturbação do tipo (B-W), é necessário fazer uma estimativa de  $E_n$  e realimentar a série com resultados sucessivos. O processo é então continuado iterativamente até o resultado convergir à precisão requerida.

Para finalizarmos esta seção, vamos estudar as condições de aplicabilidade da teoria de perturbações. Os resultados deste tópico nos serão muito úteis nas seções posteriores.

De uma maneira geral, qualquer uma das séries desenvolvidas até agora, podem ser calculadas a qualquer ordem, desde que elas convirjam. A prova da convergência para uma série específica é muito complicada [16]. Algumas vezes, a teoria de perturbações em primeira ordem dá bons resultados (mesmo quando a série diverge). Para trabalharmos a questão da convergência em teoria de perturbações (e, por conseguinte, seus limites de validade), vamos utilizar o método de (R-S) formulado nas equações 2.17 e 2.18. Este formalismo é menos manipulável do que o de (B-W), pois nos produz, para todas as ordens a partir da segunda, muito mais termos que a equação 2.26; porém como já dito, produz os termos para  $|N\rangle$  e  $E_n - \epsilon_n$  a qualquer ordem em  $V$ . Portanto, para efeito de cálculo, podemos fazer

$$\mathbf{V} \rightarrow \lambda \mathbf{V}, \quad (2.27)$$

onde  $\lambda$  é o parâmetro de perturbação, tomado como muito pequeno,  $0 \leq \lambda \leq 1$ , que descreve a força relativa do operador perturbação (constante de acoplamento). A introdução deste termo reduz a necessidade de  $\mathbf{V}$  ser pequeno (e dizemos que, para o desenvolvimento do formalismo de (B-W), tomamos  $\lambda = 1$ ). Podemos ainda reescrever 2.17 e 2.18 usando a representação em elementos de matriz e a expressão dada em 2.27, levando-nos a

$$|N\rangle = |n\rangle + \lambda \sum_{m \neq n} \frac{|m\rangle \langle m | \mathbf{V} | n \rangle}{\epsilon_n - \epsilon_m} +$$

$$\lambda^2 \left( \sum_{m \neq n} \sum_{p \neq n} \frac{|m\rangle \langle m | \mathbf{V} | p\rangle \langle p | \mathbf{V} | n\rangle}{(\epsilon_n - \epsilon_p)(\epsilon_n - \epsilon_m)} - \sum_{m \neq n} \frac{|m\rangle \langle m | \mathbf{V} | n\rangle \langle n | \mathbf{V} | n\rangle}{(\epsilon_n - \epsilon_m)^2} \right) + \dots \quad (2.28)$$

e

$$E_n = \epsilon_n + \lambda \langle n | \mathbf{V} | n\rangle + \lambda^2 \sum_{m \neq n} \frac{|\langle n | \mathbf{V} | m\rangle|^2}{\epsilon_n - \epsilon_m} + \dots \quad (2.29)$$

Tais equações são de uso mais popular, pois são obtidas, em geral, expandindo-se a função de onda e a energia perturbada de  $\mathbf{H}$  como uma série de potências em  $\lambda$ :

$$|N\rangle = |n\rangle + \lambda |N^1\rangle + \dots + \lambda^k |N^k\rangle \quad (2.30)$$

e

$$E_n = \epsilon_n + \lambda E_n^1 + \dots + \lambda^k E_n^k \quad (2.31)$$

e voltando-se com estas equações em 2.1. Aqui vale a pena ressaltar que é mais conveniente uma normalização não usual para o autovetor exato dado em 2.30, dada por 2.4, pois isto tira a ambiguidade de uma possível solução do tipo

$$|N^k\rangle = |N^k\rangle + \alpha_k |n\rangle, \quad (2.32)$$

fazendo com que

$$\langle n | N^k \rangle = 0, \quad (2.33)$$

para  $k > 0$ . Ainda de outra forma, podemos obtê-las, se formalmente expandirmos todos os fatores como  $(E_n - \epsilon_n)^{-1}$  no lado direito de 2.26 em potências do parâmetro de perturbação. Os resultados de 2.26 sugerem portanto que a “pequenez” da perturbação está relacionada com o fato de que  $\lambda \langle m | \mathbf{V} | n\rangle$  deve ser pequeno comparado

com o correspondente denominador  $\epsilon_n - \epsilon_m$ . Finalmente então, para que as séries 2.26 e 2.27 convirjam, deve valer a condição de que

$$\lambda | \langle m | \mathbf{V} | n \rangle | \ll | \epsilon_n - \epsilon_m |, \quad (2.34)$$

para todo  $m \neq n$ . Ou seja, a condição para a aplicabilidade do método da teoria de perturbações é o requerimento de que os elementos fora da diagonal da matriz do operador perturbação  $\mathbf{V}$  sejam pequenos em relação à magnitude da diferença dos correspondentes valores da energia não perturbada. Ou ainda, estritamente falando, a teoria de perturbações só é aplicável no caso de  $\lambda \rightarrow 0$  ou  $\mathbf{H} \rightarrow \mathbf{H}_0, E_n \rightarrow \epsilon_n$  e  $|N\rangle \rightarrow |n\rangle$ .

Com estes resultados vamos nas próximas seções discutir o método de Lanczos como um método perturbativo, sempre comparando com as técnicas tradicionalmente usadas em teoria de perturbações.

## 2.2 O modelo da cadeia perturbado

Até aqui, mostramos o método de Lanczos como um método recursivo através do qual podemos expressar o hamiltoniano para um sistema via uma relação de recorrência à três termos, equivalentemente à expressar esse operador numa forma tridiagonal na base dos estados gerados a cada passo do processo, e que por fim podia ser diagonalizada. Uma vez feito isso, obtemos expressões simples para autovalores, funções de Green e outras quantidades físicas.

Vamos agora trabalhar com uma pequena variação no modelo hamiltoniano  $\mathbf{H}$ . A pergunta que surge inicialmente é como esta variação afeta a tridiagonalização

de  $\mathbf{H}$ , através do processo de Lanczos. A resposta à esta questão é uma teoria de perturbação da transformação dada por Lanczos. Esta teoria é baseada na idéia de uma relação de recorrência perturbada, na qual os coeficientes de recorrência ou elementos da matriz tridiagonal serão expressos como uma série de potências na constante de acoplamento, assim como a base construída é também dependente desta constante, mostrando que o hamiltoniano perturbado é tridiagonal na nova base. A variação nos coeficientes expressa então, a variação nas propriedades das vizinhanças enquanto a variação na base expressa o movimento das vizinhanças.

Estaremos atentos portanto, a estrutura matemática do procedimento de Lanczos, para uma hamiltoniana perturbada, via o modelo da cadeia discutido no capítulo 1, sempre ressaltando as relações entre a descrição física de um sistema e as entidades matemáticas envolvidas nesta teoria, deixando as vantagens computacionais do método para as futuras seções.

Partimos da idéia básica da teoria de perturbações trabalhada na secção precedente, por causa da sua flexibilidade e universalidade, podemos aqui expandir os estados da base e os parâmetros que formam a matriz tridiagonal em potências do potencial de perturbação. Consideramos mais uma vez a hamiltoniana

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}_0 + \lambda \mathbf{V}, \quad (2.35)$$

onde, como já colocado anteriormente,  $\lambda$  é um parâmetro escalar adimensional,  $\mathbf{V}$  sendo algum potencial de perturbação e finalmente  $\mathbf{H}_0$  é o hamiltoniano não perturbado. A relação de recorrência simétrica para  $\mathbf{H}$  no processo de Lanczos, fica na

forma:

$$b_n |u_{n+1}\rangle = \mathbf{H} |u_n\rangle - n |u_n\rangle - b_{n-1} |u_{n-1}\rangle, \quad (2.36)$$

o que, de 2.35, permite-nos escrever os termos de recorrência como

$$a_n = \langle u_n | \mathbf{H} | u_n \rangle = \langle u_n | \mathbf{H}_0 | u_n \rangle + \langle u_n | \lambda \mathbf{V} | u_n \rangle, \quad (2.37)$$

e

$$b_n = \langle u_n | \mathbf{H} | u_{n+1} \rangle = \langle u_n | \mathbf{H}_0 | u_{n+1} \rangle + \langle u_n | \lambda \mathbf{V} | u_{n+1} \rangle. \quad (2.38)$$

Se nós formos até o fim do processo, estaremos fazendo uma transformação de similaridade para o hamiltoniano, de forma que  $\mathbf{H}$  na nova base dos  $|u\rangle$ 's é escrito como:

$$\mathbf{J} = \begin{bmatrix} a_1 & b_1 & 0 & 0 & \cdots \\ b_1 & a_2 & b_2 & 0 & \cdots \\ 0 & b_2 & a_3 & b_3 & \cdots \\ 0 & 0 & b_3 & a_4 & \ddots \end{bmatrix}, \quad (2.39)$$

onde o índice  $n$  pode variar de 1 à  $\infty$ , dependendo da dimensão de  $\mathbf{H}$ . Para uma teoria de perturbação então, nós necessitamos expressar a base  $\{|u_n\rangle\}$  e  $\mathbf{J}$  como uma série de potências em  $\lambda$  e então mostrar que calcular uma dada quantidade a uma dada ordem nunca envolve qualquer alta ordem. Suponhamos agora que nós tenhamos a construção de  $\mathbf{H}_0$  consistindo dos estados  $\{|u_1^{(0)}\rangle, |u_2^{(0)}\rangle, \dots\}$ , e parâmetros  $\{a_1^{(0)}, a_2^{(0)}, \dots\}$  e  $\{b_1^{(0)}, b_2^{(0)}, \dots\}$ . Nós podemos fazer a transformação de  $\mathbf{H}$  e, para cada valor de  $\lambda$ , achar os estados  $\{|u_n(\lambda)\rangle\}$  e ainda  $\{a_n(\lambda)\}$  e  $\{b_n(\lambda)\}$  de modo que

$$|u_n^{(0)}\rangle = |u_n(0)\rangle, \quad (2.40)$$

$$a_n^{(0)} = a_n(0), \quad (2.41)$$

$$b_n^{(0)} = b_n(0). \quad (2.42)$$

Os coeficientes para as várias potências de  $\lambda$  para os estados e parâmetros podem ser calculados recursivamente de acordo com a filosofia deste modelo. Vamos definir

$$|u_n(\lambda)\rangle = \sum_m |u_n^{(m)}\rangle \lambda^m, \quad (2.43)$$

$$a_n(\lambda) = \sum_m a_n^{(m)} \lambda^m, \quad (2.44)$$

$$b_n(\lambda) = \sum_m b_n^{(m)} \lambda^m. \quad (2.45)$$

Voltando-se com estas equações em 2.34, 2.37 e 2.38, podemos expandi-las em ambos os lados e coletarmos termos de mesma ordem. Feito isso, nós obtemos

$$a_n^{(l)} = \sum_{m=0}^l \langle u_n^{(m)} | \mathbf{H}_0 | u_n^{(l-m)} \rangle + \sum_{m=0}^{l-1} \langle u_n^{(m)} | \mathbf{V} | u_n^{(l-m-1)} \rangle \quad (2.46)$$

$$b_n^{(l)} = \sum_{m=0}^l \langle u_n^{(m)} | \mathbf{H}_0 | u_{n+1}^{(l-m)} \rangle + \sum_{m=0}^{l-1} \langle u_n^{(m)} | \mathbf{V} | u_{n+1}^{(l-m-1)} \rangle \quad (2.47)$$

$$\begin{aligned} |u_{n+1}^{(l)}\rangle &= \frac{1}{b_n^{(0)}} \left[ \mathbf{H}_0 |u_n^{(l)}\rangle + \mathbf{V} |u_n^{(l-1)}\rangle - \right. \\ &\quad \left. \sum_{m=0}^l \left( a_n^{(m)} |u_n^{(l-m)}\rangle + b_{n-1}^{(m)} |u_{n-1}^{(l-m)}\rangle \right) \right], \end{aligned} \quad (2.48)$$

sendo que esta última equação fica sendo a nova relação de recorrência para o modelo da cadeia perturbado, dada em 2.35. As três últimas equações juntas exibem um conjunto de propriedades úteis de uma teoria de perturbação. Se quisermos calcular a  $l$ -ésima ordem de variação em  $|u_{n+1}\rangle$ ,  $a_n$ , ou  $b_n$ ; necessitamos somente as correções de ordem menor para  $|u_{n+1}\rangle$ ,  $|u_n\rangle$ ,  $|u_{n-1}\rangle$ ,  $a_n$ ,  $b_n$  e  $b_{n-1}$ . Então, as equações acima podem ser usadas para calcular melhoramentos sucessivos em uma aproximação.

A recursão terminará quando  $b_n^{(0)}$  for zero. Entretanto, podemos ter uma cadeia para  $\mathbf{H}_0$  finita, enquanto que para  $\mathbf{V}$  não. Isto fará com que haja mais graus

de liberdade na cadeia perturbada e, portanto,  $b_n^{(0)}$  será zero na cadeia não perturbada, enquanto  $b_n^{(1)}$  não será.

Podemos ainda estender nossa análise para sistemas infinitos. Vamos considerar como os estados e parâmetros variam quando uma cadeia infinita é perturbada por um potencial  $\mathbf{V}$  mais “forte” que  $\mathbf{H}_0$ . Aplicações de  $\mathbf{V}$  a  $|u_n\rangle$  não introduzem componentes em  $|u_n^{(0)}\rangle$ ; com  $n$  aumentando, sucessivas aplicações de  $\mathbf{V}$  tendem a fazer as novas componentes cada vez maiores. Este processo é compensado divisão por divisão de  $b_n^{(0)}$  na equação 2.48. O parâmetro  $b_n^{(0)}$  representa a “intensidade” de  $\mathbf{H}_0$ . Quando  $\mathbf{V}$  é mais “forte” que  $b_n^{(0)}$ , aparece uma instabilidade caracterizada por  $\mathbf{V}$  dominar o comportamento assintótico da cadeia antes que  $\mathbf{H}_0$ . Fisicamente isto pode representar um “crossover” para algum  $\lambda$  finito, dando a intensidade necessária para  $\mathbf{V}$  dominar a cadeia assintoticamente. Este ponto será melhor discutido no próximo capítulo, entretanto já vale a pena ressaltar que, diferentemente da teoria de perturbação apresentada na seção precedente, podemos, no mínimo teoricamente, estender este método para um  $\lambda$  arbitrário.

A teoria de perturbação para  $\mathbf{H}$  tem as mesmas propriedades que fazem este método de recursão tão útil. Em qualquer computação somente um pequeno número de vetores necessitam ser estocados na memória. Isto nos leva ainda à possibilidade de aplicá-lo a sistemas com muitos graus de liberdade, não necessitando-se calcular a matriz  $\mathbf{J}$  inteiramente, como no método de Lanczos, pode-se obter bons resultados com somente algumas dimensões de  $\mathbf{J}$ .

Até aqui vimos somente o que acontece com parâmetros e estados da cadeia,

quando a hamiltoniana a ser tridiagonalizada é a matriz  $\mathbf{H}$  perturbada por alguma perturbação  $\mathbf{V}$ . Todavia, não efetuamos a diagonalização de  $\mathbf{J}$  para investigarmos os autovalores  $\mathbf{H}$  (já que como foi dito  $\mathbf{J}$  e  $\mathbf{H}$  têm os mesmos autovalores) e passamos então ao cálculo dos autoestados de  $\mathbf{H}$ . Além disso, partimos aqui da hipótese de que  $\mathbf{H}_0$  já é tridiagonal na base dos  $|u_n^{(0)}\rangle$ , o que não necessariamente precisamos no procedimento de Lanczos para  $\mathbf{H}$ .

## 2.3 O método de Lanczos e a teoria de perturbações

Apesar de termos estabelecido, na última seção, a possibilidade de se trabalhar com o processo de Lanczos sobre um sistema, que como no espírito da teoria de perturbações podia ser separado artificialmente em duas partes: a perturbada e a não perturbada; não calculamos efetivamente autovalores e autoestados do Hamiltoniano  $\mathbf{H}$ . Além disso, o quadro representado pelas equações 2.44 a 2.48, que estabelecem as ordens para os parâmetros e estados na cadeia no potencial de perturbação, é o de uma série infinita (a princípio) para a matriz  $\mathbf{J}$  dada em 2.39, desde que podemos “fatorá-la” em outras matrizes correspondentes à cada ordem dos parâmetros da cadeia. Esta complicação introduzida, não pelo método mas pela manutenção de alguns artifícios matemáticos, acabam por obscurecer os resultados mais importantes que podem ser obtidos desta aproximação.

Voltando-se para a filosofia original do método de Lanczos, podemos retomar a hamiltoniana dada na equação 2.35 e aplica-la sobre um estado inicial de nossa escolha, comparando os autovalores assim obtidos desta aproximação com os fornecidos

pela teoria de perturbação.

Escolhemos para estado inicial, um estado pertencente ao espaço de estados estacionários da hamiltoniana não perturbada, pois partimos da hipótese de que sabemos a solução de:

$$(\mathbf{H}_0 - \epsilon_n) |n\rangle = 0. \quad (2.49)$$

Tomamos então para Lanczos o estado inicial  $|u_1\rangle = |n\rangle$ . Esta escolha limitará a eficiência do método, pois é sempre possível se saber alguma “coisa” sobre a perturbação. Entretanto esta escolha será muito importante para a nossa comparação.

Aplicando-se  $\mathbf{H}$  sobre o estado inicial, obtemos:

$$\mathbf{H} |n\rangle = (\mathbf{H}_0 + \lambda \mathbf{V}) |n\rangle = \epsilon_n |n\rangle + \lambda \mathbf{V} |n\rangle. \quad (2.50)$$

Para calcularmos o primeiro elemento da matriz tridiagonal da nossa transformação, fazemos a projeção de 2.50 sobre o nosso estado inicial. Assim,

$$a_1 = \frac{\langle n | \mathbf{H} | n \rangle}{\langle n | n \rangle} = \langle n | (\mathbf{H}_0 + \lambda \mathbf{V}) | n \rangle = \epsilon_n + \langle n | \mathbf{V} | n \rangle, \quad (2.51)$$

mas truncando-se em primeira ordem a matriz tridiagonal, o termo  $a_1$  é a primeira estimativa para a energia de  $\mathbf{H}$ , ou seja,

$$E_n = \epsilon_n + \lambda \langle n | \mathbf{V} | n \rangle, \quad (2.52)$$

que é o mesmo resultado que o da teoria de perturbação em primeira ordem. Este resultado já nos mostra que o método de Lanczos, usado em sua forma original, nos permite investigar o espectro de energias de  $\mathbf{H}$ , sem a necessidade de se separar artificialmente o hamiltoniano em uma parte perturbada e outra não perturbada (observe-se ainda que o estado inicial escolhido pode ser melhorado).

Dando continuidade à transformação, vamos ao segundo passo do processo, onde calculamos os termos da matriz tridiagonal truncada em segunda ordem (construímos uma matriz  $2 \times 2$ ) com o primeiro termo sendo  $a_1$  e os outros ( $b_1$  e  $a_2$ ) sendo calculados através das eqs.1.18 e 1.19 da seção 1.1. Para isso precisamos definir o próximo vetor na hierarquia produzida por Lanczos. O próximo vetor então será dado como:

$$|u_2\rangle = \mathbf{H} |u_1\rangle - |u_1\rangle, \quad (2.53)$$

ou ainda, de 2.50 e 2.51, escrevemos

$$|u_2\rangle = \lambda \mathbf{V} |n\rangle - \lambda \langle n | \mathbf{V} | n \rangle |n\rangle. \quad (2.54)$$

Construído  $|u_2\rangle$ , podemos montar a matriz

$$\begin{pmatrix} a_1 & b_1 \\ b_1 & a_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\langle u_1 | \mathbf{H} | u_1 \rangle}{\langle u_1 | u_1 \rangle} & \frac{\langle u_1 | \mathbf{H} | u_2 \rangle}{\langle u_2 | u_2 \rangle} \\ \frac{\langle u_1 | \mathbf{H} | u_2 \rangle}{\langle u_2 | u_2 \rangle} & \frac{\langle u_2 | \mathbf{H} | u_2 \rangle}{\langle u_2 | u_2 \rangle} \end{pmatrix}. \quad (2.55)$$

Os autovalores desta matriz são então obtidos através de sua diagonalização, e conseguinte obtenção de sua equação secular. A menor raiz desta equação será tomada como a segunda aproximação para a energia do estado fundamental do sistema em consideração, ou ainda, podemos investigar outras partes do espectro, através de argumentos de simetria, por exemplo (na próxima seção ampliamos esta discussão, para o espectro de um oscilador harmônico perturbado).

## 2.4 Um exemplo: o oscilador harmônico perturbado

Estabelecidos os resultados da seção anterior, vamos aqui fazer analiticamente a transformação de um modelo para o oscilador harmônico perturbado unidimensional, via o método de Lanczos. Dada a relativa simplicidade do modelo, estaremos aptos a calcular, a cada passo do processo, as várias aproximações para a energia do estado fundamental e do próprio estado e compará-las às obtidas através da teoria de perturbações ordinária, além das propriedades da transformação discutidas e observadas anteriormente, muitas dessas relevadas na seção precedente.

Mais uma vez então, partimos do hamiltoniano total

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}_0 + \mathbf{V}. \quad (2.56)$$

Aqui a parte não perturbada do hamiltoniano pode ser escrita como

$$\mathbf{H}_0 = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\mathbf{x}^2, \quad (2.57)$$

e o potencial de perturbação sendo dado por

$$\mathbf{V} = \frac{1}{2}m\alpha^2\mathbf{x}^2, \quad (2.58)$$

desta forma é fácil ver que  $\mathbf{H}$  continua sendo o hamiltoniano de um oscilador harmônico, com frequência angular

$$\Omega = \sqrt{\omega^2 + \alpha^2}, \quad (2.59)$$

e o nosso hamiltoniano fica

$$\mathbf{H} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\Omega^2\mathbf{x}^2. \quad (2.60)$$

Neste caso então, o efeito da perturbação é simplesmente uma variação na constante elástica do oscilador harmônico. A energia exata do seu estado fundamental é então facilmente escrita como

$$E_0 = \frac{1}{2} \hbar \Omega = \frac{1}{2} \hbar \sqrt{\omega^2 + \alpha^2}. \quad (2.61)$$

Com este resultado, vamos definir um parâmetro de perturbação adimensional  $\lambda$  de forma que

$$\lambda = \frac{\alpha^2}{\omega^2} \ll 1. \quad (2.62)$$

Isto feito, podemos escrever 2.62 como

$$E_0 = \frac{1}{2} \hbar \Omega = \frac{1}{2} \hbar \omega \sqrt{1 + \lambda}. \quad (2.63)$$

Analogamente podemos ter, de uma maneira geral,

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \Omega = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega \sqrt{1 + \lambda}, \quad (2.64)$$

o espectro de energia de  $\mathbf{H}$  em função do parâmetro de perturbação  $\lambda$ .

Restringindo-nos à energia do estado fundamental, a teoria de perturbação estacionária do tipo Rayleigh-Schrödinger nos fornece esta energia (através da equação 2.26), como uma expansão em série de potências do radical da equação 2.64, ou seja,

$$E_0 = \frac{1}{2} \hbar \omega \left(1 + \frac{1}{2} \lambda - \frac{1}{8} \lambda^2 + \frac{1}{16} \lambda^3 - \frac{5}{128} \lambda^4 + \frac{7}{256} \lambda^5 - \dots\right) \quad (2.65)$$

que, como já visto, convergirá para o valor exato desde que se mantenha a idéia de pequena perturbação sobre o sistema.

Vamos, entretanto, obter a energia do estado fundamental usando Lanczos. Para isso então, o estado inicial (ou função de onda de teste) é escolhido como o

estado fundamental do hamiltoniano não perturbado  $\mathbf{H}_0$ , ou seja,

$$|u_1\rangle = |0\rangle, \quad (2.66)$$

onde sabemos que

$$\mathbf{H}_0 |u_1\rangle = \epsilon_0 |u_1\rangle, \quad (2.67)$$

e ainda que  $\epsilon_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega$ .

Para obtermos a primeira estimativa para a energia do estado fundamental, utilizamos o hamiltoniano  $\mathbf{H}$  definido nas eqs. 2.57 a 2.59 e calculamos

$$\mathbf{H} |u_1\rangle = (\mathbf{H}_0 + \mathbf{V}) |0\rangle = \frac{1}{2}\hbar\omega |0\rangle + \frac{1}{2}m\omega^2(\mathbf{x}^2 |0\rangle), \quad (2.68)$$

e fazemos a projeção sobre o estado inicial, para obter

$$E_0(1) = \langle u_1 | \mathbf{H} | u_1 \rangle = \langle 0 | \mathbf{H} | 0 \rangle = \frac{1}{2}\hbar\omega + \frac{1}{2}m\alpha^2 \langle 0 | \mathbf{x}^2 | 0 \rangle. \quad (2.69)$$

Agora, desde que podemos escrever o operador  $\mathbf{x}^2$  como

$$\mathbf{x}^2 = \frac{\hbar}{2m\omega} (a^+ + a)(a^+ + a) = \frac{\hbar}{2m\omega} (a^+a^+ + aa + a^+a + aa^+), \quad (2.70)$$

fica fácil calcular os elementos de matriz para este operador, a partir da relação

$$\mathbf{x}^2 |n\rangle = \frac{\hbar}{2m\omega} \left\{ (2n+1) |n\rangle + \sqrt{(n+1)(n+2)} |n+2\rangle + \sqrt{n(n+1)} |n-2\rangle \right\}. \quad (2.71)$$

Voltando-se com este resultado em 2.71, chegamos a

$$E_0(1) = \frac{1}{2}\hbar\omega + \frac{1}{2}\frac{\hbar\alpha^2}{\omega} = \frac{1}{2}\hbar\omega \left( 1 + \frac{1}{2}\lambda \right), \quad (2.72)$$

que é o mesmo resultado (como já esperado) da teoria de perturbação em primeira ordem (a eq.2.70 obviamente, já mostrava o mesmo resultado).

Para formarmos um novo vetor para Lanczos, voltamos à eq.2.69 e procuramos fazer com que este vetor seja ortogonal a  $|u_1\rangle$ , construindo-se

$$|u_2\rangle' = \mathbf{H} |u_1\rangle - \langle u_1 | \mathbf{H} | u_1 \rangle |u_1\rangle, \quad (2.73)$$

onde a linha sobre o novo vetor denota a sua não normalização. Portanto, de 2.69 e 2.73 e outra vez utilizando 2.71, obtemos

$$|u_2\rangle' = \mathbf{H} |0\rangle - \langle 0 | \mathbf{H} | 0 \rangle |0\rangle = \frac{1}{2} \hbar \omega \left( \frac{1}{2} \sqrt{2} \lambda \right) |2\rangle, \quad (2.74)$$

o que nos dá a função de onda ortonormal

$$|u_2\rangle = |2\rangle. \quad (2.75)$$

Com isto feito, podemos escrever a primeira iteração do procedimento de Lanczos como

$$\mathbf{H} |u_1\rangle = \frac{1}{2} \hbar \omega \left( \frac{1}{2} \sqrt{2} \lambda \right) |u_2\rangle + \frac{1}{2} \hbar \omega \left( 1 + \frac{1}{2} \lambda \right) |u_1\rangle. \quad (2.76)$$

De forma a simplificar a notação podemos definir:

$$\mathbf{h} = \frac{2}{\hbar \omega} \mathbf{H}, \quad (2.77)$$

o que nos permite escrever 2.77 como

$$\mathbf{h} |u_1\rangle = \frac{1}{2} \sqrt{2} \lambda |u_2\rangle + \left( 1 + \frac{1}{2} \lambda \right) |u_1\rangle. \quad (2.78)$$

Continuando o processo, voltamos com a hamiltoniana simplificada sobre o segundo estado gerado pelo método, para obter

$$\mathbf{h} |u_2\rangle = \left( \mathbf{h}_0 + \frac{2}{\hbar\omega} \mathbf{V} \right) |2\rangle = 2 \left( 2 + \frac{1}{2} \right) |2\rangle + \frac{m\alpha^2}{\hbar\omega} (x^2 |2\rangle), \quad (2.79)$$

pois de uma maneira geral,

$$\mathbf{h}_0 |n\rangle = 2 + \left( n + \frac{1}{2} \right) |n\rangle, \quad (2.80)$$

Mais uma vez de 2.71 ficamos com:

$$\mathbf{h} |2\rangle = \frac{\sqrt{2}\lambda}{2} |0\rangle + 5 \left( 1 + \frac{\lambda}{2} \right) |2\rangle + \sqrt{3}\lambda |4\rangle. \quad (2.81)$$

Para construirmos a matriz para o segundo passo do processo de Lanczos, projetamos a equação 2.82 nos dois vetores obtidos anteriormente fazendo-se

$$\langle 2 | \mathbf{h} | 2 \rangle = 5 \left( 1 + \frac{\lambda}{2} \right), \quad (2.82)$$

e

$$\langle 0 | \mathbf{h} | 2 \rangle = \frac{\lambda}{\sqrt{2}}. \quad (2.83)$$

A matriz tridiagonal truncada a ordem  $2 \times 2$  fica:

$$\begin{aligned} \mathbf{h}_{2 \times 2} &= \begin{pmatrix} \langle 0 | \mathbf{h} | 0 \rangle & \langle 0 | \mathbf{h} | 2 \rangle \\ \langle 2 | \mathbf{h} | 0 \rangle & \langle 2 | \mathbf{h} | 2 \rangle \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 1 + \frac{\lambda}{2} & \frac{\lambda}{\sqrt{2}} \\ \frac{\lambda}{\sqrt{2}} & 5 \left( 1 + \frac{\lambda}{2} \right) \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (2.84)$$

Para obter a segunda estimativa para a energia do estado fundamental do oscilador, calculamos o determinante associado a matriz em de 2.85 que nos leva a equação secular,

$$\left(E - 1 - \frac{1}{2\lambda}\right) \left(E - 5 - \frac{5}{2\lambda}\right) = 0, \quad (2.85)$$

cujas raízes são escritas como:

$$E_{\pm} = 3 + \frac{3\lambda}{2} + /_{-} 2\sqrt{1 + \lambda + \frac{3\lambda^2}{8}}, \quad (2.86)$$

onde a menor delas é tomada como nossa melhor aproximação. Ainda podemos comparar este resultado com a segunda ordem da série de perturbação, tomando-se a expansão de 2.87 para pequenos  $\lambda$ , nos dando:

$$E_{-}(\lambda) = 3 - \frac{3}{2}\lambda - 2\left(1 + \frac{\lambda}{2} + \frac{3}{16}\lambda^2 - \frac{1}{8}\lambda^2 + \dots\right) \approx 1 + \frac{1}{2}\lambda - \frac{1}{8}\lambda^2 \quad (2.87)$$

que se recuperada a simplificação introduzida produzimos

$$E_0(2) = \frac{1}{2}\hbar\omega \left(1 + \frac{1}{2}\lambda - \frac{1}{8}\lambda^2\right), \quad (2.88)$$

que é o mesmo resultado daquele fornecido pela teoria de perturbação em segunda ordem, porém a aproximação de Lanczos para  $E_{-}$  é melhor desde que é fácil ver destas duas últimas relações que o segundo passo de Lanczos nos dá uma aproximação para a energia do estado fundamental, que envolve melhoramentos com termos de ordem superior a segunda. Além disso, observamos que diferentemente da série de potências do parâmetro de perturbação, que a partir da primeira aproximação para a energia temos a subtração de termos de ordem superior em  $\lambda$ , acarretando (dependendo do valor de  $\lambda$ ) uma possível superação deste termo em relação ao precedente. Enquanto isso, Lanczos produz uma superestimação do resultado para depois subtrair termos de ordem superior em  $\lambda$ , nos indicando que obteremos convergência mesmo para  $\lambda > 1$ .

Estes resultados, já discutidos de maneira geral na secção precedente, podem ser melhor visualizados através da figura 4 plotada abaixo, onde comparamos efetivamente a teoria de perturbação e o método de Lanczos no que tange a eficiência e convergência indo-se até o fim do processo numericamente.

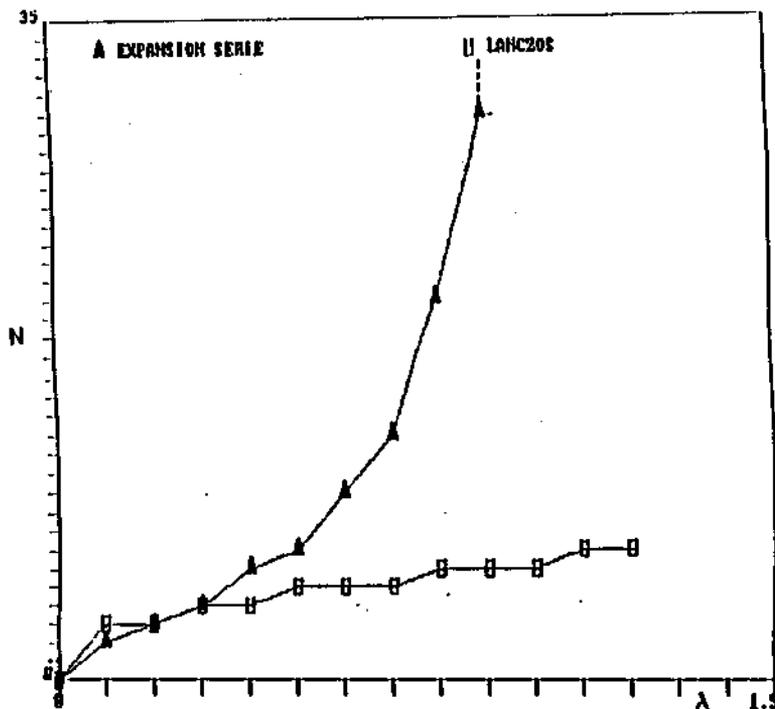


Figura 4: Gráfico do número de iterações ( $N$ ) necessárias para a convergência em função do parâmetro de perturbação ( $\lambda$ ), utilizando o método de Lanczos e a teoria de perturbações (as linhas entre pontos foram colocadas para melhor visualização). Observa-se que, mesmo para  $\lambda > 1$ , Lanczos continua nos dando convergência para a energia do estado fundamental com menos de 8 passos do processo.

Além do cálculo da energia do estado fundamental perturbado podemos es-

tudar a função de onda representativa desse estado e compararmos com o resultado obtido pela teoria de perturbação. Portanto usando teoria de perturbação obtemos a aproximação em primeira ordem para o estado fundamental, através da relação 2.28, nos levando a:

$$|0\rangle^{(1)} = |0\rangle - \sum_{m \neq 0} \frac{\langle m | \mathbf{V} | 0 \rangle}{E_m^{(0)} - E_0^{(0)}} |m\rangle, \quad (2.89)$$

e desde que

$$\mathbf{V} |0\rangle = \frac{1}{2} m \alpha^2 (\mathbf{x}^2 |0\rangle) = \frac{1}{4} \frac{\hbar \alpha^2}{\omega} (|0\rangle + \sqrt{2} |2\rangle); \quad (2.90)$$

e ainda já computamos

$$E_2^{(0)} - E_0^{(0)} = \left(2 + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega - \frac{1}{2} \hbar \omega = 2\hbar \omega, \quad (2.91)$$

chegamos a

$$|0\rangle^{(1)} = |0\rangle - \frac{1}{8} \sqrt{2} \lambda |2\rangle \quad (2.92)$$

Para obtermos agora a aproximação do estado fundamental usando o método de Lanczos, escrevemos esse estado como uma combinação linear dos dois estados gerados pelo método. Então após o segundo passo do processo escrevemos

$$|0\rangle^{(1)} = A |0\rangle - B |2\rangle \quad (2.93)$$

Testando-se o problema  $2 \times 2$ , dado pela equação 2.85, sobre o autovetor dado acima, ficamos com a seguinte relação:

$$\left(1 + \frac{1}{2} \lambda\right) A + \frac{1}{\sqrt{2}} \lambda B = \epsilon_- A \quad (2.94)$$

o que nos permite escrever

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \lambda B = \frac{A \sqrt{2}}{\lambda} \left(2 + \lambda - 2 \sqrt{1 + \lambda + \frac{3}{8} \lambda^2}\right). \quad (2.95)$$

Fazendo-se mais uma vez o limite para  $\lambda$  pequeno chegamos a relação:

$$B = \frac{-1}{4\sqrt{2}}\lambda A - \frac{\sqrt{2}}{8}\lambda A. \quad (2.96)$$

Ainda da normalização do autoestado em questão chegamos a

$$A^2 + B^2 = 1, \quad (2.97)$$

concluindo-se com a ajuda de 2.96 que  $A = 1$  e finalmente escrevemos

$$|0\rangle^{(1)} = |0\rangle - \frac{\sqrt{2}}{8}\lambda |2\rangle \quad (2.98)$$

que é o mesmo resultado obtido da teoria de perturbação em primeira ordem porém, como no caso da obtenção da energia de um modo mais eficiente e acurado.

Dando continuidade a transformação analítica do modelo, interrompida por nós no segundo passo, podemos agora escrever um estado geral para Lanczos, a partir de,

$$\mathbf{h} |2n\rangle = \mathbf{h}_0 |2n\rangle + \frac{m\alpha^2}{\hbar\omega} (\mathbf{x}^2 |2n\rangle), \quad (2.99)$$

de posse das equações 2.81 e 2.72, calculamos a relação geral de recorrência da transformação dada por Lanczos para o modelo do oscilador perturbado:

$$\begin{aligned} \mathbf{h} |2n\rangle &= (4n+1) \left[ 1 + \frac{\lambda}{2} \right] |2n\rangle + \\ &+ \frac{\lambda}{2} \sqrt{(2n+1)(2n+2)} |2n+2\rangle + \frac{\lambda}{2} \sqrt{2n(2n-1)} |2n-2\rangle \end{aligned} \quad (2.100)$$

Formamos com isso a matriz tridiagonal representativa do modelo perturbado, cujos elementos, ficam sendo

$$H_{nn} = (4n-1) \left( 1 + \frac{\lambda}{2} \right), \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (2.101)$$

com elementos da diagonal e

$$H_{n,n+1} = \frac{1}{2}\sqrt{(2n+1)(2n+2)}\lambda, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (2.102)$$

$$H_{n-1,n} = \frac{1}{2}\sqrt{2n(2n-1)}\lambda, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (2.103)$$

com elementos fora da diagonal.

Formada esta matriz, passamos a sua diagonalização e a menor raiz obtida será a  $n$ -ésima aproximação do processo para a energia do estado fundamental do oscilador harmônico perturbado em discussão. Da figura 4 entretanto, observamos que mesmo para  $\lambda > 1$ , a convergência se dá em torno de no máximo 10 iterações somente.

Uma outra observação importante de se ressaltar aqui, é a capacidade de se explorar diferentes regiões do espectro de energia com a ajuda de Lanczos. De posse da equação 2.101 notamos que partindo-se do estado inicial  $|0\rangle$ , os estados intermediários acoplados a este pelo processo, serão sempre os de simetria par, ou seja,  $|2\rangle, |4\rangle, \dots$ . Entretanto, se quisermos trabalhar com estados de simetria ímpar, essa equação nos mostra que a melhor escolha para o estado inicial seria o estado do oscilador não perturbado  $|1\rangle$ , onde obteríamos agora os estados com simetria ímpar  $|3\rangle, |5\rangle, \dots$ .

Ainda dos resultados obtidos dessa seção podemos observar a característica do método para se conseguir melhor convergência para os extremos do espectro. Ora, desde que o sistema (o oscilador) em questão tem seu espectro limitado somente pelo estado fundamental, devemos esperar uma melhor convergência para a energia desse estado. De fato, a primeira aproximação para Lanczos aqui, nos dá a primeira

aproximação para esta energia. Na segunda aproximação, entretanto,  $E_-$  é a segunda aproximação para  $E_0$  do oscilador perturbado e  $E_+$  a primeira aproximação para a energia  $E_2$  associada ao estado  $|2\rangle$ , e assim sucessivamente para outras aproximações e energias. Esta “tendência” do método à energia do estado fundamental, todavia, não obscurece o seu poder de cálculo de uma maneira geral.

## Capítulo 3

### Conclusões

De uma maneira geral mostrou-se que o Método de Lanczos é bem superior ao da teoria de perturbações, tanto no que diz respeito ao cálculo de autovalores de um sistema físico, quanto à eficiência deste cálculo (vale lembrar que trabalhamos com a pior das hipóteses, ou seja, com o espaço de estados do hamiltoniano não perturbado). Além disso, foi possível mostrar que o procedimento de Lanczos aplicado a um sistema nos dá boas estimativas da energia, mesmo para quando a teoria de perturbação não é mais válida. Isto em particular se deve ao fato dos autovalores obtidos a partir de Lanczos convergirem monotonicamente até o autovalor exato do operador estudado, enquanto que em teoria de perturbação a convergência se dá entre dois valores que dependem do “tamanho” da perturbação.

Fomos capazes também, a partir de uma revisão da literatura existente sobre o método e suas ligações, de conceber uma melhora na intelecção do método em seus aspectos matemáticos (e principalmente) físicos, de uma maneira nova e original.

A continuidade natural deste trabalho será futuramente a de estender estes

resultados a vários outros sistemas físicos. Cálculos para osciladores sujeitos a vários tipos de potencial de perturbação (linear, quártico) já têm sido feitos [16]. Ainda podemos trabalhar o método para o caso de problemas de muitos corpos, onde os cálculos computacionais podem ser desenvolvidos em sistemas finitos e depois extrapolados para o limite termodinâmico.

No que tange à estrutura do método e sua interpretação, acreditamos ainda que seja possível desenvolver um trabalho mais amplo, tanto no que diz respeito ao desenvolvimento de um sub-modelo de busca do melhor estado inicial de teste, e outro para selecionar estados com espectros degenerados; quanto ao fato mais geral de sempre podermos unidimensionalizar um sistema quântico.

# Apêndice A: Como Implementar Lanczos no Computador

Assumimos um conjunto completo de estados  $|J\rangle_J$ , de maneira que o Hamiltoniano  $\mathbf{H}$  é conhecido nesta base:

$$H(I, J) = \langle I | \mathbf{H} | J \rangle \quad (\text{A.1})$$

è dado.

Formamos inicialmente uma “Função de Onda de Teste” (F.O.T.) por:

$$|\psi(1)\rangle = \sum_{(J)} C(1, J) |J\rangle. \quad (\text{A.2})$$

A escolha desse primeiro conjunto de coeficientes  $C(1, J)_J$  deve conter todas as simetrias do estado fundamental, isso ajuda tremendamente a convergência.

Como 1<sup>o</sup> passo para o procedimento de Lanczos, geramos uma nova função de onda por aplicação do Hamiltoniano sobre a F.O.T.

$$\begin{aligned} |\tilde{\psi}(2)\rangle &= \mathbf{H} |\psi(1)\rangle \\ &= \sum_{(J)} \tilde{C}(2, J) |J\rangle \\ &= \sum_{(J)} C(1, J) \mathbf{H} |J\rangle. \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

Obtemos agora as equações que ligam os novos coeficientes  $C(2, J)$  aos antigos  $C(1, J)$ , projetando-se a nova função na base  $|J\rangle_J$

$$\langle I|\tilde{\psi}(2)\rangle = \langle I|\mathbf{H}|\psi(1)\rangle = \sum_{(J)} \tilde{C}(2, J) \langle I|J\rangle. \quad (\text{A.4})$$

Como  $\langle I|J\rangle = \delta_{IJ}$ , obtemos

$$\langle I|\tilde{\psi}(2)\rangle = \tilde{C}(2, I) = \sum_{(J)} C(1, J) \langle I|\mathbf{H}|J\rangle \quad (\text{A.5})$$

ou

$$\tilde{C}(2, I) = \sum_{(J)} C(1, J) H(I, J) \quad I = 1, 2, 3, \dots \quad (\text{A.6})$$

Em termos práticos a equação A.6 é separada na parte diagonal e não diagonal:

$$\tilde{C}(2, I) = C(1, I) H(I, I) + \sum_{(J \neq I)} C(1, J) H(I, J). \quad (\text{A.7})$$

Temos que diagonalizar a função de onda  $|\tilde{\psi}(2)\rangle = \sum_{(J)} \tilde{C}(2, J) |J\rangle$  em relação à F.O.T. inicial. Formamos assim o produto escalar:

$$S(1, 2) = \langle \psi(1)|\tilde{\psi}(2)\rangle = \sum_{(I, J)} C^*(1, I) \tilde{C}(2, J) \langle I|J\rangle. \quad (\text{A.8})$$

Supondo os coeficientes como sendo reais

$$S(1, 2) = \sum_{(J)} C(1, I) \tilde{C}(2, J). \quad (\text{A.9})$$

O Hamiltoniano já pode ser escrito na nova base

$$\begin{aligned} HH(1, 1) &= \langle \psi(1)|\mathbf{H}|\psi(1)\rangle \\ &= \langle \psi(1)|\tilde{\psi}(2)\rangle \\ &= \sum_{(I)} C(1, I) \tilde{C}(2, I) \end{aligned} \quad (\text{A.10})$$

ou

$$HH(1,1) = \sum_{(I)} C(1,I)\tilde{C}(2,I) = S(1,2). \quad (\text{A.11})$$

Portanto a primeira estimaco à energia do estado fundamental é  $HH(1,1) = E(1)$ .

A funo de onda  $|\tilde{\psi}(2)\rangle$  tem que ser no apenas ortogonalizada, mas tambm normalizada. Fazemos isso em duas etapas. Primeiramente escrevemos

$$\begin{aligned} |\psi(2)\rangle' &= |\tilde{\psi}(2)\rangle - \langle\psi(1)|\tilde{\psi}(2)\rangle |\psi(1)\rangle \\ &= |\tilde{\psi}(2)\rangle - S(1,2) |\psi(1)\rangle, \end{aligned} \quad (\text{A.12})$$

e definindo

$$|\psi(2)\rangle' = \sum_{(J)} C'(2,J) |J\rangle, \quad (\text{A.13})$$

obtemos

$$C'(2,J) = \tilde{C}(2,J) - S(1,2)C(1,J) \quad J = 1, 2, 3, \dots \quad (\text{A.14})$$

Passamos ento a definir a norma da funo como

$$\mathcal{N}(2) = \langle\psi(2)|\psi(2)\rangle' = \sum_{(J)} C'(2,J)C'(2,J) \quad (\text{A.15})$$

e a funo de onda devidamente normalizada fica

$$\begin{aligned} |\psi(2)\rangle &= \sum_{(J)} C(2,J) |J\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}(2)}} \sum_{(J)} C'(2,J) |J\rangle, \end{aligned} \quad (\text{A.16})$$

obtendo-se assim

$$C(2,J) = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}(2)}} C'(2,J) \quad J = 1, 2, 3, \dots \quad (\text{A.17})$$

Assim pudemos gerar a função  $|\psi(2)\rangle = \sum_{(J)} C(2, J) |J\rangle$  para realizar o 2<sup>o</sup> passo de Lanczos. Para isso começamos por gerar uma nova função de onda de maneira análoga à que foi feita para gerar  $|\tilde{\psi}(2)\rangle$ .

$$\begin{aligned} |\tilde{\psi}(3)\rangle &= \mathbf{H} |\psi(2)\rangle \\ &= \sum_{(J)} \tilde{C}(3, J) |J\rangle \\ &= \sum_{(J)} C(2, J) \mathbf{H} |J\rangle, \end{aligned} \tag{A.18}$$

com  $\langle I | \tilde{\psi}(3) \rangle = \tilde{C}(3, I)$  ou

$$\tilde{C}(3, I) = \sum_{(J)} C(2, J) H(I, J) \quad I = 1, 2, 3, \dots \tag{A.19}$$

Projetamos a nova função de onda agora nas funções anteriores, para obter

$$\begin{aligned} \langle \psi(1) | \tilde{\psi}(3) \rangle &= S(1, 3) = \sum_{(J)} C(1, I) \tilde{C}(3, J) \\ \langle \psi(2) | \tilde{\psi}(3) \rangle &= S(2, 3) = \sum_{(J)} C(2, I) \tilde{C}(3, J). \end{aligned} \tag{A.20}$$

Calculamos então novos elementos de matriz para o Hamiltoniano

$$\begin{aligned} HH(1, 2) &= HH(2, 1) \\ &= \langle \psi(1) | \mathbf{H} | \psi(2) \rangle \\ &= \langle \psi(1) | \tilde{\psi}(3) \rangle \\ &= S(1, 3) \end{aligned} \tag{A.21}$$

e

$$HH(2, 2) = \langle \psi(2) | \mathbf{H} | \psi(2) \rangle \tag{A.22}$$

$$\begin{aligned}
&= \langle \psi(2) | \tilde{\psi}(3) \rangle \\
&= S(2, 3).
\end{aligned}$$

Isto nos permite escrever a matriz Hamiltoniana truncada em  $2 \times 2$

$$(\mathbf{H})_{truncada} = \begin{pmatrix} HH(1, 1) & HH(1, 2) \\ HH(2, 1) & HH(2, 2) \end{pmatrix}. \quad (\text{A.23})$$

Procedendo-se a diagonalização, o estado de mais baixa energia  $E(2)$  é a segunda estimativa para a energia do estado fundamental.  $E(2)$  é comparado com  $E(1)$  através de algum critério de convergência.

A nova função de onda é ortogonalizada e normalizada.

$$\begin{aligned}
|\psi(3)\rangle' &= |\tilde{\psi}(3)\rangle - \langle \psi(1) | \tilde{\psi}(3) \rangle |\psi(1)\rangle - \langle \psi(2) | \tilde{\psi}(3) \rangle |\psi(2)\rangle \\
&= |\tilde{\psi}(3)\rangle - S(1, 3) |\psi(1)\rangle - S(2, 3) |\psi(2)\rangle \\
&= \sum_{(I)} C'(3, I) |I\rangle,
\end{aligned} \quad (\text{A.24})$$

obtendo novos coeficientes  $\tilde{C}(3, I)$  por

$$C'(3, J) = \tilde{C}(3, J) - S(1, 3)C(1, J) - S(2, 3)C(2, J) \quad J = 1, 2, 3, \dots \quad (\text{A.25})$$

Definindo a norma do estado novo,

$$\mathcal{N}(3) = \langle \psi(3) | \psi(3) \rangle' = \sum_{(J)} C'(3, J) C'(3, J), \quad (\text{A.26})$$

geramos

$$\begin{aligned}
|\psi(3)\rangle &= \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}(3)}} |\psi(3)\rangle' \\
&= \sum_{(J)} C(3, J) |J\rangle,
\end{aligned} \quad (\text{A.27})$$

com

$$C(3, J) = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}(3)}} C'(3, J) \quad J = 1, 2, 3, \dots \quad (\text{A.28})$$

Como observação estabelecemos que o critério de convergência também pode ser escrito em termos da norma  $\mathcal{N}(m)$ . É claro que o método converge quando a contribuição do novo estado é cada vez menor.

Para o  $N$ -ésimo passo de Lanczos (ou passo geral), são conhecidas as funções de onda  $|\psi(1)\rangle, |\psi(2)\rangle, \dots, |\psi(N)\rangle$ , todas elas ortogonais. Também é conhecida a matriz de Jacobi do Hamiltoniano, truncada em  $(N-1) \times (N-1)$ , e a série de valores da energia do estado fundamental  $E(1), E(2), E(3), \dots, E(N-1)$ , lembrando que tomamos a cada passo os menores valores de energia na diagonalização.

Continuando o processo, geramos

$$\begin{aligned} |\tilde{\psi}(N+1)\rangle &= \mathbf{H} |\psi(N)\rangle \\ &= \sum_{(J)} \tilde{C}(N+1, J) |J\rangle \\ &= \sum_{(J)} C(N, J) \mathbf{H} |J\rangle, \end{aligned} \quad (\text{A.29})$$

o que nos leva a

$$\tilde{C}(N+1, I) = \sum_{(J)} C(N, J) H(I, J) \quad I = 1, 2, 3, \dots \quad (\text{A.30})$$

Com isso passamos a gerar as projeções

$$\langle \psi(m) | \tilde{\psi}(N+1) \rangle = S(m, N+1) = \sum_{(J)} C(m, J) \tilde{C}(N+1, J) \quad m = 1, 2, 3, \dots \quad (\text{A.31})$$

Assim obtemos a série  $S(1, N+1), S(2, N+1), \dots, S(N, N+1)$ . Calculamos agora os novos elementos de matriz em termos dos produtos escalares

$$HH(N-1, N) = HH(N, N-1) \quad (\text{A.32})$$

$$\begin{aligned}
&= \langle \psi(N-1) | \mathbf{H} | \psi(N) \rangle \\
&= \langle \psi(N-1) | \tilde{\psi}(N+1) \rangle \\
&= S(N-1, N+1) \\
&= \sum_{(J)} C(N-1, J) \tilde{C}(N+1, J)
\end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned}
HH(N, N) &= \langle \psi(N) | \mathbf{H} | \psi(N) \rangle & (A.33) \\
&= \langle \psi(N) | \tilde{\psi}(N+1) \rangle \\
&= S(N, N+1) \\
&= \sum_{(J)} C(N, J) \tilde{C}(N+1, J)
\end{aligned}$$

e a matriz  $\mathbf{H}$  truncada à ordem  $N \times N$  é diagonalizada. É importante ressaltar aqui o fato já observado no capítulo 1 de que, a cada passo do processo, necessitamos somente dos dois últimos estados iterados, assim reduzindo sensivelmente a estocagem no computador. Podemos fazer então a  $N$ -ésima estimativa da energia  $E(N)$ . O processo converge se  $|E(N) - E(N-1)| < \Delta$ , onde  $\Delta$  é um número pequeno dado, igual à precisão numérica desejada. Se não houver convergência, o processo é continuado:

- Ortogonalização:

$$|\psi(N+1)\rangle' = |\tilde{\psi}(N+1)\rangle - \sum_{m=1}^N \langle \psi(m) | \tilde{\psi}(N+1) \rangle |\psi(m)\rangle$$

ou equivalentemente

$$C'(N+1, J) = \tilde{C}(N+1, J) - \sum_{m=1}^N S(m, N+1)C(m, J) \quad J = 1, 2, 3, \dots$$

- Normalização:

$$\mathcal{N}(N+1) = \langle \psi(N+1) | \psi(N+1) \rangle' = \sum_{(J)} C'(N+1, J) C'(N+1, J)$$

e ainda

$$\begin{aligned} |\psi(N+1)\rangle &= \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}(N+1)}} |\psi(N+1)\rangle' & (\text{A.34}) \\ &= \sum_{(J)} C(N+1, J) |J\rangle, \end{aligned}$$

gerando

$$C(N+1, J) = \frac{1}{\sqrt{\mathcal{N}(N+1)}} C'(N+1, J) \quad J = 1, 2, 3, \dots$$

e continua-se o processo até a convergência.

No caso de se ter convergência no  $N$ -ésimo passo a energia será dada por  $E(N)$ .

Passamos agora ao cálculo da função de onda variacional. Seja  $Z(n, m)$ ,  $1 \leq m, n \leq N$  a matriz da transformação da base que fornece os autovetores. Sejam

$|\phi(m)\rangle$  estes autovetores. Podemos escrevê-los em função das funções de onda obtidas no processo de Lanczos como

$$|\phi(m)\rangle = \sum_{n=1}^N Z(n, m) |\psi(n)\rangle, \quad (\text{A.35})$$

fazendo-se também

$$|\phi(m)\rangle = \sum_I \alpha(m, I) |I\rangle, \quad (\text{A.36})$$

ficamos com a expressão para os autovetores

$$|\phi(m)\rangle = \sum_I \alpha(m, I) |I\rangle = \sum_{(n, I)} Z(n, m) C(n, I) |I\rangle, \quad (\text{A.37})$$

o que nos leva a

$$\alpha(m, I) = \sum_{(n)} Z(n, m) C(n, I) \quad I = 1, 2, 3, \dots \quad (\text{A.38})$$

Em particular, se  $|\phi(1)\rangle$  é o estado fundamental, os coeficientes são dados por

$$\alpha(1, I) = \sum_{(n)} Z(n, 1) C(n, I) \quad I = 1, 2, 3, \dots \quad (\text{A.39})$$

A possibilidade do estado  $|I\rangle$  estar ocupado é

$$P_1(I) = |\alpha(1, I)|^2. \quad (\text{A.40})$$

Suponhamos então que tenhamos um observável  $\Omega$  (que está relacionado com alguma propriedade do nosso sistema) que é diagonal na representação  $|I\rangle$  e que não necessariamente comute com  $\mathbf{H}$ . Assumamos que

$$\Omega |I\rangle = \omega(I) |I\rangle \quad I = 1, 2, 3, \dots \quad (\text{A.41})$$

Logo

$$\langle \phi(1) | \Omega | \phi(1) \rangle = \sum_{(I)} \omega(I) |\alpha(1, I)|^2, \quad (\text{A.42})$$

e, portanto, posemos escrever para esse observável a relação

$$\langle \Omega \rangle = \sum_{(I)} \omega(I) |\alpha(1, I)|^2. \quad (\text{A.43})$$

# Bibliografia

- [1] C. Lanczos, J. Res. Natl. Bur. Stad., **45**, 255 (1950).
- [2] J. H. Wilkinson, *The Algebraic Eigenvalue Problem* (Clarendon Press, Oxford, 1965).
- [3] R. R. Whitehead *et al.*, Adv. Nucl. Phys., **9**, 123 (1977).
- [4] H. Mori, Jpn. Prog. Theor. Phys., **34**, 399 (1965).
- [5] R. Haydock *et al.*, J. Phys. **C8**, 2591 (1975).
- [6] J. K. Cullum and R. A. Willoughby, *Lanczos Algorithms for Large Symmetric Eigenvalue Computations*, vol.I - Theory (Progress in Scientific Computing - vol.3).
- [7] T. Sebe and J. Nachamkim, Ann. Phys., **51**, 100 (1969).
- [8] C. C. Paige, J. Inst. Math. Its. Appl., **10**, 373 (1972); **18**, 341 (1976).
- [9] R. Haydock, Sol. Stat. Phys., **35**, 215 (1980); (revisão).
- [10] R. Haydock, J.Phys. A: Math. Gen., **10**(4), 461 (1977).

- [11] R. R. Whitehead, in *Theory and Applications of Moment Methods in Many-Fermion Systems*, eds. B. J. Dalton *et al.* (Plenum Press, New York, 1980), p.235; (Revisão).
- [12] A. Tria *et al.*, *Phys. Rev.*, **B28**(4), 1859 (1983).
- [13] H. H. Romany, H. W. Wyld and L. E. Holloway, *Phys. Rev.*, **D21**, 1557 (1980).
- [14] M. Znojil, *Phys. Rev.*, **A135**(23), 87 (1991).
- [15] M. Znojil, *Phys. Rev.*, **A35**(6), 2448 (1987).
- [16] A. S. Davidov, *Quantum Mechanics* (Pergamon Press, New York).
- [17] N. H. March, W. H. Young and S Sampanthar, *The Many-Body Problem in Quantum Mechanics*, (Cambridge University Press, Cambridge, 1967).