

UNIVERZA V LJUBLJANI
FAKULTETA ZA MATEMATIKO IN FIZIKO
ODDELEK ZA FIZIKO
FIZIKA - FIZIKA KONDENZIRANE SNOVI

Jan Šuntajs

**SPEKTRALNE LASTNOSTI MODELA t - J IN
VEČDELČNA LOKALIZACIJA**

Magistrsko delo

MENTOR: prof. dr. Janez Bonča
SOMENTOR: doc. dr. Lev Vidmar

Ljubljana, 2018

Zahvala

Na prvem mestu se zahvaljujem mentorjema Levu Vidmarju in Janezu Bonči, ki sta me seznaniła s področjem večdelčne lokalizacije in me pri raziskovanju usmerjala ter podpirala z nasveti. Izračun spektralnega oblikovnega faktorja bi bil veliko težji brez razlag Tomaža Prosena, Marka Žnidariča in Pavla Kosa, ki se jim za čas in trud posebej zahvaljujem. Za pomoč pri programerskih vprašanjih in potrpežljivost pri razlagi uporabljenih numeričnih metod se zahvaljujem Galu Lemutu, Alenu Horvatu in Janu Kogoj. Zahvaljujem se tudi vsem profesorjem in asistentom, ki so me med študijem naučili osnov kvantne mehanike in fizike kondenzirane snovi.

Velika zahvala gre prijateljem, v družbi katerih so študijska leta hitro minila in se jih bom z veseljem spominjal. Nazadnje se zahvaljujem najpomembnejšim - staršema Ester in Matjažu, bratu Primožu z Majo in družino ter Sari, Barbari in Marku. Brez vaše podpore bi bilo vse skupaj veliko težje. Hvala.

Izvleček

V magistrskem delu preučujemo prehod med ergodično in večdelčno lokalizirano (ang. *many-body localized*, v nadaljevanju MBL) fazo v modelu t - J ob prisotnosti spinskega oziroma potencialnega nereda. Pri tem se osredotočimo na primera dopiranja z eno vrzeljo in tretjinskega dopiranja z vrzelmi, prehod med fazama pa zasledujemo kot funkcijo velikosti ustreznega tipa nereda v sistemu. Naša numerična analiza temelji na polni diagonalizaciji modelskih hamiltonk, pri presoji ergodičnosti oziroma večdelčne lokaliziranosti pa uporabljamo tri različne indikatorje, katerih lastnosti se v ergodičnem oziroma MBL primeru bistveno razlikujejo. Izračuna povprečnega razmerja razmikov med sosednjimi energijskimi nivoji $\langle \tilde{r} \rangle$ in *spektralnega oblikovnega faktorja* (ang. *spectral form factor*, v nadaljevanju SFF) temeljita na analizi statističnih lastnosti energijskih spektrov modelskih hamiltonk, medtem ko je tretji indikator izračun prepletenostne entropije vseh lastnih stanj sistema. Izračunane vrednosti $\langle \tilde{r} \rangle$ in SFF se v ergodični fazi ujemajo z vrednostmi, ki jih dobimo z izračunom omenjenih količin v t.i. gaussovskem ortogonalnem ansamblu (v nadaljevanju GOE) naključnih matrik. Na drugi strani dobimo v primeru nastopa MBL rezultate, značilne za sisteme, v katerih so energijski nivoji medsebojno neodvisno porazdeljeni v skladu s Poissonovo verjetnostno porazdelitvijo. V primeru izračuna prepletenostne entropije je za ergodične sisteme značilno volumsko skaliranje prepletenostne entropije visoko vzbujenih lastnih stanj v spektru. V MBL sistemih so vsa lastna stanja v spektru šibko prepletena in je zanje značilno površinsko skaliranje prepletenostne entropije. V modelu t - J za primer tretjinskega dopiranja z vrzelmi vsi naši indikatorji nakazujejo, da povečevanje nereda v sistemu vodi do prehoda med ergodično in MBL fazo tako v primeru spinskega kot potencialnega nereda. Enako velja za primer dopiranja z eno vrzeljo ob prisotnosti spinskega nereda, medtem ko se zdi primer ene vrzeli in potencialnega nereda drugačen od preostalih. Naši indikatorji namreč nakazujejo, da povečevanje nereda v tem primeru ne vodi do prehoda v MBL fazo. Kolikor nam je znano, je naše delo eden izmed prvih primerov uporabe izračuna SFF pri presoji ergodičnosti oziroma večdelčne lokaliziranosti preučevanih sistemov. Zaradi enostavne implementacije je v literaturi pogosta uporaba izračuna $\langle \tilde{r} \rangle$, pri katerem upoštevamo le korelacije med najbližjimi nivoji v energijskem spektru. Pri izračunu SFF na drugi strani upoštevamo korelacije med vsemi energijskimi nivoji v spektru, s čimer za ceno zahtevnejše implementacije dobimo precej podrobnejši vpogled v lastnosti sistema, denimo v obnašanje sistema na različnih časovnih skalah. Kot pokažemo, je naša presoja ergodičnosti oziroma večdelčne lokaliziranosti na podlagi izračunov SFF konsistentna s presojo na podlagi izračunov $\langle \tilde{r} \rangle$.

Ključne besede: model t - J , nered, večdelčna lokalizacija, statistika energijskega spektra, spektralni oblikovni faktor, prepletenostna entropija
PACS: 71.23.-k, 71.27.+a, 71.30.+h, 71.10.Fd

Abstract

In this final thesis we investigate the transition between the ergodic and many-body localized (MBL) phase in the t - J model in the presence of spin or potential disorder. We concentrate on the two distinct cases, namely the case of one-hole doping and the case of one-third doping, where the transition between phases is investigated as a function of the magnitude of the appropriate type of disorder. Our numerical approach is based on full numerical diagonalization of the model Hamiltonians, where three different indicators are used in order to test the systems for their ergodic or MBL properties. The calculations of the mean ratio of the adjacent level-spacings $\langle\tilde{r}\rangle$ and of the spectral form-factor (SFF) are based on the analysis of the statistical properties of the investigated Hamiltonians' energy spectra. The third indicator we use is the calculation of the entanglement entropy of all system's eigenstates. In the ergodic phase, the calculated values of $\langle\tilde{r}\rangle$ and SFF match the ones obtained in the so-called gaussian orthogonal ensemble (GOE) of random matrices. The results are completely different in the MBL phase where they match those for systems in which the energy levels are distributed independently according to the Poisson probability distribution. The entanglement entropy of the highly excited eigenstates in the ergodic regime obeys the so-called volume-law scaling while in the MBL phase all the states in the spectrum are weakly entangled and thus obey the area law scaling of the entanglement entropy. All of our indicators imply that an increase in system's disorder leads towards a transition between an ergodic and the MBL phase in the case of one-third doping for both spin and potential disorder. The same holds true in the case of one-hole doping in the presence of spin disorder while the case of only one hole and potential disorder is somewhat different from the remaining ones. As our indicators show, an increase in disorder does not lead towards a transition in the MBL phase in this case. As far as we know, we are among the very first to use the calculation of SFF as an indicator of system's ergodicity or the presence of MBL. Due to its rather simple implementation, the calculation of $\langle\tilde{r}\rangle$ is commonly used in order to test for ergodicity or the presence of MBL in a given system. In calculating $\langle\tilde{r}\rangle$, we only consider the correlations between the nearest levels in an energy spectrum. The calculation of SFF, on the other hand, accounts for correlations between all the energy levels in the spectrum. It thus allows for a more comprehensive insight in the system's properties, such as its behaviour at different time scales, at the expense of a more involved numerical implementation. In terms of determining the systems' ergodicity or the presence of MBL, the results of our SFF calculations match the predictions of our $\langle\tilde{r}\rangle$ calculations.

Keywords: t - J model, disorder, many-body localization, energy spectrum statistics, spectral form factor, entanglement entropy

PACS: 71.23.-k, 71.27.+a, 71.30.+h, 71.10.Fd

Kazalo

Seznam slik	11
1 Uvod	17
2 Od Andersonove do večdelčne lokalizacije	21
2.1 Andersonova lokalizacija in osnove neurejenih sistemov	21
2.1.1 Opis prevodnosti pred teorijo lokalizacije in po njej	22
2.1.2 Ojačano povratno sipanje	23
2.1.3 Skalirna teorija lokalizacije	24
2.1.4 Vpeljava nereda in Andersonov model	25
2.2 Lokalizacija v sistemih z meddelčnimi interakcijami	29
2.2.1 Fizika zaprtih kvantnih sistemov	31
2.2.2 Hipoteza termalizacije lastnih stanj	32
2.2.3 Značilnosti MBL sistemov	33
3 Modeli in metode	37
3.1 Fermionski modeli brez spinskih prostostnih stopenj	37
3.2 Fermionski modeli s spinskimi prostostnimi stopnjami	39
3.2.1 Hubbardov model	39
3.2.2 Model t - J	40
3.3 Točna diagonalizacija modelskih hamiltonk	43
4 Statistične lastnosti hamiltonskih spektrov	47
4.1 Statistika sosednjih energijskih nivojev	47
4.1.1 Wigner-Dysonova statistika razmikov med sosednjimi nivoji	48
4.1.2 Poissonova statistika razmikov med sosednjimi nivoji	49
4.1.3 Statistika razmerij odmikov sosednjih nivojev \tilde{r}	50
4.1.4 Razgrnjenje spektra	51
4.1.5 Lokalni zlom simetrije	53
4.1.6 Rezultati	53
4.2 Spektralni oblikovni faktor	56
4.2.1 Vpeljava	56
4.2.2 Rezultati	59
5 Prepletenostna entropija	63
5.1 Vpeljava	63
5.2 Rezultati	65
6 Zaključek	69

Literatura	71
Dodatek A Preslikava med Hubbardovim modelom in modelom t-J	75
A.1 Primer brez nereda	75
A.2 Dodatek nereda	77

Seznam slik

2.1	Teorija Andersonove lokalizacije napove možnost lokalizacije kvantnomehanskih stanj zaradi naključnih potencialov. a) Primer razsežnega stanja. b) Lokalizirano stanje, katerega ovojnica eksponentno pojema z razdaljo od neke točke v prostoru. ξ je lokalizacijska dolžina.	22
2.2	Shematski prikaz valovnega paketa, ki se preko poti I skozi točko B vrne v izhodično točko A. Pot II je enaka poti I, le da je obrnjena v času. Slika je bila vzeta iz [25].	23
2.3	Skalirna teorija napove fazni prehod med prevodnikom in izolatorjem le v treh dimenzijah, saj v nižjedimenzionalnih sistemih prevodnost z velikostjo sistemov vselej pada. Slika je bila vzeta iz [25].	25
2.4	Od leve proti desni in od zgoraj navzdol so razzvrščeni shematski prikazi idealnega kristala, kompozicijsko neurejenega sistema, strukturno neurejenega sistema in sistema s kinetičnim neredom.	26
2.5	Shematski prikaz Andersonovega modela v dveh dimenzijah. Slika je bila vzeta iz [25].	27
2.6	a) Shematski prikaz potencialnih jam za hamiltonko v približku tesne vezi ob odsotnosti nereda. b) Potencialne jame v Andersonovem modelu z naključnim potencialom. Na desni sta v obeh primerih shematsko prikazani gostoti stanj v treh dimenzijah. Uvedba nereda razširi pas in odpravi singularnosti gostote stanj. Slika je bila vzeta iz [32].	27
2.7	Shematski prikaz tipične gostote stanj v odvisnosti od energije za tridimenzionalni Andersenov model za neko podkritično vrednost nereda, $W < W_c$. Stanja v robovih pasu (ki sta obarvana rdeče) so lokalizirana, medtem ko so stanja v sredini pasu (ki je obarvana modro) razsežna. E_c in E'_c označujeta roba mobilnosti, EXT pa razsežna stanja.	28
2.8	Primer časovnega razvoja začetnega stanja v primeru brez nereda in z močnim neredom ($W = 3.0$). Pri tem t označuje čas, j pa mesto v enodimenzionalni verigi. Za medmrežno razdaljo smo privzeli $a = 1$, enako tudi za enoto časa.	29
2.9	a) Pri običajnem kvantnostatističnem opisu sistema privzamemo njegovo sklopitev z zunanjim rezervoarjem, s katerim lahko izmenjuje denimo energijo in delce. b) Tu obravnavamo zaprte oziroma izolirane kvantne sisteme, katerih dinamiko določa unitaren časovni razvoj začetnih stanj. Slika je bila vzeta iz Ref. [33].	31

2.10	Shematski prikaz razlike med unitarnim časovnim razvojem netipične začetne konfiguracije interagirajočih delcev v ergodičnem in MBL režimu, kjer je netipičnost dosežena z alternirajočo zasedenostjo mest na kristalni verigi. V prvem primeru sistem sčasoma relaksira proti ravnovesni enakomerni porazdelitvi delcev, medtem ko se tovrstna relaksacija v MBL fazi ne zgodi - tudi po dolgem času sistem ohrani spomin na netipičnost začetnega stanja. Slika je bila vzeta iz Ref. [1].	34
2.11	Ilustrativen primer uporabe spektralne statistike za presojo ergodičnosti oziroma lokaliziranosti sistema. Prikazana je porazdelitev statistike sosednjih energijskih nivojev za model t - J z naključnim potencialnim neredom, v katerem pride do prehoda med ergodično in MBL fazo. Formalno je model vpeljan v poglavju 3.2. V ergodičnem primeru se mora statistika ujemati z rdečo Wigner-Dysonovo krivuljo, v MBL primeru pa z zeleno Poissonovo krivuljo. Razlogi so razloženi v poglavju 4.	35
2.12	Shema v pomoč k vpeljavi pojma prepletenostne entropije. Izoliran kvantni sistem razdelimo na podsistema A in B. Slika je bila povzeta po Ref. [33].	35
3.1	a) in b) Shematski prikaz modela XXZ oziroma modela t - V v eni dimenziji in ekvivalence med njima. Rumene puščice označujejo interakcijo. c) Prehod med MBL in ergodično fazo pri fiksnem W v odvisnosti od J_z . Točka $J_z = 0$ ustreza Andersonovemu izolatorju. d) Prehod med ergodično in MBL fazo kot funkcija parametra nereda W . Lokalizacija nastopi nad kritično vrednostjo W^* . Slika je bila vzeta iz Ref. [1].	39
3.2	Shematski prikaz modela t - J na verigi z $L = 7$ mesti, $N_h = 2$ vrzelma in $N_u = 2$ navzgor obrnjenima spinoma in odprtimi robnimi pogoji. J označuje velikost izmenjalne interakcije med spini sosednjih elektronov, ki obrne par nasprotno obrnjenih spinov (ang. <i>spin-flips</i>). Verjetnost za tuneliranje elektrona na prazno mesto označuje t .	42
3.3	Naključne vrednosti magnetnega polja w_i in potenciala h_i tipično izžrebam v skladu s škatlasto verjetnostjo porazdelitvijo, kjer sta W in H parametra nereda.	42
3.4	Odvisnost števila stanj od velikosti sistema in števila dopantov (vrzeli) razkrije, da smo pri študijah s polno diagonalizacijo precej omejeni s številom dostopnih sistemov, ki so nam na voljo, kar precej oteži skalirno analizo, s katero bi radi napovedali obnašanje sistema v termodinamski limiti neskončnega sistema.	42
3.5	Primeri energijskih spektrov pri $L = 13$, $N_h = 1$, $N_u = 6$. Prikazani so rezultati za različne vrednosti parametrov W in H , pri čemer so rezultati za spinski nered vsakokrat izračunani s povprečenjem po 100 realizacijah nereda, rezultate za potencialni nered pa s povprečenjem po 600 realizacijah. Pri dopiranju z eno samo vrzeljo opazimo, da je vpliv povečevanja spinskega nereda na spekter znatno večji od vpliva povečevanja potencialnega nereda. Razlog povprečenja po večjem številu realizacijah spinskega nereda je naveden v komentarju k Sliki 3.6.	43

- 3.6 Normalizirano število stanj na energijski interval za spektre, prikazane na Sliki 3.5. V primeru spinskega nereda ima gostota stanj vselej izrazit vrh na sredini spektra. Oscilacije v primeru velikega potencialnega nereda $H = 12$ so najverjetneje posledica prisotnosti zgolj ene vrzeli. Slednjo lahko na L mest razporedimo na L načinov, toliko je tudi različnih matričnih elementov v (diagonalnem) naključnem potencialnem členu H_u . Pri velikih parametrih nereda H , kot je na naši energijski skali npr. $H = 12$, postane prispevek člena H_u v hamiltonki dominanten, zato opazimo oscilacije gostote stanj. Lokalni minimumi slednje ločijo ravno $L = 13$ različnih sektorjev. Grafe za spinski nered smo izračunali s povprečenjem po 100 realizacijah nereda, grafe za potencialni nered pa smo preizkušali povprečenja z med 100 in 600 realizacijami. Kvalitativno se ne zdi, da bi večje povprečenje bistveno spremenilo obliko krivulje, zato je na grafu prikazan le primer povprečenja po 600 vzorcih. 44
- 3.7 Energijski spektri v primeru spinskega in potencialnega nereda za tretjinsko dopiranje na sistemu z $N_{\text{stat}} = 34650$ stanji. V tem primeru sta vpliva spinskega in potencialnega nereda na širino spektra dokaj podobna. Energijsko skalo prispevka spinskega nereda ocenimo kot $(L - N_h) \cdot \frac{W}{2}$, kjer s faktorjem $\frac{1}{2}$ upoštevamo velikost spina v izrazu za zeemansko sklopitev spinov z magnetnim poljem. Energijsko skalo potencialnega nereda podaja vrednost $N_h \cdot H$. Zaradi razmeroma velikih sistemov smo povprečenje izvedli po 50 naključnih vzorcih za vsak tip nereda. 44
- 3.8 Gostota stanj za primer s tretjinskim dopiranjem in spinskim oziroma potencialnim neredom. Oscilacij gostote stanj v primeru potencialnega nereda tokrat ne opazimo. 45
- 4.1 Numerično izračunana statistika razmikov med sosednjimi energijskimi nivoji za model t - J , $L = 13$, $N_h = 1$, $N_u = 6$. Uporabili smo vrednosti modelskih parametrov $t = 1$ in $J = 1$, ki sta od tu naprej za vse prikazane simulacije enaki. Na podlagi komplementarnih študij časovne dinamike modela [26] smo izbrali vrednosti parametra spinskega nereda W , za katere je obnašanje sistema poznano. Pri $W = 0$ je sistem ergodičen, kar je razvidno iz ujemanja numeričnih izračunov s krivuljo Wigner-Dysonove statistike, podobno je pri $W = 12$ dobro ujemanje s krivuljo Poissonove statistike. V vmesnem režimu se numerično izračunane vrednosti ne ujemajo z nobeno od teoretičnih napovedi. Pri dani konfiguraciji ima model 12012 stanj, rezultati pa so izračunani s povprečenjem po 100 realizacijah spinskega nereda. Natančne podrobnosti numerične implementacije so podane v naslednjem poglavju. 51
- 4.2 Desetiški logaritem absolutne vrednosti razlike med numerično vrednostjo in teoretično napovedjo za primere izračunov, predstavljene na Sliki 4.1. Vsakokrat sta za primerjavo predstavljena izračuna za Wigner-Dysonovo in Poissonovo statistiko. 51

- 4.3 Primer razgrnitve spektra za sistem z $L = 5$, $N_h = 3$ in $N_u = 1$, ki ima 20 stanj. Ker napovedi RMT dobro veljajo za stanja v središču spektra [16], poleg tega so stanja na robovih spektra občutljivejša na učinke končne velikosti sistema, v izračunih v spektru vselej upoštevamo le polovico stanj med prvim in zadnjim kvartilom vseh stanj, zato je na grafu prikazanih le 10 točk. Kot najprimernejša izbira za glajenje porazdelitve se v tem primeru izkaže kar polinom stopnje 2, pri prevelikih vrednostih n nastopijo težave s slabo pogojenostjo polinomov. Pri večjih sistemih smo tipično uporabljali $n = 15$ 52
- 4.4 Povprečna vrednost $\langle \tilde{r} \rangle$ ob odsotnosti vsakršnega nereda pri skupnem povečevanju parametrov W_{sym} in H_{sym} . V kolikor so v spektru prisotne nezlomljene simetrije, potem statistika ob odsotnosti nereda ni dobro definirana in vrne napačen rezultat. Za vse prikazane velikosti sistema degeneracije učinkovito odpravi vrednost $W_{\text{sym}} = H_{\text{sym}} = 0.5$, pri čemer vrednost z naraščajočim L pada. Z rdečo in zeleno premico sta označeni vrednosti $\langle \tilde{r} \rangle_{\text{GOE}}$ oziroma $\langle \tilde{r} \rangle_{\text{Poisson}}$ 53
- 4.5 Zaradi majhnega števila primernih sistemov (sistemi z $L < 9$ imajo premalo stanj za primerno statistiko, sistemi z $L > 15$ so preveliki za naše računske zmogljivosti) je skalirna analiza, ki bi omogočila ekstrapolacijo rezultatov proti termodinamski limiti neskončnega sistema, razmeroma zahtevna če ne nemogoča naloga. Kljub temu lahko sklepamo, da v primeru ene vrzeli povečevanje spinskega nereda vodi do prehoda v MBL režim, medtem ko nered, ki se sklaplja z vrzeli, ne pripelje do večdelčne lokalizacije. Nekoliko presenetljivo se zdi, da se v primeru vrzelnega nereda vrednost $\langle \tilde{r} \rangle$ z naraščanjem L pomika navzdol, saj bi v termodinamski limiti pričakovali, da bo prispevek nereda na eni vrzeli zanemarljivo majhen. 54
- 4.6 Pri tretjinskem dopiranju se zdi, da lahko oba tipa nereda pripeljeta do večdelčne lokalizacije. Krivulja za $L = 6$ je statistično nepomembna, saj ima ta sistem zgolj 90 stanj, kar je očitno premalo za zanesljivo statistiko. Fluktuacije povprečnih količin namreč padajo z velikostjo sistema. Zaradi omejenega števila sistemov, ki so na voljo za preučevanje, je skalirna analiza, s katero bi določil, kje v termodinamski limiti neskončnega sistema pride do prehoda med MBL in ergodičnim sistemom, otežena. 54
- 4.7 Vrednosti $\langle \tilde{r} \rangle$ v odvisnosti od H in W za primer dopiranja z eno vrzeljo pri velikosti sistema $L = 11$ ter povprečenjem po 500 naključnih realizacijah za obe vrsti nereda. Modra oz. temnejši toni označuje(jo) MBL režim, rumeni in zeleni odtenki pa pomenijo ergodičnost. Pri majhnem spinskem neredu opazimo, da še tako velike vrednosti H ne pripeljejo do lokalizacije. 55
- 4.8 Sprehod po prostoru parametrov H in W pri izračunu $\langle \tilde{r} \rangle$ še za primer tretjinskega dopiranja in ponovno povprečenja po 500 naključnih realizacijah nereda, $L = 9$. Spreminjanje obeh parametrov vodi do lokalizacije, pri čemer se zdi vloga obeh parametrov dokaj enakovredna. 55

- 4.9 Izračun $K(\tau)$ in $K_c(\tau)$ v ergodičnem ($W = 1$) in MBL ($W = 6$) primeru za model t - J brez vrzeli in naključnim magnetnim poljem, ki ustreza izotropnemu Heisenbergovemu modelu z $J = 1$, ki ga podaja En. (3.2). Prehod med ergodično in lokalizirano fazo nastopi pri kritični vrednosti parametra nereda $W^* \approx 3.5$ [35]. Levo: za kratke čase zavzame $K(\tau)$ največjo vrednost, nato v neuniverzalnem režimu pada. V ergodičnem primeru neuniverzalnemu obnašanju sledi linearna rast v skladu z En. (4.22), ki jo označuje rdeča črtkana črta. V MBL primeru linearne rasti ne opazimo, po neuniverzalni relaksaciji ostane $K(\tau)$ enak konstanti. Desno: izračun $K_c(\tau)$, kjer smo od $K(\tau)$ odšteli neuniverzalne prispevke členov z velikimi razlikami energij. Pred izračunom obeh količin smo energijska spektra razgrnili in kot v predhodnem poglavju upoštevali le polovico vrednosti med prvim in zadnjim kvartilom. Čas τ je podan v enotah τ_H , povprečenje pa smo izvedli po 500 različnih realizacijah nereda. 58
- 4.10 $K(\tau)$ in $K_c(\tau)$ pri različnih vrednostih parametra velikosti spinskega nereda W . S povečevanjem W se univerzalni linearni del krivulje, ki sovпада s krivuljo $K_{\text{GOE}}(\tau)$, manjša, odvisnost pa se v univerzalnem območju vse bolj približuje napovedi $K_{\text{Poisson}}(\tau)$. Ujemanje rezultatov s teoretičnimi napovedmi je podrobneje predstavljeno na Sliki 4.12 . . . 59
- 4.11 V primeru spreminjanja parametra velikosti potencialnega nereda H so rezultati za dopiranje z eno vrzeljo bistveno drugačni kot pri povečevanju spinskega nereda, saj odvisnost $K(\tau)$ pri preizkušenih vrednostih nikoli ne doseže konstantne vrednosti $K_{\text{Poisson}}(\tau)$. Krivulje za $H = 10$, $H = 12$ in $H = 14$ sovpadajo, zato se zdi, da potencialni nered ne more povzročiti prehoda v MBL fazo. Ujemanje rezultatov s teoretičnimi napovedmi je podrobneje predstavljeno na Sliki 4.12. . . 59
- 4.12 Odstopanje numeričnih izračunov pri nekaj različnih vrednostih parametrov spinskega in potencialnega nereda od teoretične napovedi $K_{\text{GOE}}(\tau)$. Pri prvih treh vrednostih potencialnega nereda lahko jasno razločimo območje neuniverzalne relaksacije in območje univerzalne linearne rasti, ko se odstopanje ustali in fluktuira okrog povprečne vrednosti. Zgolj na podlagi relativnega odstopanja v mejnih primerih ne moremo presojati ergodičnosti oziroma prisotnosti večdelčne lokalizacije v sistemu, o čemer priča primer pri $H = 14.00$. Relativno odstopanje kaže na odsotnost linearne naraščanja za $\tau \leq \tau_H$, vendar izračuni, prikazani na Sliki 4.11, nakazujejo, da sistem nima Poissonove spektralne statistike. 60
- 4.13 Zgoraj: izračun $K(\tau)$ in $K_c(\tau)$ pri različnih velikostih parametra spinskega nereda W za primer tretjinskega dopiranja. Povečevanje W vodi do prehoda iz ergodične v MBL fazo. Spodaj: enak izračun, le da za povečevanje parametra potencialnega nereda H . Tudi v tem primeru povečevanje parametra vodi do prehoda. V obeh primerih smo izračune dobili s povprečenjem po 500 realizacijah naključnega nereda. 61
- 4.14 Relativno odstopanje numerično izračunane vrednosti $K_c(\tau)$ od teoretične napovedi $K_{\text{GOE}}(\tau)$ - enak izračun kot na Sliki 4.12, le da za primer tretjinskega dopiranja. 62

- 5.1 Prikaz volumskega in površinskega skaliranja prepletenostne entropije S_A lastnih stanj sistema. Predstavljene so povprečne vrednosti prepletenostne entropije za lastna stanja v sredini pasu. Zgoraj: odvisnost prepletenostne entropije od velikosti podsistema L_A pri fiksni velikosti sistema L . Pri volumskem skaliranju S_A v termodinamski limiti neskončnega sistema narašča sorazmerno z L_A , v primeru površinskega skaliranja pa je S_A v eni dimenziji za vse velikosti podsistemov enak konstanti. Spodaj: skaliranje prepletenostne entropije pri bipartitiji na dva enaka podsistema v odvisnosti od velikosti sistema L . V limiti $L \rightarrow \infty$ velja v primeru volumskega skaliranja $S_A/L = \text{const.}$, v primeru površinskega skaliranja pa $S_A/L = 0$. Izračune smo izvedli za model t - J brez vrzeli, ki ustreza izotropnemu Heisenbergovemu modelu z $J = 1$ z dodatkom nereda. Kot nakazujejo numerične študije, nastopi prehod med ergodično in MBL fazo v okolici $W = 3.5$ [35] [27]. 64
- 5.2 Levo: gostotna ploskev prepletenostne entropije, deljene z maksimalno prepletenostno entropijo podsistema, za vsa lastna stanja pri različnih vrednostih spinskega nereda W za Heisenbergov izotropni model z $J = 1$ pri simetrični bipartitiji. Rumeni toni ustrezajo ergodični, modri pa MBL fazi. Maksimalna entropija podsistema v Heisenbergovem modelu znaša $L_A \log(2)$. Ker računamo v bloku s skupnim spinom $S^z = 0$, je število stanj manjše in smo maksimalno entropijo sistema precenili. Z rdečo so označene točke, kjer je dosežena polovična vrednost na intervalu med največjo in najmanjšo izračunano vrednostjo prepletenostne entropije. Desno: prepletenostna entropija vseh lastnih stanj v čistem primeru ob odsotnosti nereda. V tem primeru povprečenje po energijskih intervalih, opisano v besedilu, ni bilo izvedeno. 65
- 5.3 Izračun prepletenostne entropije v primeru dopiranja z eno vrzeljo in spreminjanja parametra spinskega nereda. V skladu z rezultati, predstavljenimi v poglavju 4, opazimo, da spreminjanje parametra spinskega nereda vodi do prehoda med ergodično in lokalizirano fazo. Za velikosti parametra nereda, večje od $W = 8$, so namreč vsa stanja v spektru šibko prepletena. 66
- 5.4 V primeru potencialnega nereda in dopiranja z eno vrzeljo spreminjanje velikosti parametra nereda ne vodi do prehoda v lokalizirano fazo. V nasprotju s primerom s prisotnim spinskim neredom ostanejo stanja na razmeroma širokem energijskem intervalu tudi pri velikem neredu precej prepletena. 66
- 5.5 V primeru tretjinskega dopiranja z vrzelmi rezultati izračuna prepletenostne entropije napovedo možnost prehoda med ergodično in lokalizirano fazo za oba tipa nereda. 67

Poglavje 1

Uvod

Nastop *večdelčne lokalizacije* (ang. *many-body localization*, v nadaljevanju MBL) v izoliranih neurejenih kvantnomehanskih sistemih s prisotnostjo meddelčnih interakcij vodi do osupljivih lastnosti tovrstnih sistemov. Med njimi je poglavitna in najočitnejša odsotnost termalizacije, sicer značilne za generične večdelčne sisteme z ergodično dinamiko. V termodinamski limiti unitaren dolgočasovni razvoj poljubnih začetnih stanj ergodičnih sistemov vodi do ravnovesja, v katerem so pričakovane vrednosti kvantnomehanskih opazljivk identične ustreznim kvantnomehanskim ansambelskim povprečjem. Pojav je v literaturi poznan kot *hipoteza termalizacije lastnih stanj* (ang. *eigenstate thermalization hypothesis*.) [16]. Zaradi odsotnosti sklopitve z zunanjim rezervoarjem je tovrstna relaksacija neravnovesnih začetnih stanj proti ravnovesnim termalnim vrednostim v izoliranem sistemu možna, če prisotnost interakcij v sistemu deluje kot efektivna toplotna kopel. To pomeni, da se mora podsystem z makroskopsko zanemarljivim deležem prostostnih stopenj celotnega sistema s preostankom sistema sklapljati podobno, kot se v običajni formulaciji statističnomehanskih ansambllov sistemi sklapljajo z zunanjim rezervoarjem [1] [33].

Skupaj z integrabilnimi sistemi predstavljajo MBL sistemi pomemben protiprimer zgoraj opisani dinamiki ergodičnih sistemov. Dolgočasovni razvoj poljubnega začetnega stanja vodi v ergodičnem in MBL sistemu do povsem različnih rezultatov. Medtem ko pri prvem pričakovane vrednosti lokalnih opazljivk po dolgem času ustrezajo vrednostim ansambelskih povprečij, ki so odvisne le od nekaj dobro definiranih makroskopskih količin, denimo energije in števila delcev, je obnašanje MBL sistemov popolnoma drugačno. ‘Spomin’ na lastnosti začetne konfiguracije se namreč v pričakovanih vrednostih lokalnih opazljivk ohrani tudi po neskončnem času. Ker termalizacija poteka prek izmenjave delcev in energije med različnimi deli ergodičnega sistema, torej preko različnih transportnih mehanizmov, so, v nasprotju s tipično prevodnimi termalizirajočimi sistemi, lokalizirani sistemi izolatorji. V neurejenih sistemih *neinteragirajočih* delcev je tovrstno obnašanje dobro poznano [25] [2] in dolgo preučevano, saj je P.W. Anderson v svojem prelomnem članku [6] že leta 1958 pojasnil vlogo nereda pri prehodu med prevodnim in izolatorskim obnašanjem v preprostem modelu tesne vezi ob prisotnosti naključnih potencialov. Omenjeni mehanizem izogibanja termalizaciji v neinteragirajočih sistemih danes imenujemo *Andersonova lokalizacija*, sistemi, v katerih je realiziran, pa so Andersonovi izolatorji. Ob dovolj močnem potencialnem neredu so vse enodelčne valovne funkcije tovrstnih sistemov lokalizirane, pri čemer njihova verjetnostna gostota pojema eksponentno

z razadaljo od neke točke v prostoru. V nasprotju s prostorsko razsežnimi valovnimi funkcijami lokalizirane funkcije ne prispevajo k transportu v sistemu in tako preprečujejo termalizacijo. Kot sta točno pokazala Mott in Twose [31], povzroči v eni dimenziji ob odsotnosti meddelčnih interakcij še tako majhen nered nastop Andersonove lokalizacije in odsotnost prevodnosti. Podobno velja v dveh dimenzijah [3], medtem ko v tridimenzionalnem primeru obstaja kritična vrednost nereda, nad katero imajo sistemi izolativne, pod njo pa prevodne lastnosti [30]. Pri temperaturi nič tako spreminjanje nereda vodi do prehoda med prevodno in lokalizirano fazo.

Čeprav je enodelčna lokalizacija zaradi omenjene vloge dimenzionalnosti pri nastopu lokalizacijskih pojavov že sama po sebi zapletena in zanimiva, odpira vključitev meddelčnih interakcij povsem nove raziskovalne možnosti. Preplet nereda in meddelčnih interakcij odpira vprašanja o možnosti obstoja MBL pri končnih temperaturah [9] [34] in o lastnostih meddelčnih interakcij. V zadnjih letih postaja področje vse bolj privlačno ne samo zaradi rezultatov numeričnih analiz [44] [34] [29], temveč tudi zaradi porajajočih se možnosti realizacije MBL sistemov v eksperimentih z ultrahladnimi atomi [22] [38] [14]. Nekatera izmed odprtih vprašanj s področja so naslovljena tudi v raziskovalnem delu, predstavljenem v magistrski nalogi, kjer se ukvarjamo s prehodom med ergodičnim in MBL režimom v kvantnomehanskem modelu t - J [41]. Pri preučevanju nastopa lokalizacije me zanima vloga različnih tipov nereda, posebej primerjava med vplivom nereda, ki se sklaplja s spinskimi prostostnimi stopnjami, in nereda, ki se sklaplja s prostostnimi stopnjami nosilcev naboja. Način vpeljave obeh zvrsti nereda podrobneje razložim v nadaljnjih poglavjih ob formalni predstavitvi modela.

Raziskovalno delo temelji na numeričnih metodah, točneje polni diagonalizaciji modelskih hamiltonk in analizi tako izračunanih spektrov. Različne spektralne lastnosti hamiltonk ergodičnih in MBL modelskih sistemov izkoriščam pri analizi na podlagi teorije naključnih matrik [16] (ang. *random matrix theory*, v nadaljevanju RMT), v okviru katere so podane teoretične napovedi [28] za vrednosti različnih spektralnih statistik in opazljivk, s katerimi primerjamo svoje izračune. Med omenjenimi statistikami sta posebej izpostavljena povprečen razmik med sosednjimi nivoji in statistika razmikov sosednjih energijskih nivojev [8] [34]. Slednji sta zaradi sorazmerne enostavnosti implementacije pogosto uporabljeni za presojo ergodičnosti oziroma lokaliziranosti sistema. Ker vsebujeta informacije zgolj o korelacijah med najbližjimi energijskimi nivoji v spektru, podajata obnašanje modelskih sistemov na najdaljših časovnih skalah. Polnejši vpogled v dogajanje na vseh časovnih skalah sistemov dobimo z izračunom spektralnega oblikovnega faktorja (ang. *spectral form factor*, v nadaljevanju SFF) oziroma Fourierove transformacije dvotočkovne korelacijske funkcije energijskega spektra. Izsledke metod, ki temeljijo na statističnih lastnostih energijskih spektrov, dopolnimo in primerjamo z izračuni prepletenostne entropije vseh lastnih stanj modelskih hamiltonk. Znanilec nastopa MBL je v tem primeru ‘površinsko skaliranje’ prepletenostne entropije v odvisnosti od velikosti podsistema v nasprotju s ‘prostorninskim skaliranjem’ v ergodičnih sistemih.

Na začetku drugega poglavja najprej podrobneje predstavimo pojav Andersonove lokalizacije v neurejenih sistemih neinteragirajočih delcev in razložimo pomen različnih modelov nereda. Nato prek dodatka meddelčnih interakcij obravnavo razši-

rimo na področje MBL. V tretjem poglavju predstavimo tipične modelske sisteme, primerne za preučevanje nastopa MBL, in sicer Heisenbergovo verigo, Hubbardov model in model t - J , ki ima osrednjo vlogo v raziskovalnem delu, predstavljenem v tej magistrski nalogi. Poleg modelov predstavimo tudi numerično implementacijo točne diagonalizacije. V četrtem poglavju predstavimo statistične lastnosti hamiltonskih spektrov in vpeljemo ključne pojme s področja RMT. Predstavljeni so rezultati analize sosednjih energijskih nivojev v odvisnosti od različnih tipov nereda in rezultati analize SFF. Peto poglavje je namenjeno vpeljavi prepletenostne entropije in predstavitvi izračunov za to količino.

Poglavje 2

Od Andersonove do večdelčne lokalizacije

2.1 Andersonova lokalizacija in osnove neurejenih sistemov

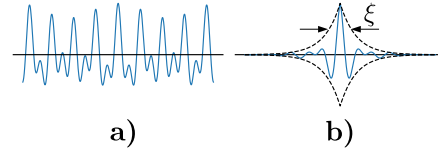
Obravnavo lokalizacijskih pojavov začnemo z vpeljavo pojma Andersonove lokalizacije, ki nastopi v neurejenih sistemih neinteragirajočih delcev. Razumevanje mehanizmov, ki vodijo do lokalizacije ob odsotnosti interakcij, je namreč dobrodošla osnova za razširitev obravnave z dodatkom meddelčnih interakcij in posledično preučevanje MBL pojavov.

Zaradi translacijske simetrije lahko v idealno urejenih kristalnih strukturah elektronske valovne funkcije opišemo kot prostorsko razsežne Blochove valovne funkcije. Stanja dejanskih sistemov se pogosto bistveno razlikujejo od tovrstnega idealiziranega opisa, saj je zaradi tako rekoč neizogibne prisotnosti nečistoč, defektov in vrzeli idealna kristalna urejenost v praksi le bolj ali manj dobra predpostavka. Pri tem se v razpravi o neurejenih sistemih uporabljan pojem *nereda* nanaša na vsa omenjena odstopanja od idealne urejenosti. V limiti majhnega nereda, ko se odstopanja od sicer popolne ureditve pojavijo le na nekaj mestih, so valovne funkcije sistema še vedno prostorsko razsežne in le malo odstopajo od ravnih valov. Z naraščanjem nereda se lahko njihova narava popolnoma spremeni, saj lahko nekatere postanejo lokalizirane z eksponentno pojemaajočo ovojno funkcijo, kot prikazuje Slika 2.1.

Elektroni z lokaliziranimi valovnimi funkcijami so znotraj sistema omejeni na končna območja in zato zanemarljivo malo vplivajo na transportne lastnosti, medtem ko elektroni zasedajoč prostorsko razsežna stanja tipično prispevajo h končnemu transportu. Posledično je sistem izolator, če pod njegovo Fermijevo energijo obstajajo zgolj lokalizirana stanja, in prevodnik, v kolikor Fermijev nivo sovpada z energijo prostorsko razsežnih stanj [24]. Za razlago obstoja prevodnikov in izolatorjev in razlik med njimi je torej ključno razumevanje vloge nereda pri lokalizaciji kvantnomehanskih valovnih funkcij. Poleg vpliva količine nereda in dimenzionalnosti sistema so v tem podpoglavju razloženi tudi osnovni pojmi s področja Andersonove lokalizacije. V magistrski nalogi se pojem lokalizacija nikoli ne nanaša na t.i. Mottovo lokalizacijo, ki je posledica močnih odbojnih medelektronskih interakcij in je v

nalogi ne obravnavamo.

Možnost lokalizacije elektronskih valovnih funkcij ob prisotnosti dovolj močnega potencialnega nereda je leta 1958 prvi napovedal P.W. Anderson [6]. Medtem ko sta limitna primera šibkega in močnega nereda intuitivno razmeroma lahko predstavljiva, je bilo vprašanje o obnašanju sistemov v vmesnem režimu, posebej v dveh dimenzijah, dolgo časa odprto. Mott in Twose sta za enodimenzionalne sisteme eksaktno dokazala [31] nastop lokalizacije ob prisotnosti vsakršnega končnega nereda, enak rezultat pa v termodinamiški limiti neskončnih sistemov velja tudi v dveh dimenzijah [3]. Kot je leta 1968 pokazal Mott, obstaja v treh dimenzijah kritična energija E_c oziroma *rob mobilnosti* [30], ki loči lokalizirana od razsežnih stanj. Energija prvih je manjša, drugih pa večja od kritične energije E_c . Obstoj roba mobilnosti danes označuje nastop z neredom vzbujenega faznega prehoda med kovino in izolatorjem. Leta 1977, manj kot 20 let po objavi prelomnega članka, je bila Andersonu za njegovo delo podeljena Nobelova nagrada za fiziko [7].



Slika 2.1: Teorija Andersonove lokalizacije napove možnost lokalizacije kvantnomehanskih stanj zaradi naključnih potencialov. **a)** Primer razsežnega stanja. **b)** Lokalizirano stanje, katerega ovojnica eksponentno pojema z razdaljo od neke točke v prostoru. ξ je lokalizacijska dolžina.

2.1.1 Opis prevodnosti pred teorijo lokalizacije in po njej

Lokalizacija kvantnomehanskih delcev v naključnih potencialih je zanimiv statističnofizikalni pojav. Pred razvojem teorije Andersonove lokalizacije so za opis elektronske prevodnosti tipično uporabljali kvantnomehansko različico Drudejevega modela. Pri slednjem privzamemo sorazmernost prevodnosti s *povprečno prosto potjo* l , torej razdaljo, ki jo delec v snovi prepotuje pred trkom z nečistočo. V kvantnomehanskem smislu to pomeni, da se valovni paketi pri propagaciji vzdolž neurejenega medija na naključnem potencialu v povprečju sipajo po prepotovani razdalji l . Čeprav zaradi sipanja na naključnem potencialu valovni paketi nimajo več ostro določenega valovnega vektorja, ostanejo valovne funkcije sipanju navkljub prostorsko razsežne. Na daljših razdaljah je tovrstna propagacija skozi medij difuzivna, povečanje količine nereda v sistemu pa vodi do zmanjšanja povprečne proste poti. Zaradi predpostavke sorazmernosti med prevodnostjo in povprečno prosto potjo Drudejev model pri nobenem končnem neredu ne napove ničelne prevodnosti. Napovedi modela so bile v nasprotju s presenetljivo dolgimi relaksacijskimi časi elektronskih spinov, izmerjenimi v poskusih z dopiranimi polprevodniki, ki jim je v petdesetih letih v Bellovih laboratorijih prisostvoval Anderson [25] [7]. V nasprotju z Drudejevim modelom rezultate uspešno razloži model, v katerem valovne funkcije pri dovolj močnem neredu postanejo lokalizirane z eksponentno pojemačo ovojnico, $|\psi(\mathbf{r})| \sim \exp(-|\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|/\xi)$, kjer je ξ *lokalizacijska dolžina*. V kolikor so vse valovne funkcije lokalizirane, se difuzivna propagacija v neurejenem mediju ne samo upočasni, temveč popolnoma ustavi - delci postanejo ujeti, prevodnost pa pade na ničelno vrednost [43]. Presenetljiv rezultat je možno razložiti preko obravnave večkratne interference valovnih komponent, sipanih na naključno porazdeljenih sipalcih - lokalizacija je namreč v

svojem bistvu interferenčni pojav.

2.1.2 Ojačano povratno sipanje

Pomen interferenčnih pojavov pri nastopu Andersonove lokalizacije je vsaj intuitivno najlažje razložiti z uporabo osnovnih načel valovne mehanike. Privzemimo limito šibkega nereda in obravnavajmo delec, ki se v neurejenem mediju propagira med točkama \mathbf{r}_0 in \mathbf{r}_1 . Za izračun verjetnosti delčevega prihoda v točko \mathbf{r}_1 moramo sešteti vse kompleksne verjetnostne amplitude različnih poti med točkama in izračunati kvadrat absolutne vrednosti končne vsote. Verjetnost na koncu podajata vsota kvadratov posameznih verjetnostnih amplitud ter vsota mešanih, interferenčnih členov. Prva ustreza klasičnemu nekoherentnemu prispevku, drugo pa lahko v večini primerov upravičeno zanemarimo zaradi predpostavke naključne porazdelitve faz interferenčnih členov v neurejenem mediju. Z neupoštevanjem interferenčnih členov dobimo namesto napovedi lokalizacije Drudejev opis prevodnosti v neurejenih sistemih, torej očitno obstajajo primeri, v katerih interferenčnih členov ne smemo zanemariti.

Naj bo delec uvodoma v točki \mathbf{r}_0 in naj bo A_1 verjetnostna amplituda za proces, v katerem se delec vzdolž neke poti C_1 vrne v izhodiščno točko, A_2 pa naj bo amplituda povratka v izhodiščno točko vzdolž neke druge poti C_2 , kot prikazuje Slika 2.2. Skupno verjetnost povratka podaja zveza

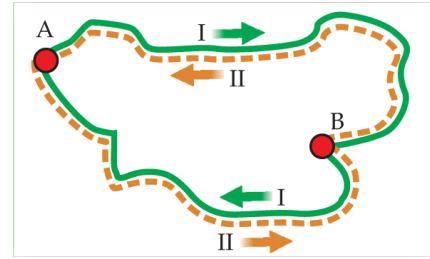
$$w = |A_1 + A_2|^2 = w_{\text{cl}} + w_{\text{int}}, \quad (2.1)$$

kjer je $w_{\text{cl}} = |A_1|^2 + |A_2|^2$ in $w_{\text{int}} = 2 \operatorname{Re}(A_1^* A_2)$ [43]. Za različni poti C_1 in C_2 se interferenčni členi v povprečju izničijo in je njihovo neupoštevanje upravičeno. Drugače je v posebnem primeru, ko je $A_2 = A_r$ verjetnostna amplituda za proces, v katerem povratek poteka vzdolž poti

C_1 , vendar v obratni smeri. V kolikor je sistem simetričen na obrat časa, $A_1 = A_r$, potem s pravilnim upoštevanjem interferenčnih členov izračunamo dvakrat večjo verjetnost povratka kot v klasičnem primeru:

$$w = 4 |A_1|^2 = 2w_{\text{cl}}. \quad (2.2)$$

Zaradi konstruktivne interference poti z njeno v času obrnjeno ustreznico je torej pri sipalnem dogodku verjetnost za povratno sipanje v izhodiščno točko večja od verjetnosti vseh preostalih izidov dogodka. Pojav imenovan *ojačano povratno sipanje* zmanjša transmitivnost medija in posledično zmanjša tudi njegovo prevodnost.



Slika 2.2: Shematski prikaz valovnega paketa, ki se preko poti I skozi točko B vrne v izhodiščno točko A. Pot II je enaka poti I, le da je obrnjena v času. Slika je bila vzeta iz [25].

2.1.3 Skalirna teorija lokalizacije

Lokalizacija v neurejenih sistemih je netrivialno odvisna od njihove dimenzionalnosti. Medtem ko v eni dimenziji vsakršnen končni nered povzroči lokalizacijo vseh valovnih funkcij, obstaja v treh dimenzijah kritična vrednost nereda, nad katero so vsa stanja lokalizirana, za podkritične vrednosti nereda pa v sistemu soobstajajo razsežna in lokalizirana stanja. Medtem ko za dvodimenzionalne sisteme [24] rigorozen dokaz ne obstaja se zdi, da so v termodinamski limiti neskončnega sistema vse valovne funkcije lokalizirane pri vsakršni končni vrednosti nereda, podobno kot v enodimenzionalnem primeru. Za razliko od neskončnih sistemov lahko končni dvodimenzionalni sistemi kažejo prevodne lastnosti.

Opisana zapletena vloga dimenzionalnosti pri nastopu lokalizacijskih pojavov je danes pogosto razložena v okviru *skalirne teorije* lokalizacije, ki so jo leta 1979 razvili Abrahams, Anderson, Licciardello in Ramakrishnan [3]. Navkljub svoji preprostosti in fenomenološkemu pristopu teorija pravilno napove glavne lastnosti lokalizacije v različnih dimenzijah in tako ob odsotnosti rigoroznega teoretičnega modela ponuja dragocen uvid v značilnosti lokalizacijskih pojavov. Skalirna teorija opisuje Andersonovo lokalizacijo v jeziku kritičnih fenomenov zveznih kvantnih faznih prehodov. Slednji nastopijo pri ničelni temperaturi in jih namesto temperature vodi spreminjanje nekega drugega parametra - v primeru lokalizacijskih pojavov je to količina nereda v sistemu. Ker gre za teorijo faznih prehodov, skalirna teorija za različne količine napove skalirne zakone. Tu bo na kratko predstavljena le skalirna zveza za specifično prevodnost.

Pred nadaljevanjem se spomnimo, da sta v tridimenzionalnem ohmskem prevodniku prevodnost g in specifična prevodnost σ povezani z zvezo $g = \sigma \frac{S}{L}$. Pri tem je S prečni presek prevodnika in L njegova dolžina. Pri skalirni teoriji v splošnem obravnavamo odvisnost prevodnosti d -dimenzionalne hiperkocke od dolžine njene stranice L , zato uvedemo logaritemski odvod β kot

$$\beta = \frac{d \log g}{d \log L}. \quad (2.3)$$

Teorija privzame eksplicitno odvisnost β zgolj od g , ne pa tudi od energije, nereda ali dolžine stranice L . Kvalitativno obnašanje količine β določata znani asimptotski limiti majhne in velike prevodnosti, medtem ko so vmesne vrednosti določene z interpolacijo ob predpostavki, da je β zvezna in monotonno naraščajoča funkcija.

Iz En. (2.3) je očitno naraščanje g z velikostjo sistema v primeru $\beta > 0$, kar označuje kovinski oziroma prevoden značaj, v katerem velja dobro poznana klasična zveza med prevodnostjo in specifično prevodnostjo,

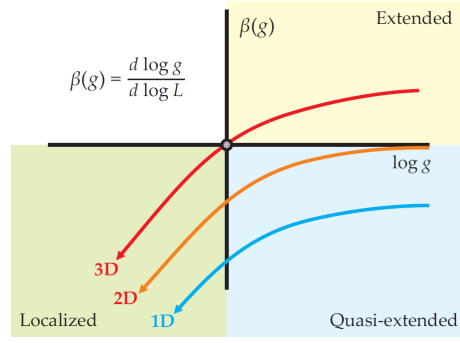
$$g(L) = \sigma \frac{L^{d-1}}{L} = \sigma L^{d-2}. \quad (2.4)$$

Zgoraj zapisana zveza za ohmski prevodnik je le poseben primer En. (2.4), ki nam v prevodnem območju da zvezo $\beta = d - 2$. Posledično je količina β pozitivna le za tri-dimenzionalne prevodnike, ničelna v dveh in negativna v eni dimenziji. V nasprotni, torej lokalizirani limiti, g pojema eksponentno z velikostjo sistema, $g \propto \exp(-L)$ in $\beta < 0$.

Dejanska funkcijska odvisnost je v lokaliziranem režimu podana z zvezo

$$\beta = \frac{d \log g}{dL} \frac{dL}{d \log L} = \log g \quad (2.5)$$

Prehod med izolatorjem in prevodnikom se zgodi v kritični točki $\beta(g_c) = 0$. To je možno zgolj v treh dimenzijah, kjer β zavzame tako negativne kot pozitivne vrednosti. V nižjih dimenzijah prevodnost z naraščanjem velikosti sistema vedno pada in tako kritična točka ni nikoli dosežena. Razlika med tridimenzionalnim in nižjedimenzionalnima primeroma je shematsko prikazana na Sliki 2.3.



Slika 2.3: Skalirna teorija napove fazni prehod med prevodnikom in izolatorjem le v treh dimenzijah, saj v nižjedimenzionalnih sistemih prevodnost z velikostjo sistemov vselej pada. Slika je bila vzeta iz [25].

2.1.4 Vpeljava nereda in Andersonov model

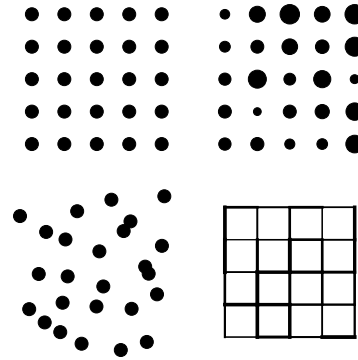
V tem podpoglavju predstavimo različne modele nereda v kvantnomehanskih sistemih. Podana je razlaga uvedbe nereda v idealno urejene kristalne sisteme, kot najpogostejše uporabljan model neurejenega sistema neinteragirajočih delcev pa je podrobneje predstavljen Andersonov model.

Opis translacijsko invariantnih sistemov je zaradi njihove translacijske simetrije razmeroma enostaven. Enoelektronske valovne funkcije so v teh sistemih Blochovega tipa, posledično so elektroni prosto gibljivi. V večini dejanskih sistemov je idealna translacijska simetrija zlomljena zaradi prisotnosti nereda, ki lahko bistveno vpliva na fizikalne lastnosti sistemov. V primeru nizke koncentracije defektov lahko pri opisu neurejenih sistemov kot izhodišče uporabimo koncepte, veljavne v translacijsko invariantnih sistemih. Na drugi strani velika koncentracija defektov terja popolno opustitev predpostavke translacijske simetrije in uporabo novih pristopov.

Kot prikazuje Slika 2.4, lahko različne modele nereda dobimo s takšno ali drugačno deformacijo idealne kristalne strukture. Modele za opis *strukturno neurejenih* sistemov, kot so npr. amorfni polprevodniki, dobimo z naključnimi premiki delcev z mest na urejeni kristalni rešetki. Enodelčno hamiltonko takšnega sistema podaja

$$H = \frac{p^2}{2m} + \sum_{j=1}^N U_j(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j), \quad (2.6)$$

kjer je p operator gibalne količine, m efektivna masa delca, U_j pa potencialna energija atoma na mestu \mathbf{R}_j . Nered vpeljemo z naključno izbiro potencialnih energij in položajev \mathbf{R}_j , kjer vrednosti žrebamo v skladu z nekima izbranim normaliziranim verjetnostnima porazdelitvama.



Slika 2.4: Od leve proti desni in od zgoraj navzdol so razzvrščeni shematski prikazi idealnega kristala, kompozicijsko neurejenega sistema, strukturno neurejenega sistema in sistema s kinetičnim neredom.

Kompozicijsko neurejene sisteme, ki so tudi osrednji predmet preučevanja v magistrski nalogi, najpogosteje opiše hamiltonka v približku tesne vezi na diskretni mreži:

$$H = \sum_{j\nu} u_{j\nu} c_{j\nu}^\dagger c_{j\nu} + \sum_{j\nu, k\mu} t_{j\nu, k\mu} c_{j\nu}^\dagger c_{k\mu}. \quad (2.7)$$

Tu so $c_{j\nu}^\dagger, c_{j\nu}$ fermionski kreacijski in anihilacijski operatorji za mesto j v kristalni rešetki in stanje ν . Z $u_{j\nu}$ so v diagonalnem delu označene potencialne energije stanj na danih mestih v kristalni rešetki, medtem ko izvendiagonalni matrični elementi $t_{j\nu, k\mu}$ ustrezajo tunelskim prehodom med stanji na različnih mestih na mreži. Nered je vpeljan preko naključnih vrednosti potencialnih členov $u_{j\nu}$ ali *skakalnih* (ang. *hopping*) členov $t_{j\nu, k\mu}$, kjer pri žrebanju vrednosti ponovno privzamemo neko verjetnostno porazdelitev. V nasprotju z modelom, ki ga podaja En. (2.6), tu ni strukturnega neredita, saj so mesta v kristalni rešetki dobro definirana in sovpadajo z mesti urejene kristalne mreže. Pri vseh diskretnih modelih, obravnavanih v magistrski nalogi, bomo medmrežni razdalji a priredili enotsko vrednost, $a = 1$.

Andersonov model [6] je poseben primer modela, ki ga podaja En. (2.7). Dobimo ga z upoštevanjem predpostavk izključno diagonalnega prispevka k neredu, skakanja elektronov zgolj med najbližjimi sosedi s konstantnim prekrivalnim integralom za tuneliranje t in prisotnostjo le ene orbitale, $\nu = 1$. Naključne potencialne energije u_j so porazdeljene enakomerno na intervalu $[-W, W]$ v skladu s porazdelitvijo

$$p(u_j) = \frac{1}{2W} \Theta(W - |u_j|), \quad (2.8)$$

kjer je W *parameter velikosti neredita*. Hamiltonka Andersonovega modela se tako zapiše kot

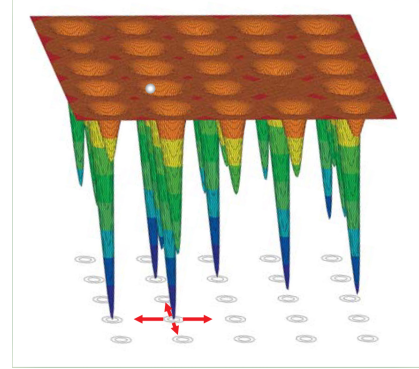
$$H = \sum_j u_j n_j + t \sum_{\text{n.s.}} (c_i^\dagger c_j + \text{h.c.}), \quad (2.9)$$

kjer je $n_j = c_j^\dagger c_j$ operator številske gostote delcev na j -tem mestu kristalne mreže.

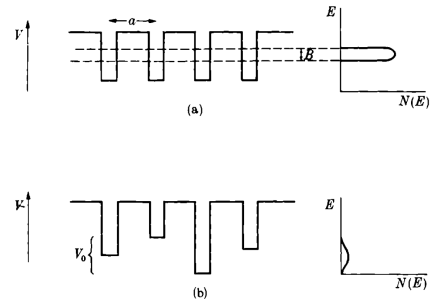
V Andersonovem modelu lahko delec na urejeni mreži skače med sosednjimi mesti z naključno porazdeljenimi potencialnimi energijami, kar shematsko prikazuje Slika 2.5. Andersonov model pogosto služi kot izhodišče za konstrukcijo modelov MBL sistemov, o čemer se bomo prepričali pri njihovi obravnavi v poglavju 3.

Ob odsotnosti nereda je Andersonova hamiltonka običajna hamiltonka v približku tesne vezi, ki opisuje urejeno mrežo enakih potencialnih jam, ki je prikazana na shemi **a)** na Sliki 2.6. V tem primeru jo diagonaliziramo z uporabo Fourierove transformacije in pri izračunu spektra dobimo energijski pas širine $2zt$, kjer je z koordinacijsko število kristalne rešetke. Hamiltonko Andersonovega modela dobimo z naključnim spreminjanjem globin posameznih potencialnih jam za vrednosti U_j , ki so porazdeljene v skladu s porazdelitvijo, ki jo podaja En. (2.8). Kot prikazuje shema **b)** na Sliki 2.6, dodatek nereda razširi energijski pas in odpravi singularnosti v gostoti stanj, ki so sicer značilne za sisteme z redom dolgega dosega.

V limiti zelo močnega nereda, kjer velikost parametra nereda W primerjamo s hitrostjo tuneliranja t , lahko privzamemo, da potencialni člen v En. (2.9) močno prevlada nad izvendiagonalnim skakalnim členom in tako povzroči lokalizacijo valovnih funkcij. V okviru perturbacijske teorije lahko lastne funkcije hamiltonke opišemo kot vezana stanja ali orbitale, ki postanejo lokalizirane zaradi velikih fluktuacij naključnega potenciala. V prvem približku so energije tovrstnih enoelektronskih stanj določene kar z globinami naključnih potencialnih jam, zato se energije stanj z velikim prostorskim prekrivanjem tipično močno razlikujejo. Na drugi strani so stanja s podobnimi energijami v prostoru oddaljena in se le malo prekrivajo. Ker stanja ne v enem ne v drugem primeru ne morejo medsebojno hibridizirati, ostanejo v primeru dovolj močnega nereda lokalizirana.

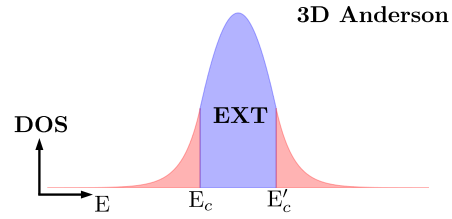


Slika 2.5: Shematski prikaz Andersonovega modela v dveh dimenzijah. Slika je bila vzeta iz [25].



Slika 2.6: **a)** Shematski prikaz potencialnih jam za hamiltonko v približku tesne vezi ob odsotnosti nereda. **b)** Potencialne jame v Andersonovem modelu z naključnim potencialom. Na desni sta v obeh primerih shematsko prikazani gostoti stanj v treh dimenzijah. Uvedba nereda razširi pas in odpravi singularnosti gostote stanj. Slika je bila vzeta iz [32].

V treh dimenzijah za podkritične vrednosti nereda, $W < W_c$, v sistemu obstajajo tako lokalizirana kot razsežna stanja. V odsotnosti nereda so lastne funkcije Andersonove hamiltonke razsežna stanja Blochovega tipa. Uvedba majhnega nereda, ki ustreza majhnim vrednostim W , povzroči šibke naključne fluktuacije potenciala, ki vplivajo zgolj na stanja v bližini robov pasu, medtem ko ostanejo stanja v okolici sredine pasu bolj ali manj nespremenjena. Majhne fluktuacije potenciala namreč povzročijo nastanek plitkih *naključnih* potencialnih jam, ki lahko lokalizirajo le nizkoenergijska lastna stanja hamiltonke. S povečevanjem parametra nereda amplituda potencialnih fluktuacij narašča, kar posledično vodi do lokalizacije stanj z višjo energijo. Lokalizirana in razsežna stanja ne morejo soobstajati pri istih energijah, saj bi v tem primeru lokalizirana stanja zaradi ujemajočih se energij z razsežnimi stanji tvorila hibridizirana stanja in tako postala razsežna. Energije lokaliziranih in razsežnih stanj v splošnem loči kritična energija E_c oziroma rob mobilnosti. Ker je Andersonova hamiltonka simetrična na zamenjavo delcev in vrzeli ima Andersonov model kar dva mobilnostna roba E_c in E'_c . Kot prikazuje Slika 2.7, nastopata simetrično glede na središče pasu, ki se mu približujeta z naraščanjem parametra W . Polna lokalizacija vseh valovnih funkcij nastopi, ko se mobilnostna roba združita, saj tedaj v sistemu ni več razsežnih stanj. To se zgodi pri kritični vrednosti parametra nereda W_c . V primeru obstoja roba mobilnosti je sistem pri ničelni temperaturi izolator, če je njegova Fermijeva energija ε_F znotraj energijskega območja lokaliziranih stanj. V tem primeru je pri končnih temperaturah specifična prevodnost končna in sorazmerna eksponentno majhnemu številu zasedenih razsežnih stanj,



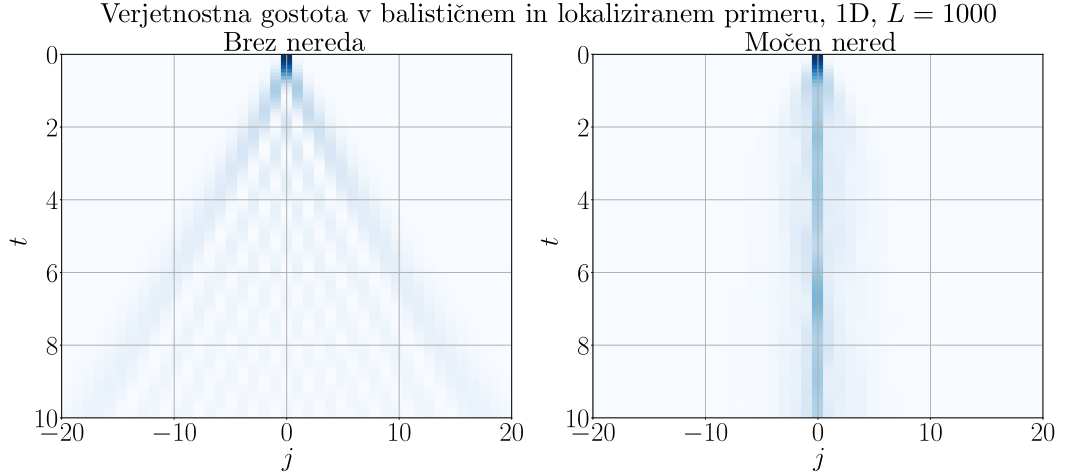
Slika 2.7: Shematski prikaz tipične gostote stanj v odvisnosti od energije za tridimenzionalni Andersonov model za neko podkritično vrednost nereda, $W < W_c$. Stanja v robovih pasu (ki sta obarvana rdeče) so lokalizirana, medtem ko so stanja v sredini pasu (ki je obarvana modro) razsežna. E_c in E'_c označujeta roba mobilnosti, **EXT** pa razsežna stanja.

znatnega prekrivalnega integrala in

$$\sigma(T) \propto \exp\left(\frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_F}{T}\right). \quad (2.10)$$

Pri tem je ε_1 energija celotnega sistema, torej vsota enodelčnih energij.

Na Sliki 2.8 je za enodimenzionalni Andersonov model prikazana razlika med odsotnostjo nereda in močnim neredom v primeru unitarnega časovnega razvoja začetnega profila verjetnostne gostote. Na verigi dolžine $L = 1000$ je bilo pripravljeno začetno stanje z enotsko verjetnostno gostoto le na mestu v sredini verige, medtem ko je bila gostota povsod drugod ničelna. V odsotnosti nereda se je začetni profil sčasoma balistično razširil, tako da je bila po dolgem času verjetnostna gostota po celem sistemu enakomerna. Nasprotno je v prisotnosti močnega nereda verjetnostna gostota vselej ostala lokalizirana v okolici sredine verige.



Slika 2.8: Primer časovnega razvoja začetnega stanja v primeru brez nereda in z močnim neredom ($W = 3.0$). Pri tem t označuje čas, j pa mesto v enodimenzionalni verigi. Za medmrežno razdaljo smo privzeli $a = 1$, enako tudi za enoto časa.

2.2 Lokalizacija v sistemih z meddelčnimi interakcijami

Do sedaj smo se ukvarjali z lokalizacijo v sistemih neinteragirajočih delcev. Pri opisu dejanskih sistemov predstavlja predpostavka odsotnosti meddelčnih interakcij glavno pomanjkljivost modelov enodelčne lokalizacije. V praksi so namreč interakcije vselej prisotne, njihov vpliv pa vse od Andersonovega prelomnega članka ostaja eno pomembnejših odprtih vprašanj področja. Polno lokaliziran Andersonov izolator brez roba mobilnosti namreč pri nobeni temperaturi ne omogoča transporta energije ali naboja in tako zaradi ničelne prevodnosti vselej preprečuje termalizacijo. Da bi v interagirajočih sistemih lahko z gotovostjo potrdili oziroma ovrgli odsotnost termalizacije in nastop večdelčne lokalizacije, moramo v dosedanje obravnavo neinteragirajočih sistemov neizogibno vključiti meddelčne interakcije in preučiti njihov vpliv. Zavoljo pregleda nad raziskovalno dejavnostjo in za lažjo umestitev v časovni okvir je na tem mestu navedenih nekaj zgodovinsko pomembnejših del s področja, v katerih je bil obravnavan preplet interakcij in nereda. Pri tem sledimo Ref. [1].

Leta 1980 sta Fleishman in Anderson [19] podala kvalitativne argumente v prid nastopu lokalizacije ob prisotnosti šibkih interakcij kratkega dosega. Uporaba teorije renormalizacijske grupe je omogočila posplošitev koncepta Andersonovega izolatorja in posledično opis osnovnih stanj neurejenih sistemov z interakcijami. V ta okvir spada delo Finkelsteina [18], ki je leta 1983 pri nadgraditvi skalirne teorije lokalizacije upošteval preplet vpliva meddelčnih interakcij in nereda. Mnogo kasneje so se pojavile utemeljitve obstoja lokalizirane faze ob prisotnosti interakcij pri *končnih* temperaturah. Med prvimi so na to možnost leta 1997 pokazali Altshuler in sodelavci [5] na primeru ničdimenzionalne kvantne pike. Obstoj lokalizacije v višjedimenzionalnih sistemih z lokalnimi interakcijami so leta 2006 utemeljili Basko, Aleiner in Altshuler [9], in sicer za nizke temperature oziroma nizke energijske gostote. V Ref. [9] uporabljeni modelski sistem je namreč idealen izolator z ničelno

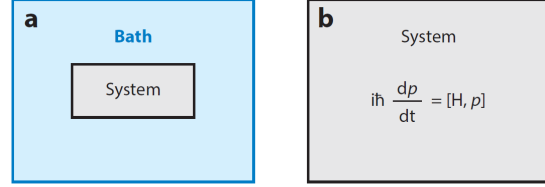
prevodnostjo pri nizkih energijskih gostotah, medtem ko postanejo večdelčna lastna stanja pri visokih energijskih gostotah delokalizirana. To označuje fazni prehod med izolatorsko in prevodno fazo, ki nastopi pri končni temperaturi, oziroma točneje, pri končni energijski gostoti nad osnovnim stanjem, poimenovani *večdelčni rob mobilnosti*. Fazni prehod v večdelčno lokalizirano stanje je kvalitativno drugačen od konvencionalnih končnotemperaturnih prehodov med kovino in izolatorjem v Mottovih in pasovnih izolatorjih. V slednjih je namreč specifična prevodnost pri končni temperaturi končna, vendar eksponentno majhna, medtem ko je v nizkotemperaturnem režimu večdelčno lokalizirane faze *identično* enaka nič [10]. Obstoje večdelčno lokalizirane faze tudi pri neskončni temperaturi v neurejenem interagirajočem sistemu na diskretni mreži sta leta 2007 utemeljila Oganessian in Huse [34], in sicer na podlagi numerične analize enodimenzionalnega modela s fermioni brez spinskih prostostnih stopenj. Z uporabo polne diagonalizacije modelskih hamiltonk in študijo spektralnih statistik sta prišla do rezultatov, ki napovedujejo obstoj večdelčno lokalizirane faze v neurejenih modelih na diskretnih mrežah tudi ob neskončnih temperaturah oziroma pri energijskih gostotah visoko nad osnovnim stanjem. Napoved velja za sisteme s končnodimenzionalnimi lokalnimi Hilbertovimi prostori, torej sisteme s končnim številom stanj na mesto. Članek je navdahnjen številne kasnejše numerične raziskave MBL pojavov, po njem pa se pri analizi spektralnih statistik v magistrski nalogi obravnavanih modelov zgledujemo tudi mi.

Čeprav koncepti v podpoglavju 2.1 obravnavane Andersonove lokalizacije služijo kot izhodišče za obravnavo fenomenov večdelčne lokalizacije, se problema bistveno razlikujeta, zato vključitev meddelčnih interakcij terja razvoj novih pristopov. Pri presoji obstoja večdelčno lokalizirane faze moramo preučiti naravo vseh večdelčnih lastnih stanj sistema in ugotoviti, ali so lokalizirana ali ne. Ker preučujemo stanja s končnimi energijskimi gostotami nad energijo osnovnega stanja, nas zanimajo končne temperature. Na drugi strani so bili zaradi odsotnosti meddelčnih interakcij pri Andersonovem izolatorju v večini študij preučevani le osnovno stanje in končno število vzbuditev nad njim. V termodinamski limiti neskončnega sistema je energijska gostota vzbuditev enaka nič, kar ustreza ničelni temperaturi.

V nadaljevanju razložimo osnovne koncepte fizike zaprtih kvantnih sistemov. Ker je poglobljena lastnost MBL sistemov odsotnost termalizacije, je zatem podrobneje predstavljen mehanizem termalizacije v kvantnih sistemih skupaj s hipotezo termalizacije lastnih stanj (v nadaljevanju ETH). Nazadnje so navedene najpomembnejše značilnosti MBL sistemov.

2.2.1 Fizika zaprtih kvantnih sistemov

Pojav MBL se tipično preučuje v zaprtih kvantnih sistemih, kjer zaprtost pomeni odsotnost sklopitve z okolico oziroma zunanjim rezervoarjem, kot prikazuje Slika 2.9. V tem podpoglavju navedemo osnovne koncepte, ki določajo obnašanje tovrstnih sistemov. V razpravi imamo vselej v mislih časovno neodvisne hamiltonke z interakcijami kratkega dosega.



Slika 2.9: **a)** Pri običajnem kvantnostatističnem opisu sistema privzamemo njegovo sklopitev z zunanjim rezervoarjem, s katerim lahko izmenjuje denimo energijo in delce. **b)** Tu obravnavamo zaprte oziroma izolirane kvantne sisteme, katerih dinamiko določa unitaren časovni razvoj začetnih stanj. Slika je bila vzeta iz Ref. [33].

Poljubno stanje zaprtega kvantnega sistema ob času t opisuje gostotna matrika, $\rho(t) = |\psi(t)\rangle\langle\psi(t)|$. V Schrödingerjevi sliki, kjer je časovni razvoj poljubnega začetnega stanja določen z delovanjem unitarnega časovnega propagatorja,

$$|\psi(t)\rangle = e^{-iHt/\hbar}|\psi(0)\rangle, \quad (2.11)$$

je časovni razvoj gostotne matrike določen z zvezami

$$\rho(t) = e^{-iHt} \rho(0) e^{iHt}, \quad i \frac{d\rho}{dt} = [H, \rho]; \quad \text{Tr } \rho = 1. \quad (2.12)$$

Na vmesnem koraku med En. (2.11) in (2.12) smo postavili $\hbar = 1$. Vsi drugi kvantnomehanski operatorji \hat{O} so časovno neodvisni, pričakovana vrednost poljubnemu operatorju \hat{O} pripadajoče opazljivke O pa se ob času t zapiše kot

$$\langle\hat{O}\rangle_t = \text{Tr}(\hat{O}\hat{\rho}(t)). \quad (2.13)$$

V klasični statistični mehaniki temelji koncept termalizacije na predpostavki *ergodičnosti*, v skladu s katero so na dolgem časovnem intervalu vsa mikrostanja sistema obiskana z enako verjetnostjo. Zaradi linearnosti kvantne mehanike moramo v kvantnih sistemih pojem ergodičnosti nekoliko prilagoditi. Vzemimo namreč poljubno začetno neravnovesno stanje večdelčnega sistema $|\psi(0)\rangle$ in ga razvijmo po bazi večdelčnih lastnih stanj hamiltonke H , ki določa dinamiko sistema:

$$|\psi(0)\rangle = \sum_{\alpha} A_{\alpha} |\alpha\rangle, \quad H|\alpha\rangle = E_{\alpha} |\alpha\rangle. \quad (2.14)$$

Pri časovnem razvoju v skladu z En. (2.11) pridobi vsak izmed koeficientov razvoja A_{α} multiplikativni fazni faktor, ki ustreza dani večdelčni lastni energiji E_{α} ,

$$|\psi(t)\rangle = e^{-iHt} |\psi(0)\rangle = \sum_{\alpha} A_{\alpha} e^{-iE_{\alpha}t} |\alpha\rangle.$$

Verjetnost p_{α} , da se sistem nahaja v enem izmed lastnih stanj $|\alpha\rangle$, se s časom seveda ne spreminja in je določena z začetno izbiro stanja, saj velja $p_{\alpha} = |A_{\alpha}|^2$. To

je popolnoma drugače kot v klasičnih sistemih, ki med časovnim razvojem obiščejo različne dele faznega prostora. V kvantnih sistemih je pojem termalizacije namesto s samimi valovnimi funkcijami ali gostotnimi matrikami smiselno povezati s pričakovanimi vrednostmi *lokalnih* opazljivk po dolgem času, ki jih podaja izraz [17] [1]

$$\begin{aligned}\langle \hat{O} \rangle_{\infty} &= \lim_{t' \rightarrow \infty} \frac{1}{t'} \int_0^{t'} \langle \psi(t) | \hat{O} | \psi(t) \rangle dt = \\ &= \lim_{t' \rightarrow \infty} \frac{1}{t'} \int_0^{t'} \left\{ \sum_{\alpha} |A_{\alpha}|^2 \langle \alpha | \hat{O} | \alpha \rangle + \sum_{\alpha \neq \beta} A_{\alpha}^* A_{\beta} e^{i(E_{\alpha} - E_{\beta})t} \langle \alpha | \hat{O} | \beta \rangle \right\} dt = \quad (2.15) \\ &= \sum_{\alpha} p_{\alpha} \langle \alpha | \hat{O} | \alpha \rangle.\end{aligned}$$

Iz En. (2.15) vidimo, da vrednost $\langle \hat{O} \rangle_{\infty}$ določajo verjetnosti p_{α} skupaj s pričakovanimi vrednostmi opazljivke $\langle \alpha | \hat{O} | \alpha \rangle$. Izvendiagonalni matrični elementi v zgornji enačbi namreč oscilirajo pri različnih frekvencah in se pri časovni integraciji v procesu *izgube faze* (ang. *dephasing*) izpovprečijo, pri čemer smo privzeli nedegeneriranost lastnih stanj $|\alpha\rangle$.

Pri eksperimentih in numeričnih simulacijah je limita neskončnega časa v zgornji enačbi seveda nedosegljiva. Numerične študije kažejo, da mora biti t' daljši od tipičnega relaksacijskega časa sistema. Ker je določitev relaksacijskih časov specifična od modela do modela, gre za eno izmed odprtih vprašanj s področja. Podrobnejša obravnava najprimernejše dolžine integracijskega intervala zato presega okvire magistrske naloge.

V generičnih sistemih fluktuacije okrog povprečne vrednosti $\langle \hat{O} \rangle_{\infty}$ z velikostjo sistema padajo eksponentno, njihovo časovno odvisnost pa določajo izvendiagonalni matrični elementi v En. (2.15). Čeprav so slednji pomembni tudi v hipotezi termalizacije lastnih stanj, ki je predstavljena v nadaljevanju, za nas niso bistveni. Zanimajo nas namreč le ravnovesne vrednosti opazljivk, medtem ko tudi natančnejša obravnava časovne dinamike relaksacije proti ravnovesnim vrednostim presega okvire magistrske naloge.

2.2.2 Hipoteza termalizacije lastnih stanj

Termalizacija v jeziku konvencionalne statistične fizike pomeni relaksacijo vseh, še tako neravnovesnih, stanj proti ravnovesju, v katerem pričakovane vrednosti opazljivk določajo ustrezna ansambelska povprečja. Poljubna začetna stanja z izbrano energijo v termalizirajočem sistemu vsa termalizirajo pri temperaturi T , ki ustreza pričakovani vrednosti energije sistema po dolgem času $\langle H \rangle_T$, kjer smo seveda privzeli ohranitev celotne energije sistema. Pri posplošitvi obravnave na zaprte kvantne sisteme predpostavimo, da tudi v teh, v kolikor pride do termalizacije, vsa začetna stanja z dano energijo termalizirajo pri isti temperaturi. Izjava je splošna in do zdaj rigorozen dokaz trditve za splošne generične sisteme še ne obstaja, vendar se zdi v skladu s tem, kar vemo o naravi termalizirajočih sistemov [33].

Da bi pokazali, da sistem za *vsako* začetno stanje z dano energijo E termalizira

pri ustrezni temperaturi, moramo v En. (2.14) preučiti statistične lastnosti koeficientov $|A_\alpha|^2$. Naj bo $|\psi(0)\rangle$ začetno stanje z dobro definirano povprečno energijo \bar{E} in majhnimi fluktuacijami $\Delta_E, \Delta_E \ll \bar{E}$. Velja [42]

$$\begin{aligned}\bar{E} &= \sum_{\alpha} |A_\alpha|^2 E_\alpha, \\ \Delta_E^2 &= \sum_{\alpha} |A_\alpha|^2 (E_\alpha - \bar{E})^2.\end{aligned}\tag{2.16}$$

Širina energijskega okna Δ_E tipično pojema s korenem velikosti sistema, $\Delta \propto 1/\sqrt{L}$ (izpeljava je navedena v prilogi k Ref. [37]). To pomeni, da je $|\psi\rangle$ superpozicija lastnih stanj $|\alpha\rangle$ znotraj ozkega energijskega okna Δ_E , v katerem so vse verjetnosti p_α enake [37]. Z upoštevanjem ozkega energijskega okna En. (2.15) prepišemo

$$\langle \hat{O} \rangle_\infty = \lim_{t \rightarrow \infty} \langle \psi(t) | \hat{O} | \psi(t) \rangle \approx \frac{\sum_{|E_\alpha - \bar{E}| \leq \Delta_E} \langle \alpha | \hat{O} | \alpha \rangle}{N_\Delta} = \langle \alpha | \hat{O} | \alpha \rangle.\tag{2.17}$$

Pri tem je N_Δ število lastnih stanj na energijskem intervalu Δ_E okrog \bar{E} . Z En. (2.17) smo zapisali *hipotezo termalizacije lastnih stanj* (ang. *eigenstate thermalization hypothesis*, v nadaljevanju ETH). V kolikor ETH velja, potem za poljubno začetno stanje z energijo \bar{E} pričakovane vrednosti opazljivk relaksirajo proti ravnovesnim termalnim vrednostim. Namesto z izračunom ansambelskih povprečij slednje dobimo kar z izračunom pričakovanih vrednosti opazljivk v lastnem stanju $|\alpha\rangle$, katerega energija se ujema z \bar{E} .

Veljavnost ETH v sistemu pomeni njegovo termalizacijo in tako implicira ergodičnost v kvantnem primeru. Podrobnim numeričnim študijam ETH navkljub [16] trenutno še ni povsem jasno, ali je veljavnost hipoteze potreben pogoj za termalizacijo - za zdaj vemo zgolj, da ETH velja v vseh termalizirajočih sistemih. Hipoteza ni veljavna v dveh pomembnih razredih netermalizirajočih sistemov. V integrabilnih sistemih relaksacijo proti termalnim vrednostim preprečuje nabor lokalnih konstant gibanja. Kljub temu lahko v integrabilnih sistemih pričakujemo relaksacijo proti stanjem z maksimalno entropijo in posplošeno verzijo termalizacije proti t.i. generaliziranemu Gibbsovemu ansamblu [37]. Drugi tip sistemov so za nas zanimivejši MBL sistemi, ki jih zaznamuje odsotnost termalizacije v kakršnemkoli smislu.

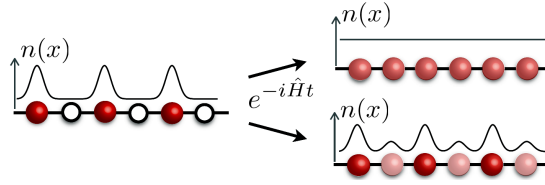
2.2.3 Značilnosti MBL sistemov

MBL sistemi se v več pogledih ločijo od termalizirajočih oziroma ergodičnih sistemov. Omejili se bomo na štiri njihove ključne lastnosti, in sicer neergodičnost v času, značilno spektralno statistiko, ničelni transport in skaliranje prepletenostne entropije.

Kot smo opisali v predhodnem poglavju, so v ergodičnih sistemih večdelna lastna stanja termalna, kar v izoliranem sistemu dovoljuje relaksacijo poljubnega začetnega stanja proti ravnovesni vrednosti - pravimo, da sistem lahko sam sebi služi kot *toplotna kopel*. V MBL sistemih je drugače, saj zanje ETH ne velja in lastna stanja niso termalna. Tudi po dolgem času so pričakovane vrednosti lokalnih opazljivk namesto s termalnimi vrednostmi določene s podrobnostmi lokalnih konfiguracij začetnih

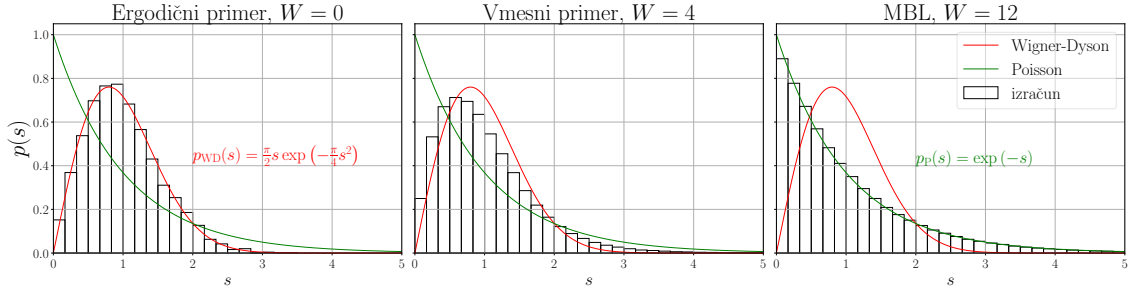
stanj, kot shematsko prikazuje Slika 2.10.

Razlika med ergodičnimi in MBL sistemi je razvidna neposredno iz En. (2.15) in (2.17). Tako v ergodičnih kot MBL sistemih proces izgube faze med dolgotrajnim razvojem v En. (2.15) izniči izvendiagonalne matrične elemente $\langle \alpha | \hat{O} | \beta \rangle$, ki tipično nosijo glavno informacijo o prekrivanju začetnega stanja z lastnimi funkcijami hamiltonke. Zaradi veljavnosti ETH so v ergodičnem sistemu lastna stanja termalna in neodvisna od začetnih pogojev odražajo lastnosti sistema pri dani energiji - informacija o začetnem stanju se tako med časovnim razvojem popolnoma zabriše. V MBL sistemih je drugače, saj zaradi neveljavnosti ETH lastna stanja niso termalna. Informacija o prekrivanju začetnega stanja z lastnimi funkcijami hamiltonke se v diagonalnih matričnih elementih ohrani tudi po dolgem času. Pravimo, da MBL sistemi ohranjajo ‘spomin’ na začetno konfiguracijo. Hkrati iz odsotnosti termalizacije sledita tudi ničelna prevodnost in ničelni transport v MBL sistemih. Za uspešen potek termalizacije sta namreč potrebna transport delcev in energije med različnimi deli sistema.



Slika 2.10: Shematski prikaz razlike med unitarnim časovnim razvojem netipične začetne konfiguracije interagirajočih delcev v ergodičnem in MBL režimu, kjer je netipičnost dosežena z alternirajočo zasedenostjo mest na kristalni verigi. V prvem primeru sistem sčasoma relaksira proti ravnovesni enakomerni porazdelitvi delcev, medtem ko se tovrstna relaksacija v MBL fazi ne zgodi - tudi po dolgem času sistem ohrani spomin na netipičnost začetnega stanja. Slika je bila vzeta iz Ref. [1].

Zgoraj opisana odsotnost termalizacije v MBL sistemih vpliva tudi na spektralne lastnosti njihovih modelskih hamiltonk, ki se bistveno razlikujejo od lastnosti ergodičnih sistemov. Med prvimi sta nastop MBL skozi prizmo spektralnih statistik preučevala Oganessian in Huse [34], podoben pristop pa pri presoji ergodičnosti oziroma lokaliziranosti konkretnih modelskih sistemov v poglavju 4 uporabljamo tudi mi. Poglavitne koncepte zato podrobneje uvedemo kasneje, tu pa le na kratko povzamemo bistvo - namreč, da so lastnosti energijskih spektrov ergodičnih in MBL sistemov univerzalne in kvalitativno različne [28] [8] [16]. Vrednosti različnih spektralnih opazljivk, v nalogi denimo preučujemo porazdelitev *razmikov* med sosednjimi energijskimi nivoji in statistiko *razmerij razmikov* med sosednjimi energijskimi nivoji [34], se zato v obeh režimih razlikujejo in omogočajo presojo ergodičnosti oziroma lokaliziranosti sistema. Primer tovrstne presoje na podlagi statistike razmikov sosednjih energijskih nivojev prikazuje Slika 2.11.



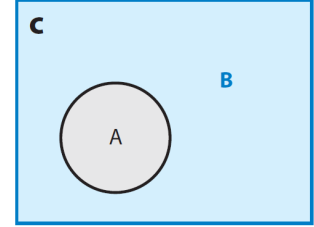
Slika 2.11: Ilustrativen primer uporabe spektralne statistike za presojo ergodičnosti oziroma lokaliziranosti sistema. Prikazana je porazdelitev statistike sosednjih energijskih nivojev za model t - J z naključnim potencialnim neredom, v katerem pride do prehoda med ergodično in MBL fazo. Formalno je model vpeljan v poglavju 3.2. V ergodičnem primeru se mora statistika ujemati z rdečo Wigner-Dysonovo krivuljo, v MBL primeru pa z zeleno Poissonovo krivuljo. Razlogi so razloženi v poglavju 4.

Pomemben kriterij za razločanje med ergodičnimi in MBL sistemi je tudi skaliranje prepletenostne entropije lastnih stanj sistema. Prepletenostna entropija podsistema A je definirana kot von Neumannova entropija reducirane gostotne matrike $\hat{\rho}_A$ podsistema A:

$$S_{\text{ent}}(A) = -\text{Tr} \{ \hat{\rho}_A \log \hat{\rho}_A \}. \quad (2.18)$$

Pri tem smo privzeli, da je celoten sistem razdeljen na dva podsistema, denimo A in B, kot prikazuje Slika 2.12. Reducirano gostotno matriko $\hat{\rho}_A$ dobimo z delno sledjo po prostostnih stopnjah podsistema B nad gostotno matriko $\hat{\rho}$:

$$\hat{\rho}_A = \text{Tr}_B \hat{\rho}. \quad (2.19)$$



Slika 2.12: Shema v pomoč k vpeljavi pojma prepletenostne entropije. Izoliran kvantni sistem razdelimo na podsistema A in B. Slika je bila povzeta po Ref. [33].

Za lastna stanja $|\alpha\rangle$ mora biti reducirana gostotna matrika $\hat{\rho}_A^\alpha = \text{Tr}_B |\alpha\rangle\langle\alpha|$ ob predpostavki veljavnosti ETH podobna termalni gostotni matriki podsistema A, saj se pričakovane vrednosti opazljivk sistema ujemajo s tistimi v termalnem stanju. To pomeni, da je za lastna stanja v ergodičnih sistemih $S_{\text{ent}}(A)$ enaka termodinamski entropiji podsistema A in je zato ekstenzivna - skalira z velikostjo podsistema A, $S_{\text{ent}}(A) \propto \text{vol}(A)$. Temu pravimo *volumsko skaliranje* prepletenostne entropije (ang. *volume-law scaling*).

Obnašanje v MBL sistemih je drugačno, saj so njihova lastna stanja v *celotnem spektru* šibko prepletena. Numerične študije [39] [11] nakazujejo, da je skaliranje prepletenostne entropije *površinsko* (ang. *area-law scaling*) oziroma sorazmerno površini roba podsistema A, $S_{\text{ent}}(A) \propto \text{vol}(\partial A)$. Z numerično analizo prepletenostne entropije v konkretnih modelskih sistemih se ukvarjamo v poglavju 5.

Poglavje 3

Modeli in metode

Do sedaj smo se pri obravnavi pojavov MBL omejili na opis lastnosti netermalizirajočih sistemov, zdaj pa nas zanimajo konkretni modeli, v katerih je termalizacija ob prisotnosti interakcij onemogočena. Ker odsotnost transporta preprečuje termalizacijo, je Andersonov izolator, obravnavan v poglavju 2.1, primerno izhodišče za konstrukcijo modelov MBL. Obravnava fermionskih modelov brez spinskih prostostnih stopenj (ang. *spinless fermions* v nadaljevanju *brezspinski* fermioni) v poglavju 3.1 služi predvsem kot splošen pregled področja in nekaterih ključnih rezultatov. Predstavljena sta enodimenzionalni model t - V z dodatkom nereda in enodimenzionalni Heisenbergov model XXZ z naključnim magnetnim poljem. Zaradi obstoja Jordan-Wignerjeve transformacije, ki jo vpeljemo v En. (3.3), sta energijska spektra obeh modelov identična. Izmed fermionskih modelov s spinskimi prostostnimi stopnjami (ang. *spinful fermions*, v nadaljevanju *spinski* fermioni) sta v poglavju 3.2 podrobneje predstavljena Hubbardov model in model t - J z dodanim neredom. V poglavju 3.3 je opisana točna diagonalizacija modelskih hamiltonk, na kateri temelji presoja ergodičnosti oziroma lokaliziranosti v poglavjih 4 in 5.

3.1 Fermionski modeli brez spinskih prostostnih stopenj

Eden izmed prvih in do danes najpogosteje uporabljanih modelov fizike sistemov MBL je enodimenzionalni model t - V z dodanim neredom. Gre za enodimenzionalno verigo brezspinskih fermionov z interakcijami med najbližjimi sosedi in lokalnim neredom Andersonovega tipa. Pri nadaljnji razpravi bomo zavoljo jedrnatosti s poimenovanjem t - V v mislih vselej privzeli tudi prisotnost nereda.

Model dobimo, če v hamiltonko Andersonovega modela, podano z En. (2.9), vključimo medsosedske interakcije, katerih velikost določa parameter V :

$$H = -t \sum_i (c_i^\dagger c_{i+1} + \text{h.c.}) + V \sum_i n_i n_{i+1} + \sum_i u_i n_i. \quad (3.1)$$

Tako kot v Andersonovem modelu so vrednosti naključnih potencialov u_i porazdeljene enakomerno na intervalu $[-W, W]$ v skladu z En. (2.8), v kateri je W parameter velikosti nereda. V tem primeru sta pri ničelni temperaturi in polovični zasedenosti pasu možna dva režima, ki ju ločimo glede na velikost *parametra anizotropije*

$\Delta = V/(2t)$. Za šibko oziroma zmerno interakcijo v primeru $\Delta < 1$ je sistem prevodnik, v režimu močne interakcije pri $\Delta \geq 1$ pa izolator [36].

Leta 2007 sta s točno diagonalizacijo končnih sistemov Oganessian in Huse [34] v modelu t - V nakazala možnost obstoja MBL faze tudi pri neskončnih temperaturah.

Model t - V lahko z uporabo Jordan-Wignerjeve transformacije preslikamo na model anizotropne Heisenbergove spinske verige spinov $S = 1/2$ z naključnimi lokalnimi vrednostmi magnetnega polja h_i vzdolž smeri z . Hamiltonka modela, ki ga sicer imenujemo tudi model XXZ z naključnim magnetnim poljem, je podana z

$$H = J \sum_i \left[\frac{1}{2} (S_{i+1}^+ S_i^- + S_i^+ S_{i+1}^-) + \Delta S_{i+1}^z S_i^z \right] + \sum_i h_i S_i^z. \quad (3.2)$$

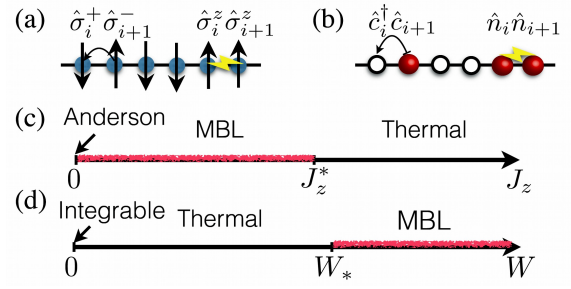
Tu so S_i^+ , S_i^- in S_i^z standardni operatorji za spin $S = 1/2$ na i -tem mestu v enodimenzionalni spinski verigi. Izmenjalna konstanta se z modelskimi parametri modela t - V izrazi kot $J = 2t$ [36], parameter anizotropije Δ pa smo definirali že zgoraj. Fermionski skakalni člen v modelu XXZ ustreza izmenjalnemu členu, medtem ko medsosedska fermionska interakcija ustreza členu s parametrom Δ . V odsotnosti naključnega člena je model rešljiv z uporabo Bethejevega nastavka [21]. Naključne vrednosti magnetnega polja so porazdeljene enakomerno na intervalu $[-2W, 2W]$. Jordan-Wignerjevo transformacijo v eni dimenziji podajajo zveze

$$S_i^+ = c_i^\dagger \prod_{j<i} e^{i\pi n_j}, \quad S_i^- = \left(\prod_{j<i} e^{-i\pi n_j} \right) c_i, \quad S_i^z = n_i - \frac{1}{2}. \quad (3.3)$$

Limita $\Delta \rightarrow 0$ ustreza neinteragirajočemu primeru, ko lahko spinski model preslikamo na model prostih fermionov v naključnem potencialu, torej na Andersonov model, ki smo ga obravnavali v poglavju 2.1. Kot smo tedaj pokazali, so v eni dimenziji vsa lastna stanja sistema lokalizirana za vsakršno končno vrednost parametra nereda W .

Interakcijo modeliramo s končnimi vrednostmi Δ . Vpliv prepleta interakcij in nereda na nastop MBL faze je shematsko prikazan na Sliki 3.1. Pri neki fiksni vrednosti parametra W so vsa lastna stanja sistema lokalizirana, če je velikost interaktivne sklopitve $J_z = J\Delta$ manjša od neke kritične in od nereda odvisne vrednosti $J_z^*(W)$. Če nered ni prevelik, ima J_z^* končno vrednost in tedaj nadkritične vrednosti J_z omogočajo termalizacijo. Podobno pri fiksni vrednosti J_z obstaja kritična vrednost parametra nereda W^* , nad katero so vsa stanja sistema lokalizirana. Medtem ko so stanja na robovih pasu lokalizirana tudi pri podkritičnih vrednostih nereda $W < W^*$, nakazujejo numerične študije [27] na obstoj delokaliziranih stanj v sredini pasu. V nasprotju z Andersonovim modelom torej ob prisotnosti interakcij *večdelčni* rob mobilnosti obstaja že v eni dimenziji.

Slika 3.1: **a)** in **b)** Shematski prikaz modela XXZ oziroma modela t - V v eni dimenziji in ekvivalence med njima. Rumeni puščice označujejo interakcijo. **c)** Prehod med MBL in ergodično fazo pri fiksnem W v odvisnosti od J_z . Točka $J_z = 0$ ustreza Andersonovemu izolatorju. **d)** Prehod med ergodično in MBL fazo kot funkcija parametra nereda W . Lokalizacija nastopi nad kritično vrednostjo W^* . Slika je bila vzeta iz Ref. [1].



V izotropnem primeru za $\Delta = 1$ in $J = 1$ znaša numerično izračunana kritična vrednost parametra nereda $W^* \approx 3.5$. Pri tej vrednosti nastopi prehod med ergodično in lokalizirano fazo [35]. Model XXZ je bil podrobno preučevan tudi v enem izmed prelomnih del s področja [44], v katerem je bila pokazana logaritemska rast prepletenostne entropije v odvisnosti od časa za začetno produktno (neprepleteno) stanje dveh podsistemov na spinski verigi. To nakazuje na kvalitativno razliko med Andersonovimi izolatorji in MBL sistemi, saj v prvih prepletenostna entropija lahko narašča za kratke čase, po dolgem času pa doseže konstantno vrednost.

3.2 Fermionski modeli s spinskimi prostostnimi stopnjami

V tem poglavju v obravnavo fermionskih sistemov vključimo tudi spinske prostostne stopnje in podrobneje predstavimo model t - J , ki ga numerično preučujemo v poglavjih 4 in 5. Gre za model, ki v limiti močne meddelčne interakcije ustreza fiziki nizkoenergijskih stanj Hubbardovega modela. Zavaljo formalne vpeljave pojmov je najprej na kratko predstavljen Hubbardov model, medtem ko se modelu t - J posvetimo podrobneje, saj ga v nadaljnjih poglavjih preučujemo tudi numerično. V Dodatku A je podana izpeljava preslikave med modeloma, in sicer tako v primeru urejenega sistema kot v prisotnosti različnih tipov nereda. Posebej nas zanimata *potencialni* in *spinski* nered, torej nereda, ki se sklapljata z nosilci naboja oziroma spini. V tem vrstnem redu smo oba tipa nereda že srečali v En. (3.1) in (3.2).

3.2.1 Hubbardov model

Kot izhodišče za obravnavo modela t - J najprej formalno uvedemo Hubbardov model, iz katerega prvega izpeljemo. Za splošen tip nereda je hamiltonka Hubbardovega modela podana z

$$H = H_t + H_U + H_{\text{dis}} = -t \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} (c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + c_{j,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma}) + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} + \sum_{i,\sigma} h_{i,\sigma} n_{i,\sigma}. \quad (3.4)$$

Pri tem $\langle ij \rangle$ označuje vsoto po najbližjih sosedih, σ pa vsoto po projekcijah spina $S = 1/2$ na os z . Fermionski kreacijski in anihilacijski operatorji $c_{i,\sigma}^\dagger$, $c_{i,\sigma}$ ustvarijo oziroma uničijo delec z dano projekcijo spina σ na i -tem mestu v kristalni rešetki.

V Hubbardovi hamiltonki tako kot vselej do sedaj skakalni člen H_t opisuje skakanje elektronov med sosednjimi mesti v kristalni rešetki, kjer je t verjetnost za tovrstno tuneliranje. Interakcijski člen H_U modelira coulombski odboj med elektroni in ob dvojni zasedenosti mesta povzroči energijski prirastek U . V členu H_{dis} , ki modelira prispevek nereda v sistemu, so $h_{i,\sigma}$ v skladu z neko verjetnostno porazdelitvijo izžrebane naključne vrednosti, pri čemer sta porazdelitvi za posamezni projekciji spina v splošnem lahko različni.

Pri zapisu Hubbardove hamiltonke smo upoštevali t.i. *bazo zasedenosti posameznih mest* (ang. *site-occupational basis*), kjer so na i -tem mestu v kristalni rešetki možna štiri stanja, in sicer

$$|\psi_{i_0}\rangle = |0\rangle_i, \quad |\psi_{i_1}\rangle = |\uparrow\rangle_i, \quad |\psi_{i_2}\rangle = |\downarrow\rangle_i, \quad |\psi_{i_3}\rangle = |\uparrow\downarrow\rangle_i \quad (3.5)$$

V prvem stanju na i -tem mestu ni elektrona oziroma se tam nahaja vrzel, naslednji dve stanji pa ustrezata prisotnosti elektrona s spinom $1/2$ in eno izmed dveh možnih projekcij spina na os z . Zadnje stanje pomeni zasedenost mesta z dvema elektronom z nasprotnim spinom.

Za številsko gostoto delcev in skupno projekcijo spina na os z na i -tem mestu veljata zvezi

$$n_i = n_{i,\uparrow} + n_{i,\downarrow}, \quad S_i^z = \frac{1}{2} (n_{i,\uparrow} - n_{i,\downarrow}). \quad (3.6)$$

Če želimo v En. (3.4) modelirati prispevek nereda, ki se sklaplja le z nosilci naboja, ne pa tudi njihovimi spinskimi prostostnimi stopnjami, potem za porazdelitev $h_{i,\sigma}$ predpišemo $h_{i,\uparrow} = h_{i,\downarrow}$. Tak tip nereda smo srečali denimo v En. (3.1). Nered, ki se sklaplja s spinskimi prostostnimi stopnjami in je odvisen od projekcije spina na os z , pa dobimo prek predpisa $h_{i,\uparrow} = -h_{i,\downarrow}$. Ta tip nereda poznamo iz En. (3.2).

3.2.2 Model t - J

V magistrski nalogi z numeričnimi metodami preučujemo model t - J [41] s periodičnimi robnimi pogoji na enodimenzionalni verigi. V limiti močnega coulombskega odboja U model opisuje fiziko nizkoenergijskih stanj Hubbardovega modela. Ker je za velike U dvojnja zasedenost mest energijsko neugodna, je v modelu t - J prepovedana in so za razliko od En. (3.5) na vsakem mestu možna le tri stanja:

$$|\psi_{i_0}\rangle = |0\rangle_i, \quad |\psi_{i_1}\rangle = |\uparrow\rangle_i, \quad |\psi_{i_{-1}}\rangle = |\downarrow\rangle_i. \quad (3.7)$$

Sledeč izpeljavi, navedeni v Dodatku A, dobimo za model t - J v prisotnosti nereda hamiltonko

$$\begin{aligned} H &= -t \sum_{i,\sigma} \left(\tilde{c}_{i,\sigma}^\dagger \tilde{c}_{i+1,\sigma} + c.c. \right) + J \sum_i \left(\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1} - \frac{n_i n_{i+1}}{4} \right) + \sum_i h_i S_i^z + \sum_{i,\sigma} u_i n_{i,\sigma} = \\ &= H_t + H_J + H_h + H_u. \end{aligned} \quad (3.8)$$

Pri tem so $\tilde{c}_{i,\sigma}^\dagger$ in $\tilde{c}_{i,\sigma}$ *projicirani* fermionski kreacijski in anihilacijski operatorji, ki jih vpeljemo v skladu s predpisom

$$\tilde{c}_{i,\sigma}^\dagger = c_{i,\sigma}^\dagger (1 - n_{i,-\sigma}) \quad \tilde{c}_{i,\sigma} = (1 - n_{i,-\sigma}) c_{i,\sigma}. \quad (3.9)$$

3.2. Fermionski modeli s spinskimi prostostnimi stopnjami

Tako definirani kreacijski operatorji lahko na i -tem mestu v kristalni verigi ustvarijo delec z dano z -projekcijo spina σ samo v primeru, ko se na mestu predhodno še ne nahaja delec z nasprotno projekcijo spina na os z . Na ta način upoštevamo prepoved dvojne fermionske zasedenosti mest. Ob upoštevanju omenjene prepovedi je vloga člena H_t sicer enaka kot v Hubbardovem modelu.

Meddelčno interakcijo v hamiltonki modelira Heisenbergov izmenjalni člen H_J , pri čemer za spinske operatorje za spin $S = 1/2$ velja $\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j = \frac{1}{2} (S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+) + S_i^z S_j^z$. Pri numeričnih simulacijah za izmenjalno interakcijo J vselej privzamemo izotropijo. V Dodatku A pokažemo, da se J z modelskimi parametri Hubbardovega modela izraža kot $J = \frac{4t^2}{U}$. Delovanje členov H_t in H_J je shematsko prikazano in razloženo na Sliki 3.2.

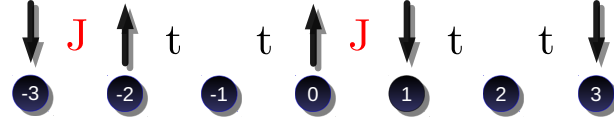
S členom H_h v hamiltonki modeliramo prispevek naključnega magnetnega polja v smeri osi z , ki se zeemansko sklaplja s spinskimi prostostnimi stopnjami, pri čemer je h_i velikost naključno izžrebanega magnetnega polja na i -tem mestu v kristalni rešetki. Podobno člen H_u modelira potencialni nered, ki se sklaplja z vrzeli v kristalni rešetki, u_i pa je naključno izžrebana vrednost energije vrzeli, ki se nahaja na i -tem mestu v kristalni rešetki. Vrednosti w_i in h_i tipično izžrebamo v skladu s škatlasto verjetnostno porazdelitvijo, kot prikazuje Slika 3.3, na kateri sta W in H parametra nereda, s katerima določamo velikost spinskega in vrzelnega potencialnega nereda. Prehod med ergodično in MBL fazo v modelu zasledujemo kot funkcijo velikosti obeh omenjenih parametrov.

V besedilu velikost sistema označuje L , N_h število vrzeli, N_u pa število spinov $1/2$ s projekcijo spina navzgor. Pri analizi se vselej osredotočimo na podprostor hamiltonke, podane z En. (3.8), s fiksnim številom vrzeli in ničelno skupno projekcijo spina na os z , $S^z = 0$. Stanja s skupno projekcijo spina nič so v hamiltonki najštevilčnejša, zato gre za statistično najbolj zastopan sektor. Vse funkcije z dobro določenim spinom imajo namreč tudi projekcijo v podprostoru s $S^z = 0$. Število stanj v podprostoru s fiksnim številom vrzeli in ničelnim spinom določimo s pomočjo kombinatorike - najprej preštejemo število razporeditev N_h vrzeli na L mest v verigi, kar nato pomnožimo še s številom razporeditev N_u spinov na preostalih $L - N_h$ mest. Število stanj torej podaja zveza

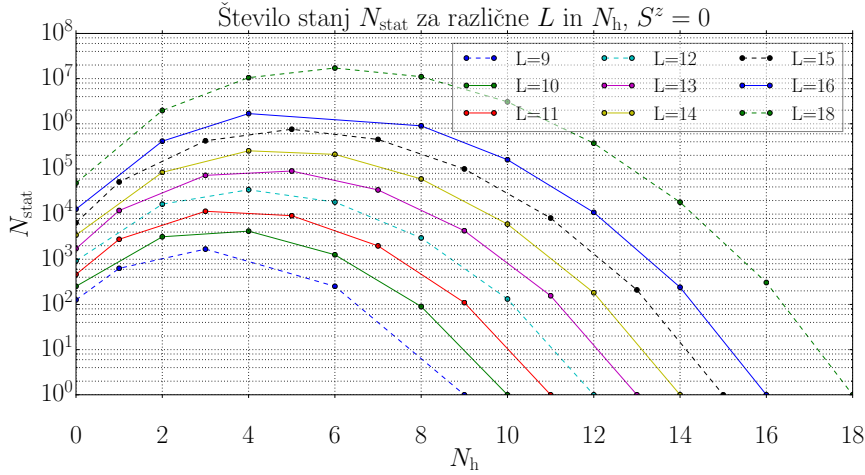
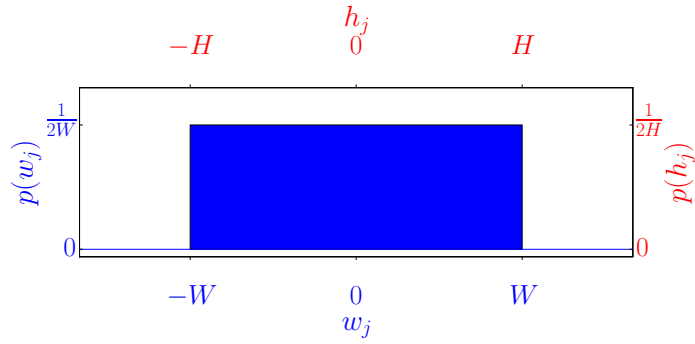
$$N_{\text{stat}} = \binom{L}{N_h} \binom{L - N_h}{N_u}. \quad (3.10)$$

Odvisnost števila stanj od velikosti sistema in števila vrzeli je za primer $S^z = 0$ prikazana na Sliki 3.4.

Slika 3.2: Shematski prikaz modela t - J na verigi z $L = 7$ mesti, $N_h = 2$ vrzelma in $N_u = 2$ navzgor obrnjenima spinoma in odprtimi robnimi pogoji. J označuje velikost izmenjalne interakcije med spini sosednjih elektronov, ki obrne par nasprotno obrnjenih spinov (ang. *spin-flips*). Verjetnost za tuneliranje elektrona na prazno mesto označuje t .



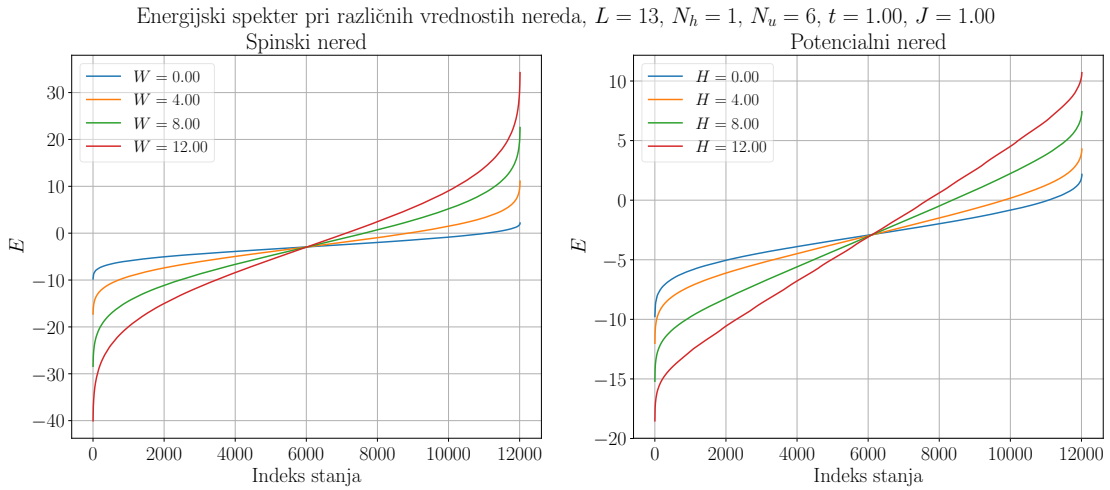
Slika 3.3: Naključne vrednosti magnetnega polja w_i in potenciala h_i tipično izžrebam v skladu s škatlasto verjetnostjo porazdelitvijo, kjer sta W in H parametra nereda.



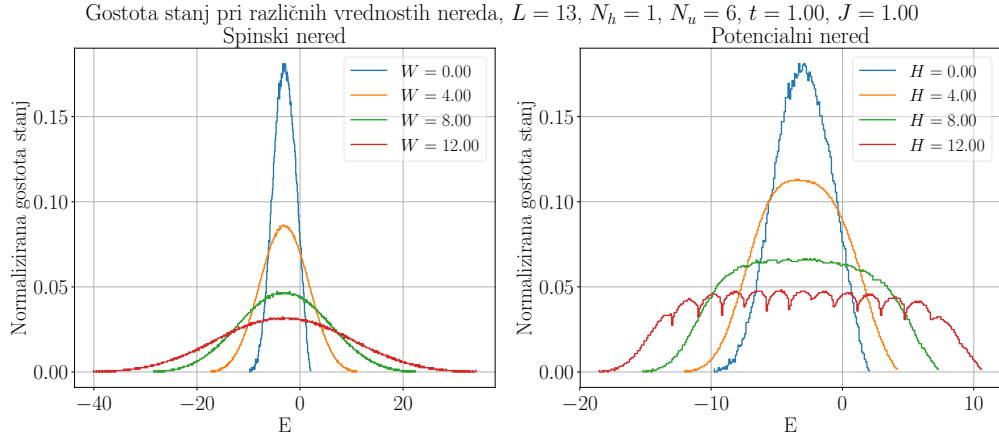
Slika 3.4: Odvisnost števila stanj od velikosti sistema in števila dopantov (vrzeli) razkrije, da smo pri študijah s polno diagonalizacijo precej omejeni s številom dostopnih sistemov, ki so nam na voljo, kar precej oteži skalirno analizo, s katero bi radi napovedali obnašanje sistema v termodinamski limiti neskončnega sistema.

3.3 Točna diagonalizacija modelskih hamiltonk

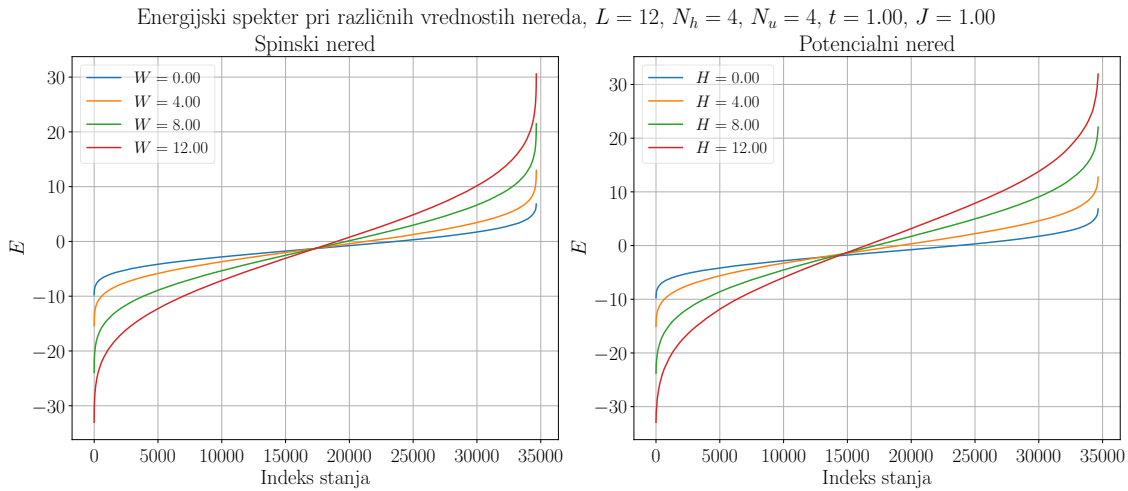
V Poglavjih 4 in 5 predstavljena numerična analiza modela t - J temelji na točni diagonalizaciji modelskih hamiltonk, podanih z En. (3.8). Pri dani vrednosti parametrov t, J, W in H hamiltonko najprej diagonaliziramo pri različnih realizacijah nereda. Diagonalizacijo izvedemo s programom, napisanem v programskem jeziku **fortran**, pri čemer diagonalizacijo izvedemo s klicem rutine **spev** iz Intelove knjižnice **MKL**, ki je namenjena diagonalizaciji realnih simetričnih matrik. Izračune izvajamo na gruči LIPS na odseku F1 na Inštitutu Jožef Stefan. Primer rezultatov diagonalizacije je prikazan na grafih na Slikah 3.5 in 3.7, in sicer za primera z dopiranjem z eno vrzeljo in s tretjinskim dopiranjem. Grafi na Slikah 3.6 in 3.8 prikazujejo normalizirano gostoto stanj za oba primera.



Slika 3.5: Primeri energijskih spektrov pri $L = 13, N_h = 1, N_u = 6$. Prikazani so rezultati za različne vrednosti parametrov W in H , pri čemer so rezultati za spinski nered vsakokrat izračunani s povprečenjem po 100 realizacijah nereda, rezultate za potencialni nered pa s povprečenjem po 600 realizacijah. Pri dopiranju z eno samo vrzeljo opazimo, da je vpliv povečevanja spinskega nereda na spekter znatno večji od vpliva povečevanja potencialnega nereda. Razlog povprečenja po večjem številu realizacijah spinskega nereda je naveden v komentarju k Sliki 3.6.

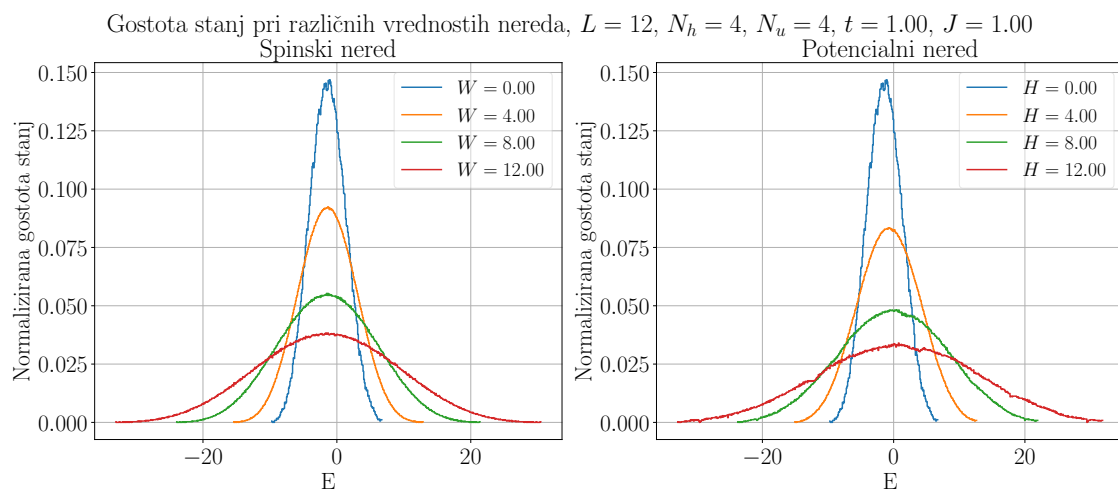


Slika 3.6: Normalizirano število stanj na energijski interval za spektre, prikazane na Sliki 3.5. V primeru spinskega nereda ima gostota stanj vselej izrazit vrh na sredini spektra. Oscilacije v primeru velikega potencialnega nereda $H = 12$ so najverjetneje posledica prisotnosti zgolj ene vrzeli. Slednjo lahko na L mest razporedimo na L načinov, toliko je tudi različnih matričnih elementov v (diagonalnem) naključnem potencialnem členu H_u . Pri velikih parametrih nereda H , kot je na naši energijski skali npr. $H = 12$, postane prispevek člana H_u v hamiltonki dominanten, zato opazimo oscilacije gostote stanj. Lokalni minimumi slednje ločijo ravno $L = 13$ različnih sektorjev. Grafe za spinski nered smo izračunali s povprečenjem po 100 realizacijah nereda, grafe za potencialni nered pa smo preizkušali povprečenja z med 100 in 600 realizacijami. Kvalitativno se ne zdi, da bi večje povprečenje bistveno spremenilo obliko krivulje, zato je na grafu prikazan le primer povprečenja po 600 vzorcih.



Slika 3.7: Energijski spektri v primeru spinskega in potencialnega nereda za tretjinsko dopiranje na sistemu z $N_{\text{stat}} = 34650$ stanji. V tem primeru sta vpliva spinskega in potencialnega nereda na širino spektra dokaj podobna. Energijsko skalo prispevka spinskega nereda ocenimo kot $(L - N_h) \cdot \frac{W}{2}$, kjer s faktorjem $\frac{1}{2}$ upoštevamo velikost spina v izrazu za zeemansko sklopitev spinov z magnetnim poljem. Energijsko skalo potencialnega nereda podaja vrednost $N_h \cdot H$. Zaradi razmeroma velikih sistemov smo povprečenje izvedli po 50 naključnih vzorcih za vsak tip nereda.

3.3. Točna diagonalizacija modelskih hamiltonk



Slika 3.8: Gostota stanj za primer s tretjinskim dopiranjem in spinskim oziroma potencialnim neredom. Oscilacij gostote stanj v primeru potencialnega nereda tokrat ne opazimo.

Poglavje 4

Statistične lastnosti hamiltonskih spektrov

4.1 Statistika sosednjih energijskih nivojev

Za presojo ergodičnosti oziroma večdelčne lokaliziranosti sistema analiziramo statistiko energijskih spektrov modelske hamiltonke pri različnih vrednostih parametrov W in H . Pri tem se zanašamo na spoznanja teorije naključnih matrik [28] (ang. *random matrix theory*, v nadaljevanju RMT), ki temelji na pionirskem delu Eugenea Wignerja in Freemana J. Dysona, ki sta razvila teoretični model za opis energijskih spektrov kompleksnih atomskih jeder. Njuna ideja temelji na predpostavki, da je točna napoved energijskih nivojev in njim pripadajočih lastnih stanj v kompleksnih sistemih, kot so jedra težkih elementov, tako rekoč brezupna naloga. Namesto točnega izračuna je zato smiselneje preučevati statistične lastnosti spektrov. Druga ključna opazka je, da imajo modelske hamiltonke kompleksnih sistemov v generičnih bazah strukturo, ki je močno podobna strukturi naključnih matrik. Slednje velja v primeru, ko matrične elemente opazujemo v dovolj ozkem energijskem oknu, v katerem je gostota stanj približno konstantna. Analiza spektralnih lastnosti naključnih matrik tako lahko omogoči vpogled tudi v spektralne lastnosti hamiltonk kompleksnih sistemov, v kolikor zagotovimo, da naključne matrike pripadajo simetrijskemu razredu preučevane modelske hamiltonke.

Generičnost baze pomeni splošno izbiro baze, ki ni posebej ‘prikrojena’ za potrebe našega problema. V poglavju 3 predstavljena baza zasedenosti stanj ali baza lastnih stanj hamiltonke seveda nista generični bazi, saj ima v njih hamiltonka redko pasovno oziroma diagonalno strukturo, neničelni matrični elementi pa so vse prej kot naključni [16]. Napovedi RMT so kljub temu veljavne, saj predpostavka naključnih matričnih elementov velja za izbiro splošne baze.

V naslednjih poglavjih predstavimo Wigner-Dysonovo in Poissonovo statistiko, ki opišeta razmik med sosednjimi energijskimi nivoji v ergodičnem in MBL ali integrabilnem sistemu. Razmik med sosednjimi energijskimi nivoji je definiran kot

$$s_n = E_{n+1} - E_n, \tag{4.1}$$

kjer je E_n n -ti energijski nivo.

Poleg statistike odnikov med sosednjimi nivoji preučujemo tudi statistiko razmerij odnikov med sosednjimi energijskimi nivoji, ki sta jo v članku iz leta 2007 [34] prva uvedla Oganessian in Huse:

$$\tilde{r}_n = \frac{\min(s_n, s_{n-1})}{\max(s_n, s_{n-1})}, \quad r_n = \frac{s_n}{s_{n-1}}. \quad (4.2)$$

V praksi ergodičnost oziroma večdelčno lokaliziranost sistema presojamo na podlagi povprečne vrednosti $\langle \tilde{r} \rangle$, za katero v obeh režimih obstajata dobro določeni limitni vrednosti [8]. Statistika razmerij odnikov \tilde{r}_n je v primerjavi s statistiko razmikov med nivoji s_n za obravnavo prikladnejša, saj pred izračunom ni treba izvesti *razgrnjenja* spektra (ang. *spectral unfolding*), ki ga podrobneje predstavimo v poglavju 4.1.4.

4.1.1 Wigner-Dysonova statistika razmikov med sosednjimi nivoji

V tem poglavju je izpeljana Wigner-Dysonova statistika za razmik med sosednjimi energijskimi nivoji v naključnih matrikah. Pri izpeljavi sledimo preglednemu članku, navedenem v Ref. [16]. Osnovno idejo RMT lahko predstavimo z analizo hamiltonke velikosti 2×2 , v kateri matrične elemente izžrebamo v skladu z Gaussovo verjetnostno porazdelitvijo z ničelnim povprečjem in varianco σ . Pri tem upoštevamo še simetrije našega problema:

$$\hat{H} = \begin{bmatrix} \varepsilon_1 & \frac{V}{\sqrt{2}} \\ \frac{V^*}{\sqrt{2}} & \varepsilon_2 \end{bmatrix} \quad (4.3)$$

Če velja simetrija na obrat časa, $V = V^*$, lahko hamiltonko zapišemo kot realno matriko. Slednje drži tudi v primeru hamiltonke, podane z En. (3.8). Diagonalizacija naključne 2×2 hamiltonke je enostavna, lastni energiji sta

$$E_{1,2} = \frac{\varepsilon_1 + \varepsilon_2}{2} \pm \frac{1}{2} \sqrt{(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)^2 + 2V^2} \quad (4.4)$$

Od tod lahko izračunamo statistiko razmikov med energijskimi nivoji, $P(E_1 - E_2 = s) \equiv P(s)$,

$$P(s) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2} \sigma^3} \int d\varepsilon_1 \int d\varepsilon_2 \int dV \delta \left(\sqrt{(\varepsilon_1 - \varepsilon_2)^2 + 2V^2} - s \right) \exp \left(-\frac{\varepsilon_1^2 + \varepsilon_2^2 + V^2}{2\sigma^2} \right) \quad (4.5)$$

Z zamenjavo spremenljivk, $\varepsilon_2 = -\varepsilon_1 + \sqrt{2}\xi$ in integracijo po ε_1 dobimo

$$P(s) = \frac{1}{2\pi\sigma^2} \int \int d\xi dV \delta \left(\sqrt{2\xi^2 + 2V^2} - s \right) \exp \left(-\frac{\xi^2 + V^2}{2\sigma^2} \right) \quad (4.6)$$

Z uvedbo cilindričnih koordinat, $V = r \cos(x)$, $\xi = r \sin(x)$, dobimo

$$P(s) = \frac{s}{2\sigma^2} \exp \left(-\frac{s^2}{4\sigma^2} \right) \quad (4.7)$$

Nazadnje porazdelitev še normirano in povprečni razmik med nivoji \bar{s} postavimo na vrednost 1, pa dobimo za realne simetrične naključne matrike *Wigner-Dysonovo* statistiko za razmik med energijskimi nivoji:

$$P_{\text{WD}}(s) = \frac{\pi s}{2} \exp\left(-\frac{\pi}{4}s^2\right) \quad (4.8)$$

Zgornja statistika izkazuje dve splošni generični lastnosti, značilni za nivojske statistike kvantnih kaotičnih sistemov. V limiti $s \rightarrow 0$ je verjetnost za ničeln razmik med nivoji ničelna, kar kaže na odboj med nivoji (ang. *level repulsion*). Kot bomo videli nekoliko kasneje, je to bistveno drugače od nivojskih statistik v integrabilnem ali MBL primeru. Za velike razmike s verjetnost $P_{\text{WD}}(s)$ pada kot gaussovska porazdelitev. Lastnosti statistike so bile sprva izpeljane za kvantne sisteme s klasičnim kaotičnim analogom, a se je kasneje izkazalo, da veljajo tudi za sisteme brez omejene analogije.

Izraz (4.7) je eksakten za hamiltonke velikosti 2×2 , izkaže pa se [1] [8], da je ujemanje dobro tudi za višjedimezionalne hamiltonke. V tem primeru definiramo ansambel naključnih matrik, ki jih žrebamo v skladu z naključno Gaussovsko porazdelitvijo kot

$$P_{\text{GOE}}(\hat{H}) \propto \exp\left(-\frac{1}{2a^2} \text{Tr}(\hat{H}^2)\right) \equiv \exp\left(-\frac{1}{2a^2} \sum_{ij} H_{ij} H_{ji}\right) \quad (4.9)$$

Tako definiran ansambel matrik se imenuje gaussovski ortogonalni ansambel (GOE), z zgornjo definicijo pa zadostimo zahtevi po invariantnosti ansambla na vsakršne ortogonalne transformacije, saj je porazdelitev odvisna zgolj od sledi kvadrata posamezne hamiltonke, kar je po definiciji invariantna količina. Hkrati je porazdelitev gaussovska, saj je sled vsota kvadratov naključno porazdeljenih matričnih elementov in kot takšna zadošča centralnemu limitnemu izreku.

Izpeljava natančnih izrazov za nivojske statistike hamiltonk iz GOE ni predmet te magistrske naloge, v splošnem zanje zaključena analitična oblika niti ne obstaja. Podrobnejša analiza je navedena v članku v Ref. [8], tu bomo za presojo uporabljali rezultat, podan z En. (4.7), ki dobro popiše tudi večdimenzionalne primere.

4.1.2 Poissonova statistika razmikov med sosednjimi nivoji

V predhodnem podpoglavju smo obravnavali nivojsko statistiko v kvantnokaotičnih sistemih, v katerih so razmiki med sosednjimi energijskimi nivoji porazdeljeni v skladu z Wigner-Dysonovo statistiko. Porazdelitev za kvantne integrabilne sisteme sta prva obravnavala Berry in Tabor v članku iz leta 1977 [12]. Za potrebe razjasnitve pojmov, ki nastopajo v magistrski nalogi, so tu navedeni le ključni rezultati.

Med enostavnejše primere neergodičnega sistema sodi veriga neodvisnih kvantnih harmonskih oscilatorjev z nesoizmerljivimi (ang. *incommensurate*) frekvencami. V odsotnosti medsebojne sklopitve lahko vsakega izmed oscilatorjev diagonaliziramo neodvisno od preostalih, skupno energijo pa dobimo s seštevanjem enooscilatorskih energij kot

$$E = \sum_j n_j \omega_j,$$

kjer je j lastna frekvenca, n_j pa zasedbeno število j -tega oscilatorja. Za velike vrednosti E dobimo podobne vrednosti energije za različne nabore zasedbenih števil $\{n_j\}$, zato lahko energijske nivoje obravnavamo kot nekorelirana naključna števila. V tem primeru je verjetnost, da se na energijskem intervalu dolžine δE nahaja m energijskih nivojev, enaka Poissonovi porazdelitvi

$$P_m = \frac{\lambda^m}{m!} \exp(-\lambda \delta E), \quad (4.10)$$

kjer je λ enaka inverznemu povprečnemu razmiku med nivoji v spektru. Porazdelitev razmikov med nivoji tako dobimo na enak način kot porazdelitev čakalnih časov med dogodki v Poissonovem procesu:

$$P_{\text{Poisson}}(s) = P_0 = \exp(-s) \quad (4.11)$$

Pri tem smo postavili $\lambda = 1$ in vpeljali s kot $s = \delta E$. V nasprotju z Wigner-Dysonovo porazdelitvijo pri Poissonovi statistiki ni odboja med nivoji, saj ima porazdelitev vrh pri $s = 0$. V integrabilnih sistemih je slednje posledica ohranjenih količin. Podobno je v MBL sistemih veljavnost Poissonove statistike posledica uvedbe naključnih členov v modelsko hamiltonko.

Splošna izjava, ki povzame vsebino tega podpoglavja, pravi, da izkazujejo kvantni sistemi s klasičnim analogom Poissonovo statistiko razmikov med sosednjimi energijskimi nivoji. Izjava drži tudi v primeru mnogih kvantnih sistemov brez klasične ustreznice, kljub temu pa obstajajo tudi protiprimeri, npr. en delec v harmonskem potencialu. Predpostavka veljavnosti Poissonove statistike je zato danes znana kot *domneva* Berryja in Taborja (ang. *Berry-Tabor conjecture*) [12].

Na Sliki 4.1 so prikazani primeri numerično izračunanih nivojskih statistik v ergodičnem, vmesnem in MBL režimu skupaj z Wigner-Dysonovo in Poissonovo statistiko.

4.1.3 Statistika razmerij odmikov sosednjih nivojev \tilde{r}

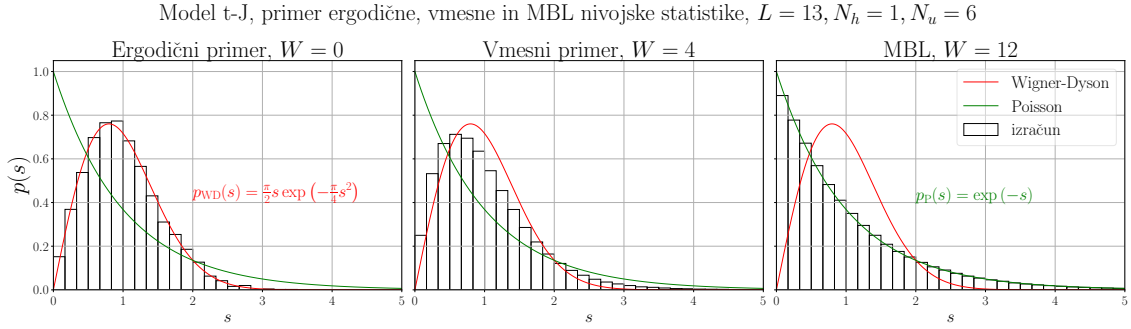
Po postopku, opisanem v poglavju o numerični implementaciji izračunov, izračunamo povprečno vrednost količine \tilde{r} , ki jo podaja En. (4.2). V ergodičnem primeru mora izračunana vrednost $\langle \tilde{r} \rangle$ čim bolj ustrezati GOE vrednosti, ki znaša:

$$\langle \tilde{r} \rangle_{\text{GOE}} = 0.5307 \quad (4.12)$$

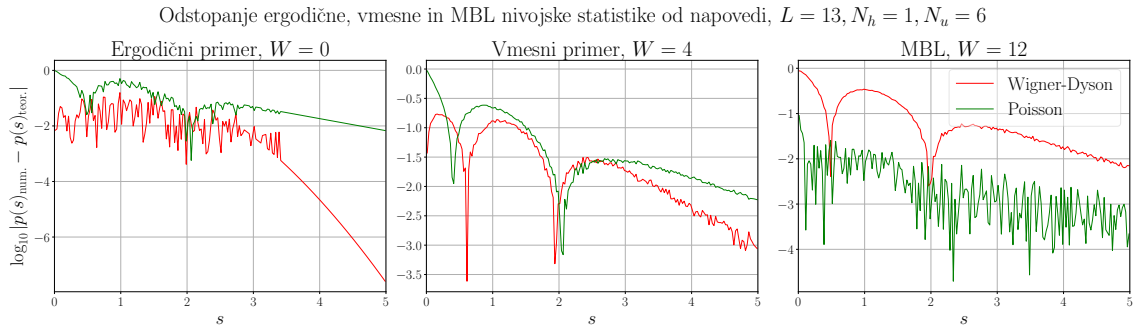
V integrabilnem ali MBL primeru ustreza povprečno razmerje razmikov sosednjih nivojev vrednosti za Poissonovo porazdeljen spekter lastnih vrednosti:

$$\langle \tilde{r} \rangle_{\text{Poisson}} = 0.38629 \quad (4.13)$$

Vrednost $\langle \tilde{r}_{\text{GOE}} \rangle$ je bila izračunana numerično, medtem ko je napoved $\langle \tilde{r}_{\text{Poisson}} \rangle$ točna analitična vrednost [8].



Slika 4.1: Numerično izračunana statistika razmikov med sosednjimi energijskimi nivoji za model t - J , $L = 13$, $N_h = 1$, $N_u = 6$. Uporabili smo vrednosti modelskih parametrov $t = 1$ in $J = 1$, ki sta od tu naprej za vse prikazane simulacije enaki. Na podlagi komplementarnih študij časovne dinamike modela [26] smo izbrali vrednosti parametra spinskega nereda W , za katere je obnašanje sistema poznano. Pri $W = 0$ je sistem ergodičen, kar je razvidno iz ujemanja numeričnih izračunov s krivuljo Wigner-Dysonove statistike, podobno je pri $W = 12$ dobro ujemanje s krivuljo Poissonove statistike. V vmesnem režimu se numerično izračunane vrednosti ne ujemajo z nobeno od teoretičnih napovedi. Pri dani konfiguraciji ima model 12012 stanj, rezultati pa so izračunani s povprečenjem po 100 realizacijah spinskega nereda. Natančne podrobnosti numerične implementacije so podane v naslednjem poglavju.



Slika 4.2: Desetiški logaritem absolutne vrednosti razlike med numerično vrednostjo in teoretično napovedjo za primere izračunov, predstavljene na Sliki 4.1. Vsakokrat sta za primerjavo predstavljena izračuna za Wigner-Dysonovo in Poissonovo statistiko.

V naslednjih dveh poglavjih sta razložena ključna koraka numerične implementacije izračuna obravnavanih statistik, in sicer razgrnjenje spektra in lokalni zlom simetrije.

4.1.4 Razgrnjenje spektra

Pred izračunom statistike za razmik med nivoji, podan z En. (4.1), moramo izvesti razgrnjenje spektra [4], s katerim povprečni razmik med nivoji fiksiramo na enotsko vrednost. To omogoča medsebojno primerjavo statistike različnih spektrov, ki imajo sicer v splošnem kvantitativno različno gostoto stanj. Slednje je razvidno z grafom na Slikah 3.5 in 3.6, kjer sprememba parametra nereda znatno vpliva na obliko spektra in gostoto stanj. Podobno na gostoto stanj pri enakih vrednostih modelskih parametrov vpliva tudi sprememba velikosti sistema, ki spremeni število stanj.

Pri diagonalizaciji dobimo spekter po velikosti urejenih lastnih vrednosti E_i . *Kumulativno število nivojev* $\tilde{N}(E)$ z energijo, manjšo od E , je definirano kot

$$\tilde{N}(E) = \sum_{E_i} \Theta(E_i - E), \quad (4.14)$$

gostoto stanj pa določa zveza

$$\tilde{\rho}(E) = \frac{d\tilde{N}(E)}{dE}. \quad (4.15)$$

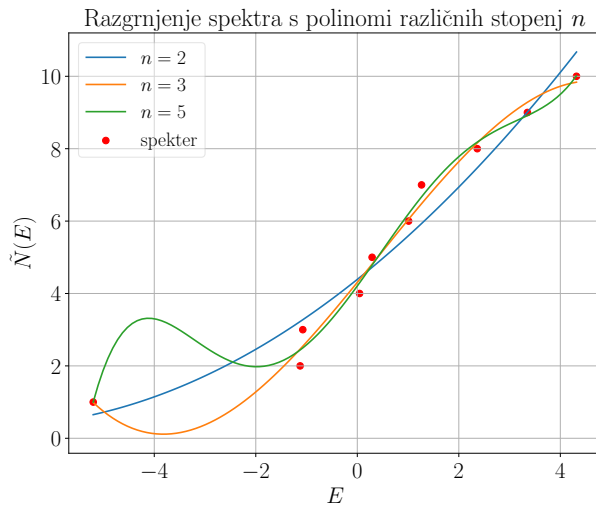
V odvisnosti $\tilde{N}(E_j)$, kjer je j zaporedni indeks lastnega stanja, je razmik med zaporednimi nivoji po definiciji En. (4.14) enak 1. Diskretni kumulativni porazdelitvi $\tilde{N}(E_j)$ priredimo polinomsko krivuljo $g(E_j)$ dovolj visoke stopnje in jo tako zgладimo. V našem programu za prilagoditev krivulje uporabimo funkciji `polyfit` in `poly1d` iz knjižnice `numpy` v programskem jeziku `python`. Namesto razmika med nivojema E_n in E_{n+1} v energijskem spektru tako spremljamo razmik med nivojema prilagojenega polinoma $g(E_n)$ in $g(E_{n+1})$. Vlogo razmika med sosednjimi nivoji s , podanega z En. (4.1), ima tako v naših izračunih v resnici količina \tilde{s} , podana kot

$$\tilde{s}_n = g(E_{n+1}) - g(E_n).$$

V razgrnjenem energijskem spektru je povprečna gostota stanj enaka ena.

Razgrnitev spektra je potrebna pri izračunih statistike razmikov med sosednjimi nivoji (glej Sliko 4.1), pri statistiki razmerij razmikov med sosednjimi nivoji \tilde{r} , ki jo podaja En. (4.2), pa ne. V tem primeru je količina namreč že po definiciji omejena na interval med 0 in 1 in tako nanjo učinki velikosti sistema in spremenljive gostote stanj nimajo vpliva. Primer razgrnitve spektra je prikazan na Sliki 4.3.

Slika 4.3: Primer razgrnitve spektra za sistem z $L = 5$, $N_h = 3$ in $N_u = 1$, ki ima 20 stanj. Ker napovedi RMT dobro veljajo za stanja v središču spektra [16], poleg tega so stanja na robovih spektra občutljivejša na učinke končne velikosti sistema, v izračunih v spektru vselej upoštevamo le polovico stanj med prvim in zadnjim kvartilom vseh stanj, zato je na grafu prikazanih le 10 točk. Kot najprimernejša izbira za glajenje porazdelitve se v tem primeru izkaže kar polinom stopnje 2, pri prevelikih vrednostih n nastopijo težave s slabo pogojenostjo polinomov. Pri večjih sistemih smo tipično uporabljali $n = 15$.



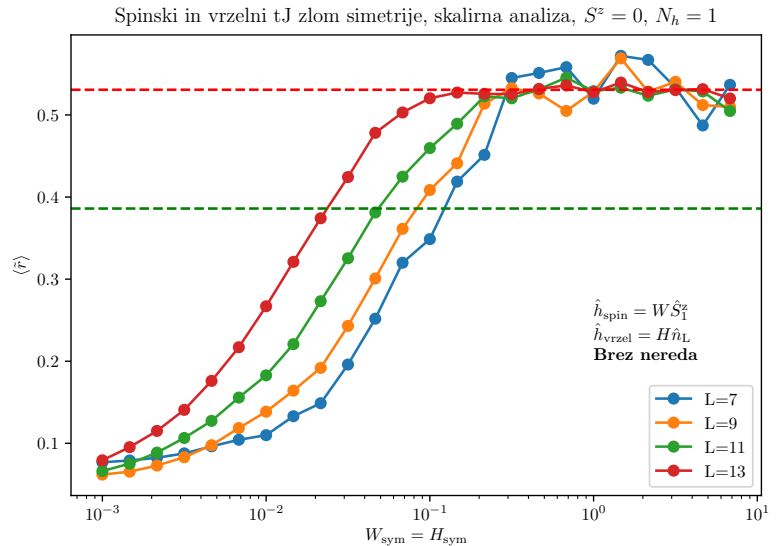
4.1.5 Lokalni zlom simetrije

Obravnava katerekoli izmed do zdaj navedenih nivojskih statistik je smiselna samo v primeru, ko v spektru nimamo degeneracij, ki so posledica nezlomljenih simetrij hamiltonke. Za primerno analizo moramo torej bodisi na primeren način izbrati bazo sistema in spekter preučevati samo na enem izmed simetrijskih podprostorov hamiltonke bodisi moramo hamiltonki dodati šibko perturbacijo, ki zlomi simetrije, vendar bistveno ne spremeni energijske skale sistema. Pri analizi, predstavljeni v magistrski nalogi, uporabljamo drugo možnost, in sicer hamiltonki dodamo lokalna člena, ki se sklapljata s spinom oziroma z vrzeljo:

$$h_{\text{spin}} = W_{\text{sym}} S_1^z, \quad h_{\text{hole}} = H_{\text{sym}} n_L. \quad (4.16)$$

Pri tem sta W_{sym} in H_{sym} parametra spinskega in vrzelnega zloma simetrije. Njuno najprimernejšo velikost določimo iz pogoja, da moramo v ergodičnem režimu ob odsotnosti vsakršnega nereda za povprečje $\langle \tilde{r} \rangle$ dobiti vrednost $\langle \tilde{r} \rangle_{\text{GOE}} = 0.5307$. Rezultati analize zloma simetrije so prikazani na Sliki 4.4.

Slika 4.4: Povprečna vrednost $\langle \tilde{r} \rangle$ ob odsotnosti vsakršnega nereda pri skupnem povečevanju parametrov W_{sym} in H_{sym} . V kolikor so v spektru prisotne nezlomljene simetrije, potem statistika ob odsotnosti nereda ni dobro definirana in vrne napačen rezultat. Za vse prikazane velikosti sistema degeneracije učinkovito odpravi vrednost $W_{\text{sym}} = H_{\text{sym}} = 0.5$, pri čemer vrednost z naraščajočim L pada. Z rdečo in zeleno premico sta označeni vrednosti $\langle \tilde{r} \rangle_{\text{GOE}}$ oziroma $\langle \tilde{r} \rangle_{\text{Poisson}}$.



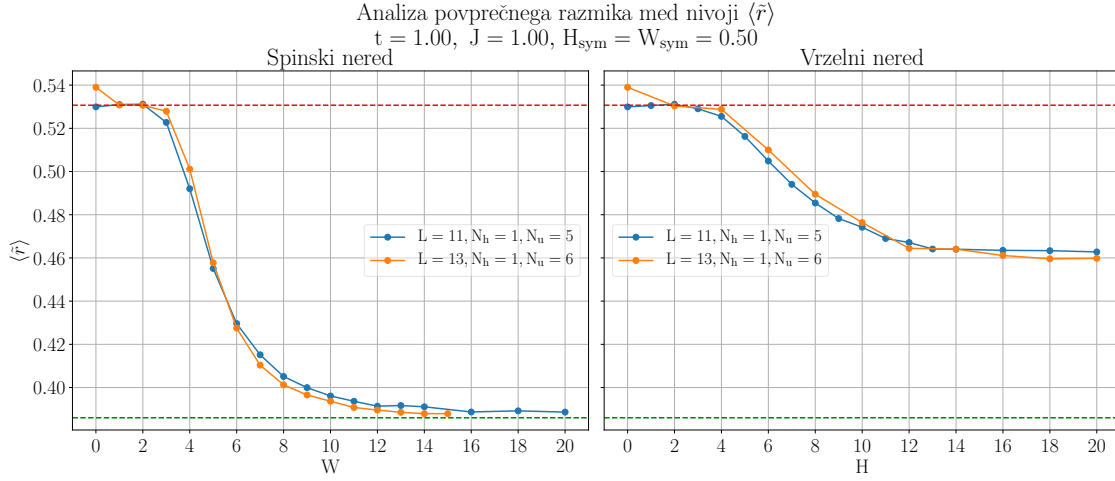
V kolikor simetrij ne odpravimo, bo porazdelitev nivojske statistike v splošnem konvolucija nivojskih statistik za posamezne simetrijske sektorje hamiltonke. Zaradi morebitnega prekrivanja energijskih nivojev iz različnih simetrijskih sektorjev odboj med nivoji v ergodični fazi v tem primeru ni tako zaznaven. V statistiki razmikov med sosednjimi nivoji to opazimo kot prisotnost neničelne vrednosti $p(s=0)$, povprečje $\langle \tilde{r} \rangle$ pa je manjše, kot bi sicer pričakovali v ergodičnem režimu. Pri vseh nadaljnjih izračunih bomo privzeli $H_{\text{sym}} = W_{\text{sym}} = 0.5$.

4.1.6 Rezultati

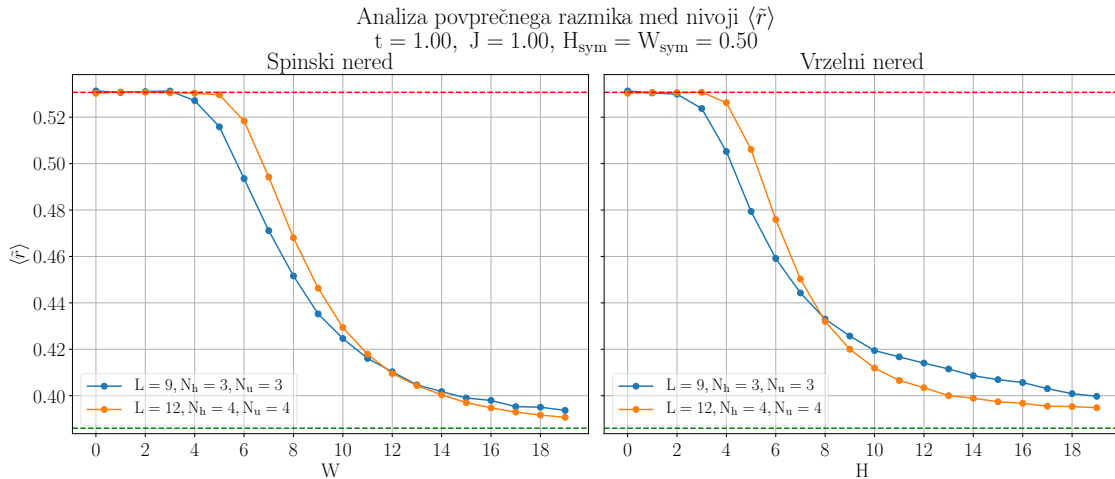
Z dodanim lokalnim zlomom simetrije so nivojske statistike dobro definirane tudi v primeru odsotnosti vsakršnega nereda - pri $H = W = 0$ ima $\langle \tilde{r} \rangle$ vrednost v bližini $\langle \tilde{r} \rangle_{\text{GOE}}$. Na Slikah 4.5 in 4.6 so prikazani rezultati skalirne analize za odvisnost $\langle \tilde{r} \rangle$ v primeru dopiranja z eno vrzeljo in v primeru tretjinskega dopiranja. Na Slikah 4.7

Poglavje 4. Statistične lastnosti hamiltonskih spektrov

in 4.8 sta prikazana še primera sprehodov po prostoru parametrov H in W pri izračunu $\langle \tilde{r} \rangle$.

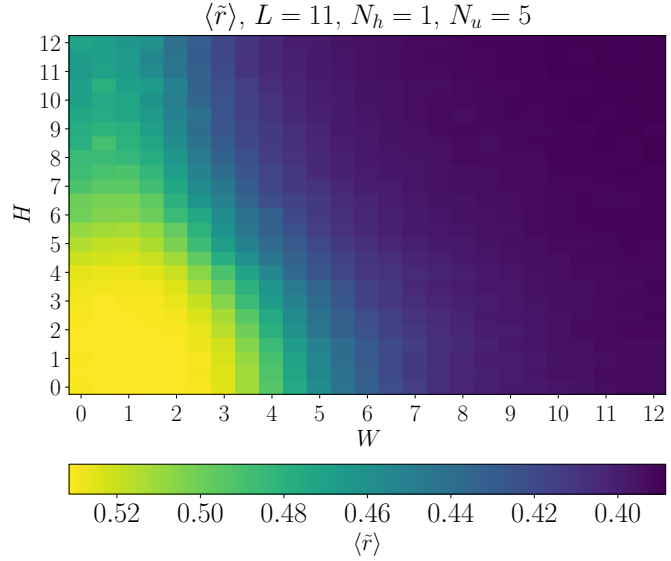


Slika 4.5: Zaradi majhnega števila primernih sistemov (sistemi z $L < 9$ imajo premalo stanj za primerno statistiko, sistemi z $L > 15$ so preveliki za naše računske zmogljivosti) je skalirna analiza, ki bi omogočila ekstrapolacijo rezultatov proti termodinamski limiti neskončnega sistema, razmeroma zahtevna če ne nemogoča naloga. Kljub temu lahko sklepamo, da v primeru ene vrzeli povečevanje spinskega nereda vodi do prehoda v MBL režim, medtem ko nered, ki se sklaplja z vrzelnimi, ne pripelje do večdelčne lokalizacije. Nekoliko presenetljivo se zdi, da se v primeru vrzelnega nereda vrednost $\langle \tilde{r} \rangle$ z naraščanjem L pomika navzdol, saj bi v termodinamski limiti pričakovali, da bo prispevek nereda na eni vrzeli zanemarljivo majhen.

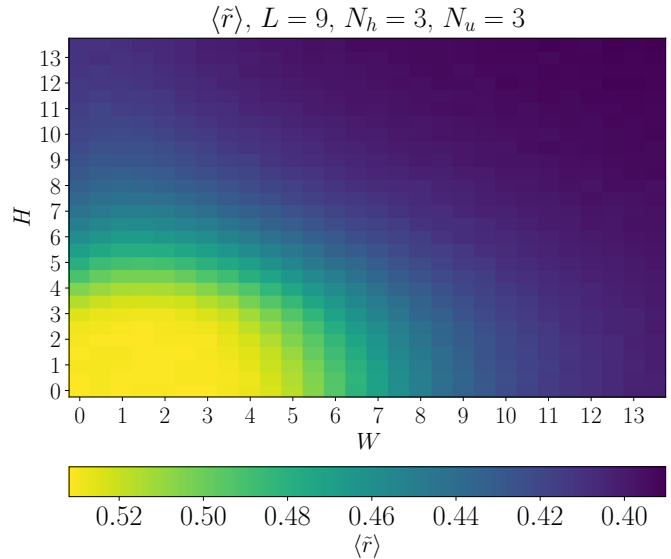


Slika 4.6: Pri tretjinskem dopiranju se zdi, da lahko oba tipa nereda pripeljeta do večdelčne lokalizacije. Krivulja za $L = 6$ je statistično nepomembna, saj ima ta sistem zgolj 90 stanj, kar je očitno premalo za zanesljivo statistiko. Fluktuacije povprečnih količin namreč padajo z velikostjo sistema. Zaradi omejenega števila sistemov, ki so na voljo za preučevanje, je skalirna analiza, s katero bi določil, kje v termodinamski limiti neskončnega sistema pride do prehoda med MBL in ergodičnim sistemom, otežena.

Slika 4.7: Vrednosti $\langle \tilde{r} \rangle$ v odvisnosti od H in W za primer dopiranja z eno vrzeljo pri velikosti sistema $L = 11$ ter povprečenjem po 500 naključnih realizacijah za obe vrsti nereda. Modra oz. temnejši toni označuje(jo) MBL režim, rumeni in zeleni odtenki pa pomenijo ergodičnost. Pri majhnem spinskem neredu opazimo, da še tako velike vrednosti H ne pripeljejo do lokalizacije.



Slika 4.8: Sprehod po prostoru parametrov H in W pri izračunu $\langle \tilde{r} \rangle$ še za primer tretjinskega dopiranja in ponovno povprečenja po 500 naključnih realizacijah nereda, $L = 9$. Spreminjanje obeh parametrov vodi do lokalizacije, pri čemer se zdi vloga obeh parametrov dokaj enakovredna.



Za primer dopiranja z eno vrzeljo in v prisotnosti spinskega nereda, ki ga modelira parameter W , so zgornji rezultati skladni z nedavno napovedjo prehoda med ergodično in MBL fazo pri povečevanju parametra velikosti spinskega nereda (Lemut in dr., [26]). V primeru prisotnosti vrzelnega nereda komplementarne študije časovne dinamike začetnih stanj (Bonča in Mierzejewski, [13]) pri dopiranju z eno vrzeljo kažejo na odsotnost MBL faze. Naši rezultati napovedi niti ne potrdijo niti ne ovržejo, saj kažejo na vmesno obnašanje, ki ni značilno za nobeno izmed obravnavanih faz. Za natančnejši opis bi bila potrebna analiza precej večjih sistemov, ki pa so s polno diagonalizacijo nedosegljivi.

4.2 Spektralni oblikovni faktor

V tem poglavju namesto korelacij med zgolj sosednjimi energijskimi nivoji obravnavamo korelacije med *vsemi* energijskimi nivoji, in sicer z analizo *spektralnega oblikovnega faktorja* (ang. *spectral form factor*). Količino najprej vpeljemo, nato pa predstavimo rezultate numeričnih analiz, s katerimi smo presojali ergodičnost oziroma prisotnost večdelčne lokalizacije v obravnavanih sistemih.

4.2.1 Vpeljava

Obravnava korelacij med vsemi energijskimi nivoji omogoča podrobnejši vpogled v spektralne lastnosti sistema in posledično podaja popolnejšo sliko prehoda med ergodično in lokalizirano fazo. V poglavju 4.1 predstavljeni spektralni statistiki, v okviru katerih smo prehod preučevali do zdaj, namreč upoštevata le razmike med sosednjimi energijskimi nivoji, kar ustreza najmanjši energijski skali sistema, in zato opisujeta obnašanje sistema v dolgočasovni limiti. Kot smo zapisali v poglavju 2.2, dolgočasovni razvoj pri relaksaciji začetnega stanja najkasneje izniči izvendiagonalne matrične elemente med stanji, katerih energije se le malo razlikujejo (glej En. (2.15)). Z upoštevanjem korelacij med vsemi energijskimi nivoji dobimo tudi vpogled v obnašanje sistema na vseh časovnih skalah.

Dvotočkovna korelacijska funkcija diskretnega energijskega spektra je definirana kot

$$R(E) = \frac{1}{N} \sum_{i,j=1}^N \delta(E_i - E_j - E), \quad (4.17)$$

kjer sta E_i in E_j energiji v spektru, N pa število stanj v njem. Spektralni oblikovni faktor $K(\tau)$ vpeljemo kot Fourierovo transformacijo $R(E)$ [15]

$$K(\tau) := \left\langle \int_{-\infty}^{\infty} e^{-iE\tau} R(E) dE \right\rangle = \left\langle \frac{1}{N} \sum_{i,j} e^{-i(E_i - E_j)\tau} \right\rangle. \quad (4.18)$$

Pri tem je $\langle \dots \rangle$ povprečenje, ki smo ga pri naših izračunih vselej izvedli po spektrih, izračunanih za različne realizacije nereda. S τ smo označili realni parameter časa. Pri računanju upoštevamo, da velja

$$K(\tau) = \langle Z(\tau) Z(\tau)^* \rangle, \quad (4.19)$$

kjer smo zapisali

$$Z(\tau) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i e^{-iE_i\tau}. \quad (4.20)$$

Iz En. (4.18) sta nemudoma očitni vrednosti $K(\tau)$ v limitah $\tau \rightarrow 0$ in $\tau \rightarrow \infty$. V prvem primeru so vsi členi v dvojni vsoti enaki ena in je zato $K(\tau = 0) = N$. V skladu s povedanim v poglavju 2.2 dolgočasovni razvoj izniči izvendiagonalne člene v vsoti, zato po dolgem času k vsoti prispeva le N diagonalnih členov in je $K(\tau \rightarrow \infty) = 1$.

Kot pri spektralnih statistikah, obravnavanih v poglavju 4.1, je tudi tokrat za našo analizo najpomembnejše dejstvo, da ima SFF v različnih tipih sistemov univerzalne lastnosti, kar izkoristimo pri razločevanju med ergodično in MBL fazo. Začenši pri

$\tau = 0$ funkcija $K(\tau)$ za kratke čase uvodoma pada, vse dokler ne doseže minimalne vrednosti. Relaksacija $K(\tau)$ proti minimalni vrednosti ni univerzalna temveč modelsko specifična, saj jo v En. (4.18) določajo členi z velikimi energijskimi razlikami $E_i - E_j$. Čas, po katerem $K(\tau)$ ne kaže več neuniverzalnih lastnosti in preide v univerzalni režim, se v literaturi pogosto označuje kot *Thoulessov čas* τ_T . Univerzalna lastnost $K(\tau)$ je za ergodične sisteme območje linearne rasti (ang. *ramp*), ki nastopi med τ_T in *Heisenbergovim časom* τ_H , po katerem $K(\tau)$ saturira pri limitni vrednosti. Heisenbergov čas je definiran kot

$$\tau_H = 2\pi\bar{\rho}, \quad (4.21)$$

kjer je $\bar{\rho}$ povprečna gostota stanj. Ker tudi izračune $K(\tau)$ izvajamo na razgrnjenem spektru, ima $\bar{\rho}$ v naših računih enotsko vrednost, $\bar{\rho} = 1$. V nadaljevanju bomo čas τ vselej podajali v enotah τ_H , kot je to v navadi v literaturi. V teh enotah saturacija nastopi pri $\tau = \tau_H = 1$.

V sistemih, katerih spektralne lastnosti ustrezajo GOE sistemom, podaja univerzalno obnašanje $K(\tau)$ zveza [40]

$$K_{\text{GOE}}(\tau) = \begin{cases} 2\tau - \tau \log(1 + 2\tau), & \tau \leq 1, \\ 2 - \tau \log\left(\frac{2\tau+1}{2\tau-1}\right), & \tau > 1. \end{cases} \quad (4.22)$$

V naši numerični analizi smo se osredotočili predvsem na prvi primer, ki za čase, manjše od τ_H , napoveduje linearno rast $K(\tau)$ z logaritemskim popravkom. V sistemih s Poissonovo spektralno statistiko je v univerzalnem režimu $K(\tau)$ enak konstanti, in sicer je [23]

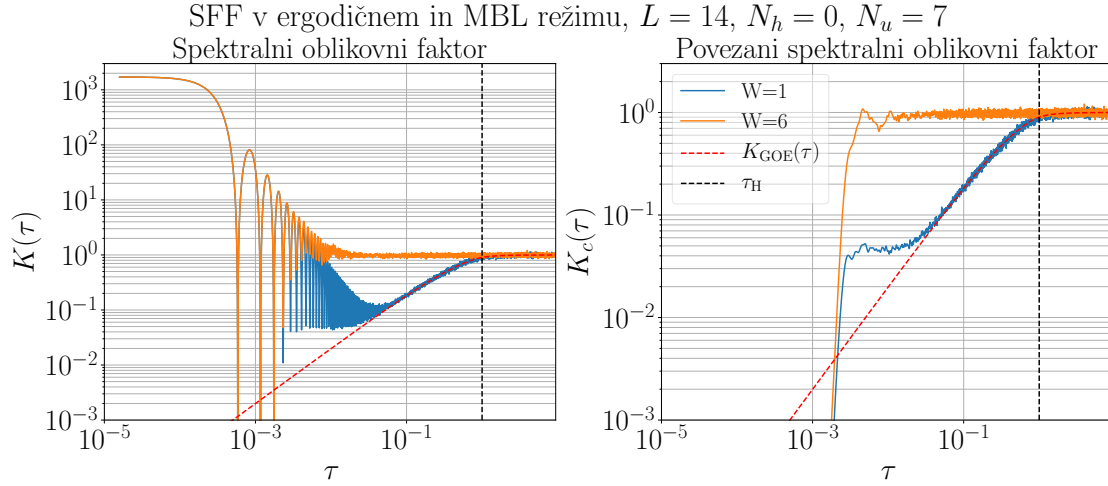
$$K_{\text{Poisson}}(\tau) = \tau_H = 1. \quad (4.23)$$

Očitno razliko med $K_{\text{GOE}}(\tau)$ in $K_{\text{Poisson}}(\tau)$ izkoristimo pri presoji ergodičnosti oziroma lokaliziranosti preučevanih sistemov, saj v ergodičnih sistemih za $\tau \leq 1$ na nekem končnem časovnem intervalu pričakujemo linearno rast, v lokaliziranih sistemih pa ne. Primera $K(\tau)$ v ergodičnem in MBL primeru sta prikazana na levem grafu na Sliki 4.9. Prikazani so rezultati za izotropno Heisenbergovo verigo, enega najpogostejše preučevanih modelov MBL.

V praksi za preučevanje spektralnih lastnosti namesto $K(\tau)$ uporabljamo *povezani spektralni oblikovni faktor* $K_c(\tau)$, ki je definiran kot [15]

$$K_c(\tau) = K(\tau) - \langle Z(\tau) \rangle \langle Z(\tau)^* \rangle = \langle |Z(\tau)|^2 \rangle - |\langle Z(\tau) \rangle|^2. \quad (4.24)$$

Tudi za $K_c(\tau)$ veljajo zgoraj zapisane univerzalne napovedi, vendar je časovni interval zaznanega univerzalnega obnašanja tipično daljši kot pri izračunu $K(\tau)$. S členom $|\langle Z(\tau) \rangle|^2$ smo namreč odšteli prispevek neuniverzalnih fluktuacij, ki so v En. (4.18) posledica prispevkov členov z velikimi razlikami energij $E_i - E_j$. Za kratke čase lahko omenjene fluktuacije prikrijejo univerzalne lastnosti spektra. Na desnem grafu na Sliki 4.9 sta prikazana izračuna $K_c(\tau)$ v ergodičnem in MBL primeru.

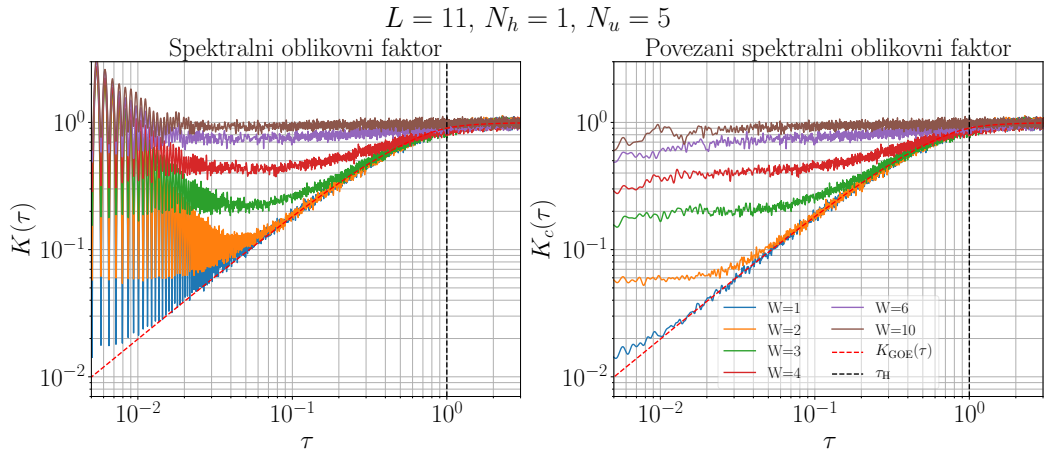


Slika 4.9: Izračun $K(\tau)$ in $K_c(\tau)$ v ergodičnem ($W = 1$) in MBL ($W = 6$) primeru za model t - J brez vrzeli in naključnim magnetnim poljem, ki ustreza izotropnemu Heisenbergovemu modelu z $J = 1$, ki ga podaja En. (3.2). Prehod med ergodično in lokalizirano fazo nastopi pri kritični vrednosti parametra nereda $W^* \approx 3.5$ [35]. Levo: za kratke čase zavzame $K(\tau)$ največjo vrednost, nato v neuniverzalnem režimu pada. V ergodičnem primeru neuniverzalnemu obnašanju sledi linearna rast v skladu z En. (4.22), ki jo označuje rdeča črtkana črta. V MBL primeru linearne rasti ne opazimo, po neuniverzalni relaksaciji ostane $K(\tau)$ enak konstanti. Desno: izračun $K_c(\tau)$, kjer smo od $K(\tau)$ odšteli neuniverzalne prispevke členov z velikimi razlikami energij. Pred izračunom obeh količin smo energijska spektra razgnili in kot v predhodnem poglavju upoštevali le polovico vrednosti med prvim in zadnjim kvartilom. Čas τ je podan v enotah τ_H , povprečenje pa smo izvedli po 500 različnih realizacijah nereda.

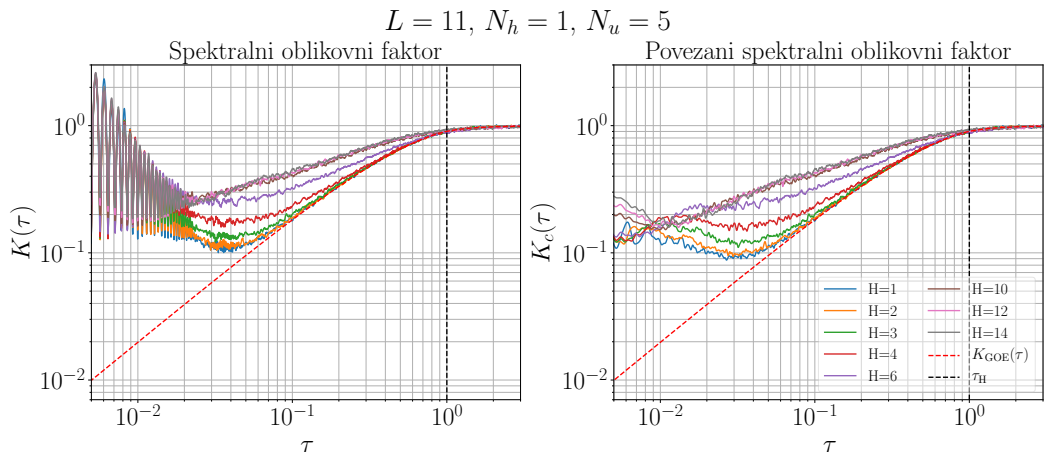
4.2.2 Rezultati

Spektralni oblikovni faktor smo za model t - J izračunali v primeru dopiranja z eno vrzeljo in v primeru tretjinskega dopiranja. Kot v poglavju 4.1 smo pred izračunom $K(\tau)$ in $K_c(\tau)$ izvedli razgrnjenje spektra ter količini izračunali za polovico lastnih energij med prvim in zadnjim kvartilom v spektru. Povprečenje smo, odvisno od velikosti dimenzije Hilbertovega prostora sistema, izvedli po 100 do 600 realizacijah nereda.

Na Slikah 4.10 in 4.11 so prikazani rezultati izračuna $K(\tau)$ in $K_c(\tau)$ pri dopiranju z eno vrzeljo za različne vrednosti parametrov velikosti spinskega oziroma potencialnega nereda, kjer smo povprečenje izvedli po 500 realizacijah nereda.



Slika 4.10: $K(\tau)$ in $K_c(\tau)$ pri različnih vrednostih parametra velikosti spinskega nereda W . S povečevanjem W se univerzalni linearni del krivulje, ki sovpada s krivuljo $K_{\text{GOE}}(\tau)$, manjša, odvisnost pa se v univerzalnem območju vse bolj približuje napovedi $K_{\text{Poisson}}(\tau)$. Ujemanje rezultatov s teoretičnimi napovedmi je podrobneje predstavljeno na Sliki 4.12



Slika 4.11: V primeru spreminjanja parametra velikosti potencialnega nereda H so rezultati za dopiranje z eno vrzeljo bistveno drugačni kot pri povečevanju spinskega nereda, saj odvisnost $K(\tau)$ pri preizkušeni vrednostih nikoli ne doseže konstantne vrednosti $K_{\text{Poisson}}(\tau)$. Krivulje za $H = 10, H = 12$ in $H = 14$ sovpadajo, zato se zdi, da potencialni nered ne more povzročiti prehoda v MBL fazo. Ujemanje rezultatov s teoretičnimi napovedmi je podrobneje predstavljeno na Sliki 4.12.

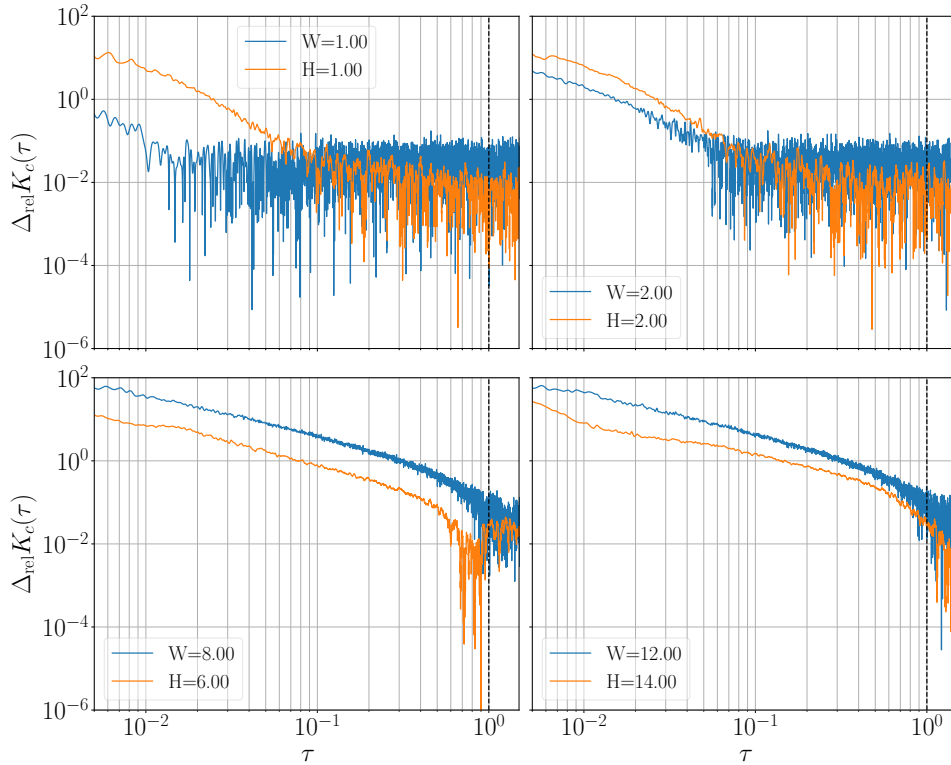
Učinka povečevanja spinskega oziroma vrzelnega nereda sta v primeru dopiranja z eno vrzeljo očitno kvalitativno različna. V prvem primeru opazimo prehod med univerzalnim obnašanjem, značilnim za GOE sisteme, in obnašanjem, ki ga opazimo v sistemih s Poissonovo spektralno statistiko. Pri povečevanju potencialnega nereda sicer opazimo odstopanje od napovedane linearne rasti, vendar se rezultati pri preizkušanih vrednostih nereda nikdar ne ujemajo s konstantno vrednostjo $K_{\text{Poisson}}(\tau)$.

Odstopanje numeričnih izračunov od teoretične napovedi $K_{\text{GOE}}(\tau)$ smo preverili z izračunom relativnega odstopanja, ki smo ga definirali kot

$$\Delta K_c(\tau) = \left| \frac{K_c(\tau) - K_{\text{GOE}}(\tau)}{K_{\text{GOE}}(\tau)} \right|. \quad (4.25)$$

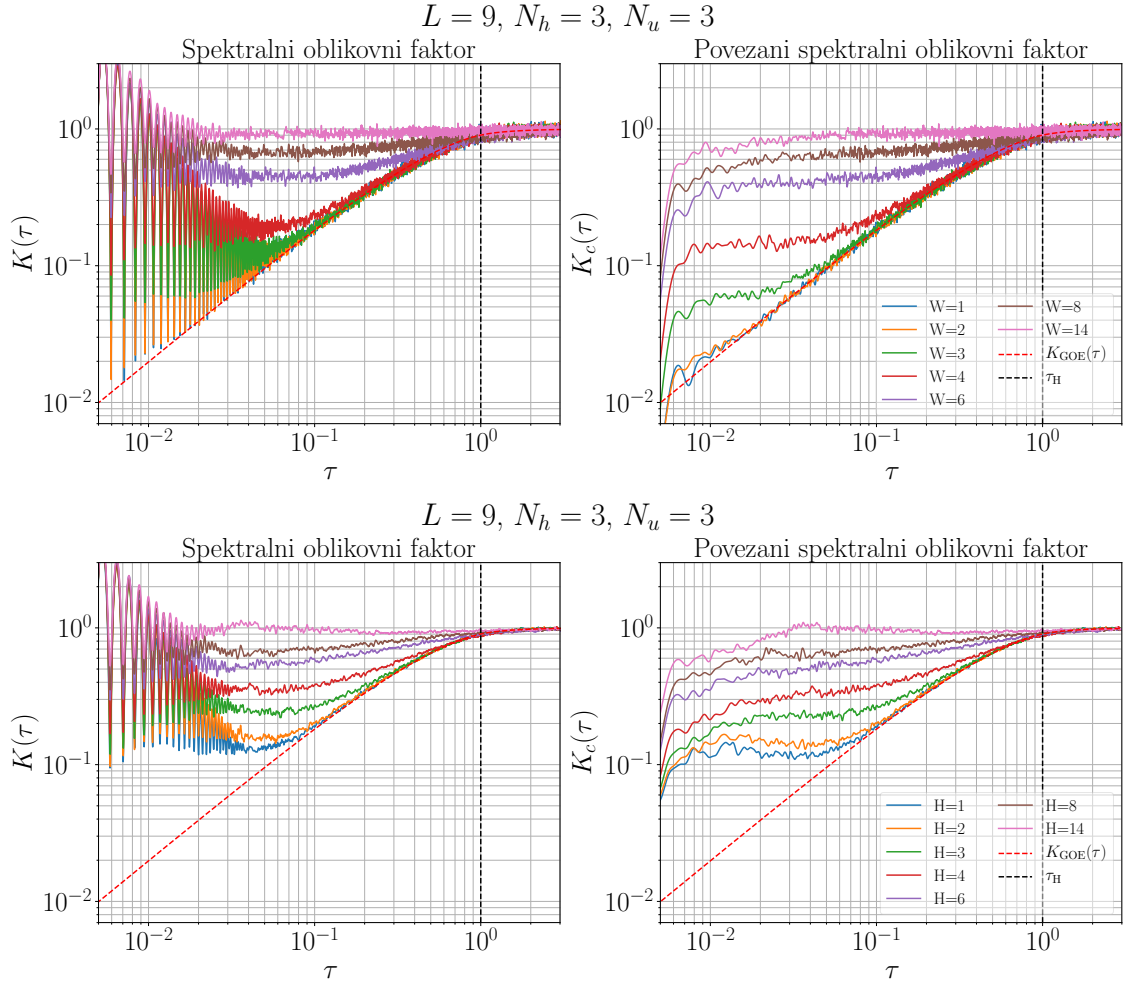
Rezultati so za nekaj vrednosti parametrov W in H v primeru dopiranja z eno vrzeljo prikazani na Sliki 4.12.

Odstopanje $K_c(\tau)$ od teoretične napovedi, $L = 11$, $N_h = 1$, $N_u = 5$



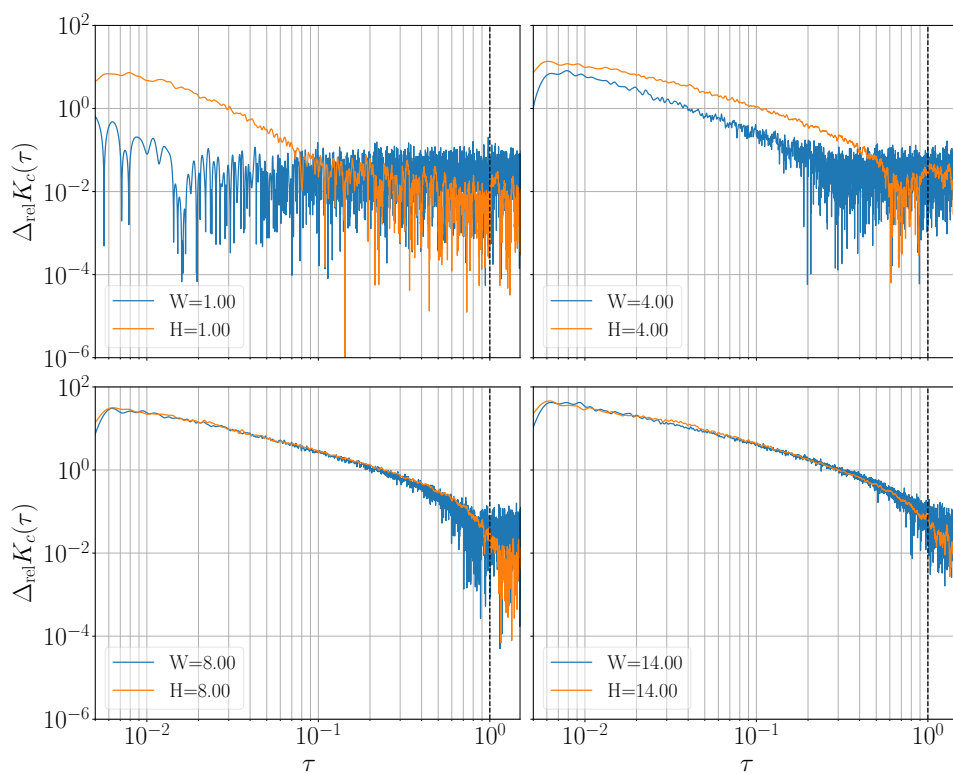
Slika 4.12: Odstopanje numeričnih izračunov pri nekaj različnih vrednostih parametrov spinskega in potencialnega nereda od teoretične napovedi $K_{\text{GOE}}(\tau)$. Pri prvih treh vrednostih potencialnega nereda lahko jasno razločimo območje neuniverzalne relaksacije in območje univerzalne linearne rasti, ko se odstopanje ustali in fluktuiira okrog povprečne vrednosti. Zgolj na podlagi relativnega odstopanja v mejnih primerih ne moremo presojati ergodičnosti oziroma prisotnosti večdelčne lokalizacije v sistemu, o čemer priča primer pri $H = 14.00$. Relativno odstopanje kaže na odsotnost linearne rasti za $\tau \leq \tau_H$, vendar izračuni, prikazani na Sliki 4.11, nakazujejo, da sistem nima Poissonove spektralne statistike.

V primeru tretjinskega dopiranja spreminjanje velikosti obeh parametrov nereda vodi do prehoda med ergodično in MBL fazo, v skladu z rezultati iz poglavja 4.1.6. Za razliko od sistemov z eno vrzeljo je pri tretjinskem dopiranju obnašanje za oba tipa nereda podobno. Numerični izračuni so prikazani na Sliki 4.13, primerjava s teoretično napovedjo pa na Sliki 4.14.



Slika 4.13: Zgoraj: izračun $K(\tau)$ in $K_c(\tau)$ pri različnih velikostih parametra spinskega nereda W za primer tretjinskega dopiranja. Povečevanje W vodi do prehoda iz ergodične v MBL fazo. Spodaj: enak izračun, le da za povečevanje parametra potencialnega nereda H . Tudi v tem primeru povečevanje parametra vodi do prehoda. V obeh primerih smo izračune dobili s povprečenjem po 500 realizacijah naključnega nereda.

Odstopanje $K_c(\tau)$ od teoretične napovedi, $L = 9$, $N_h = 3$, $N_u = 3$



Slika 4.14: Relativno odstopanje numerično izračunane vrednosti $K_c(\tau)$ od teoretične napovedi $K_{\text{GOE}}(\tau)$ - enak izračun kot na Sliki 4.12, le da za primer tretjinskega dopiranja.

Poglavje 5

Prepletenostna entropija

5.1 Vpeljava

Poleg spektralnih značilnosti smo za presojo ergodičnosti oziroma večdelčne lokaliziranosti sistema analizirali tudi prepletenostno entropijo večdelčnih lastnih stanj. Pri izračunu slednje celoten sistem razdelimo na podсистema A in B. Reducirano gostotno matriko ρ_A podсистema A dobimo iz gostotne matrike celotnega sistema ρ z izvedbo delne sledi po prostostnih stopnjah podсистema B:

$$\rho_A = \text{Tr}_B \rho, \quad \text{Tr} \rho_A = 1 \quad (5.1)$$

Pri izračunih, predstavljenih v magistrski nalogi, smo bipartitijo vselej izvedli v realnem prostoru, kjer na diskretni enodimenzionalni verigi dolžine L podсистem A predstavlja L_A mest, podсистem B pa $L - L_A$ preostalih mest. Prepletenostna entropija $S_{\text{ent}}(A)$ je definirana kot von Neumannova entropija podсистema A

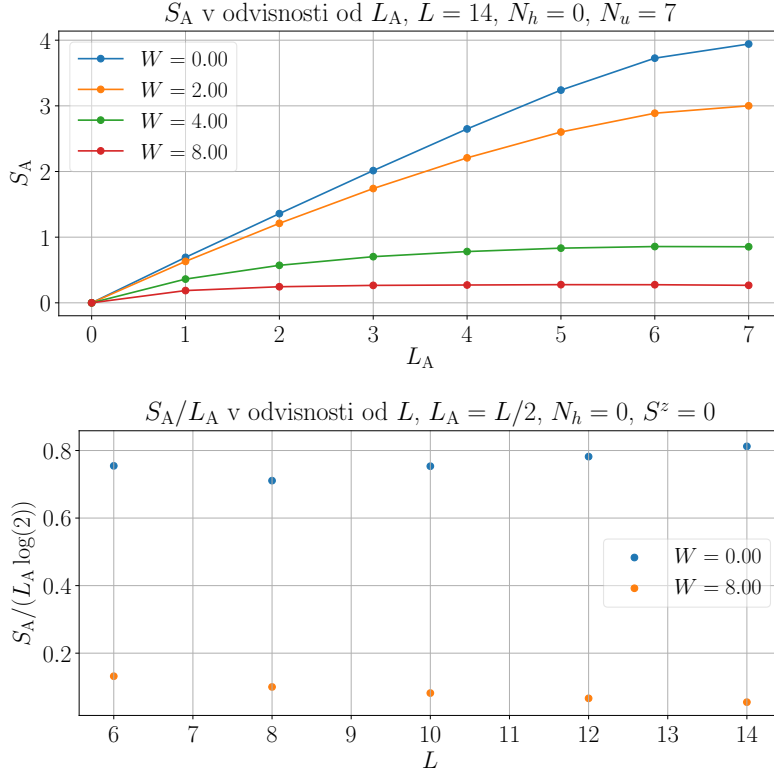
$$S_{\text{ent}}(A) = -\text{Tr} \{ \rho_A \log \rho_A \} = -\sum_{i=1}^{d_A} \lambda_i^A \log \lambda_i^A, \quad (5.2)$$

kjer je $\{\lambda_i^A\}$ spekter lastnih vrednosti operatorja ρ_A in d_A dimenzija Hilbertovega prostora podсистema A. Pokazati je možno, da sta pri dani bipartitiji prepletenostni entropiji podсистemov enaki, torej $S_{\text{ent}}(A) = S_{\text{ent}}(B)$ [20].

Produktna stanja lahko zapišemo v obliki produkta stanj $|\phi_1\rangle_A$ ter $|\phi_2\rangle_B$ iz podprostorov A in B kot $|\psi\rangle = |\phi_1\rangle_A |\phi_2\rangle_B$. Prepletenostna entropija teh stanj je enaka nič, medtem ko so stanja, ki jih ne moremo zapisati v produktni obliki, *prepletena* in imajo neničelno prepletenostno entropijo. Maksimalna prepletenostna entropija bipartitije je enaka logaritmu števila stanj v manjšem izmed podсистemov, $S_{\text{ent}}^{\text{max}}(A) = \log [\min(d_A, d_B)]$. Vrednost $S_{\text{ent}}^{\text{max}}(A)$ nastopi, če so v En. (5.2) vse vrednosti λ_i^A enake $1/d^A$.

Za lastna stanja MBL sistemov sta v *celotnem* spektru značilna nizka prepletenost in površinsko skaliranje prepletenostne entropije. Slednje pomeni, da v limiti $L \rightarrow \infty$ velja $S_{\text{ent}}(A)/L \rightarrow 0$. Če povečujemo velikost sistema in pri tem ohranjamo konstantno razmerje L_A/L , potem prepletenostna entropija skalira sorazmerno z volumnom roba podсистema, $S_{\text{ent}}(A) \propto \text{vol}(\delta A)$. Ta je v eni dimenziji konstanten, $\text{vol}(\delta A) = \text{konst.}$ Na drugi strani sta v ergodičnih sistemih za visoko vzbujena stanja značilni visoka prepletenost in volumnsko skaliranje prepletenostne entropije. V

tem primeru v limiti $L \rightarrow \infty$ velja $S_{\text{ent}}(A)/L = \text{const.}$ Primera volumskega in površinskega skaliranja prepletenostne entropije sta prikazana na Sliki 5.1, in sicer za model t - J brez vrzeli na $L = 14$ mestih, ki ustreza izotropnemu Heisenbergovemu modelu, podanem z En. (3.2) pri $J = 1$ in $\Delta = 1$.



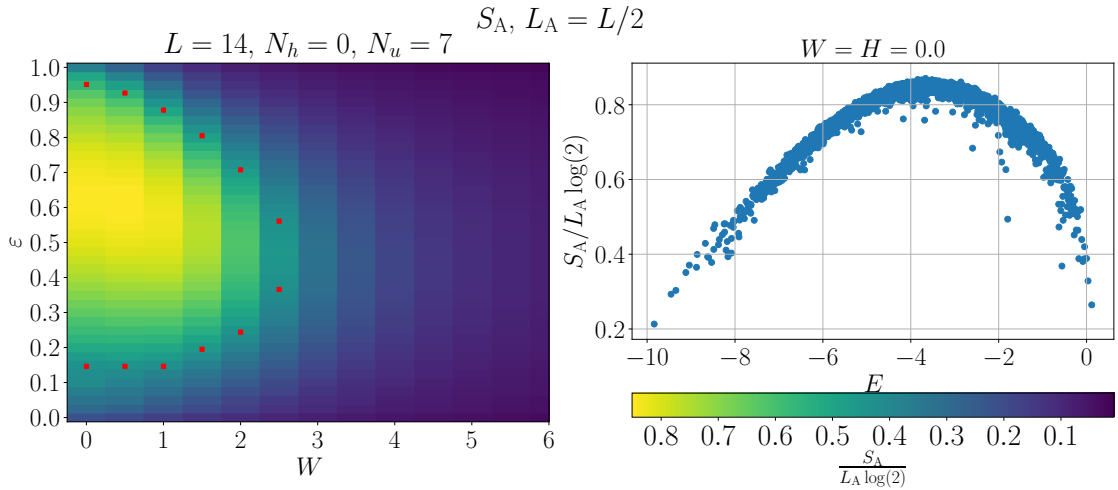
Slika 5.1: Prikaz volumskega in površinskega skaliranja prepletenostne entropije S_A lastnih stanj sistema. Predstavljene so povprečne vrednosti prepletenostne entropije za lastna stanja v sredini pasu. Zgoraj: odvisnost prepletenostne entropije od velikosti pod-sistema L_A pri fiksni velikosti sistema L . Pri volumskem skaliranju S_A v termodinamski limiti neskončnega sistema narašča sorazmerno z L_A , v primeru površinskega skaliranja pa je S_A v eni dimenziji za vse velikosti podsistemov enak konstanti. Spodaj: skaliranje prepletenostne entropije pri bipartitiji na dva enaka podsistema v odvisnosti od velikosti sistema L . V limiti $L \rightarrow \infty$ velja v primeru volumskega skaliranja $S_A/L = \text{const.}$, v primeru površinskega skaliranja pa $S_A/L = 0$. Izračune smo izvedli za model t - J brez vrzeli, ki ustreza izotropnemu Heisenbergovemu modelu z $J = 1$ z dodatkom nereda. Kot nakazujejo numerične študije, nastopi prehod med ergodično in MBL fazo v okolici $W = 3.5$ [35] [27].

5.2 Rezultati

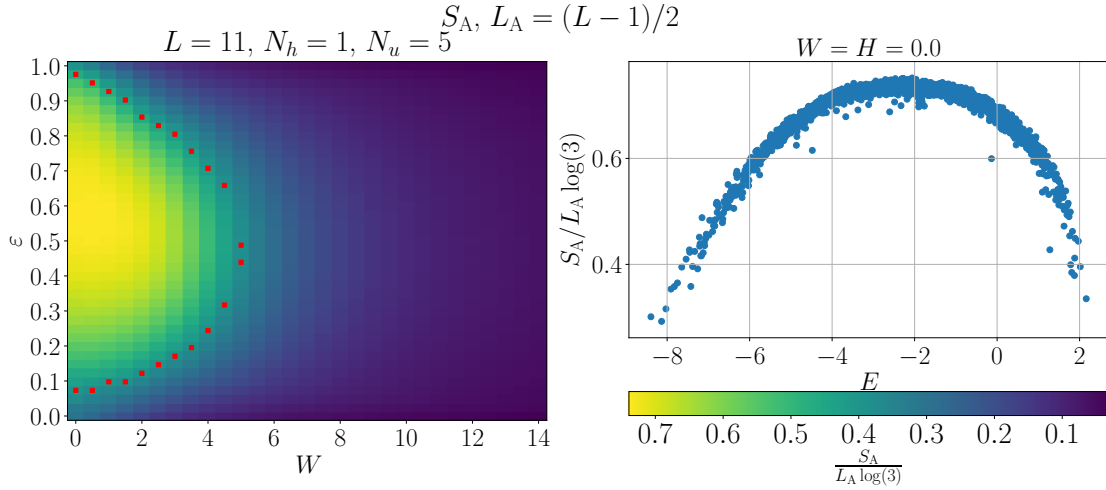
Predstavljeni so rezultati izračuna prepletenostne entropije vseh lastnih stanj sistema za model t - J z dodatkom različnih tipov nereda, pri čemer se pri predstavitvi zgledujemo po Ref. [27], v kateri je bil izračun narejen za izotropni Heisenbergov model z naključnim spinskim neredom. Za primerjavo so naši rezultati za ta model prikazani na Sliki 5.2. Pri dani velikosti parametra nereda smo prepletenostno entropijo vseh lastnih stanj izračunali pri različnih realizacijah nereda. Interval lastnih energij smo normalizirali na območje med 0 in 1, in sicer po predpisu

$$\varepsilon = \frac{E - E_{\min}}{E_{\max} - E_{\min}}. \quad (5.3)$$

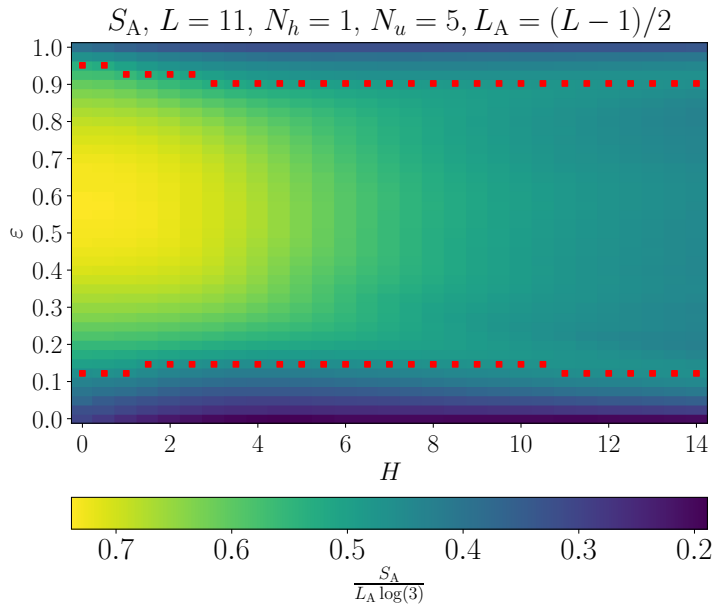
Pri tem je E energija nekega večdelčnega lastnega stanja, E_{\min} in E_{\max} pa najmanjša oziroma največja lastna vrednost v vseh spektrih, izračunanih pri različnih realizacijah nereda. Za različne velikosti parametra nereda so vrednosti E_{\min} oziroma E_{\max} različne. Pri posamezni realizaciji nereda smo interval normaliziranih energij ε razdelili na enake podintervale in v vsakem izmed njih izračunali povprečno vrednost prepletenostne entropije, nato pa smo tako izračunane vrednosti še povprečili po različnih realizacijah nereda. V magistrski nalogi predstavljeni rezultati so bili izračunani s povprečenjem po 500 realizacijah nereda. Ker prepletenostna entropija za stanja, degenerirana v okviru natančnosti točne diagonalizacije, ni dobro definirana, smo z lokalnim zlomom simetrije (glej poglavje 4.1.5) poskrbeli za odsotnost degeneracij tudi v čistem primeru brez nereda. Poleg že omenjenega Heisenbergovega modela so na Slikah 5.3- 5.5 prikazani rezultati za model t - J v primeru dopiranja z eno vrzeljo oziroma v primeru tretjinskega dopiranja za oba tipa nereda.



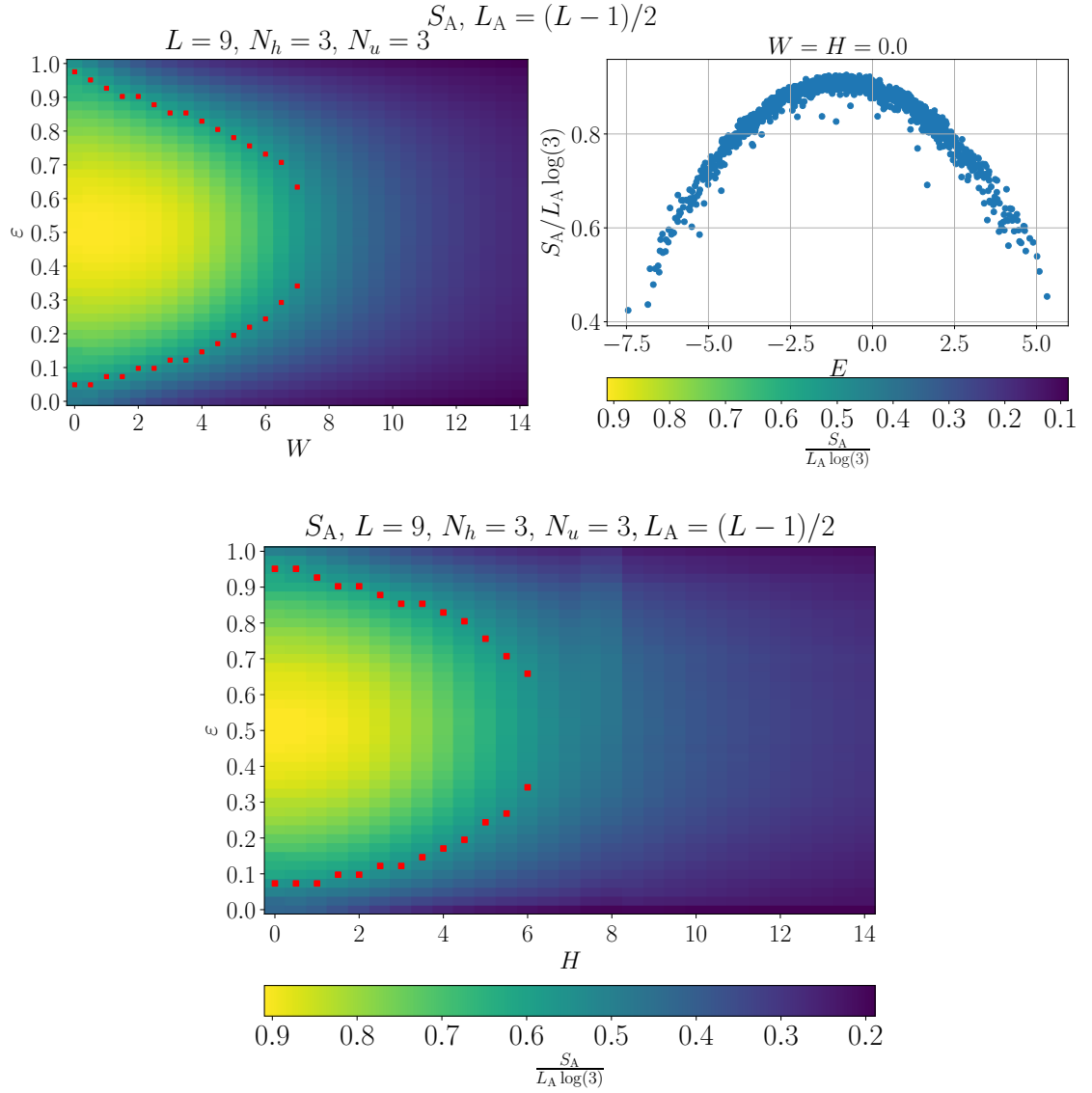
Slika 5.2: Levo: gostotna ploskev prepletenostne entropije, deljene z maksimalno prepletenostno entropijo podsistema, za vsa lastna stanja pri različnih vrednostih spinskega nereda W za Heisenbergov izotropni model z $J = 1$ pri simetrični bipartitiji. Rumeni toni ustrezajo ergodični, modri pa MBL fazi. Maksimalna entropija podsistema v Heisenbergovem modelu znaša $L_A \log(2)$. Ker računamo v bloku s skupnim spinom $S^z = 0$, je število stanj manjše in smo maksimalno entropijo sistema precenili. Z rdečo so označene točke, kjer je dosežena polovična vrednost na intervalu med največjo in najmanjšo izračunano vrednostjo prepletenostne entropije. Desno: prepletenostna entropija vseh lastnih stanj v čistem primeru ob odsotnosti nereda. V tem primeru povprečenje po energijskih intervalih, opisano v besedilu, ni bilo izvedeno.



Slika 5.3: Izračun prepletenostne entropije v primeru dopiranja z eno vrzeljo in spreminjanja parametra spinskega nereda. V skladu z rezultati, predstavljenimi v poglavju 4, opazimo, da spreminjanje parametra spinskega nereda vodi do prehoda med ergodično in lokalizirano fazo. Za velikosti parametra nereda, večje od $W = 8$, so namreč vsa stanja v spektru šibko prepletena.



Slika 5.4: V primeru potencialnega nereda in dopiranja z eno vrzeljo spreminjanje velikosti parametra nereda ne vodi do prehoda v lokalizirano fazo. V nasprotju s primerom s prisotnim spinskim neredom ostanejo stanja na razmeroma širokem energijskem intervalu tudi pri velikem neredu precej prepletena.



Slika 5.5: V primeru tretjinskega dopiranja z vrzeli rezultati izračuna prepletenostne entropije napovedo možnost prehoda med ergodično in lokalizirano fazo za oba tipa nereda.

Rezultati izračunov prepletenostne entropije lastnih stanj modela t - J so skladni z izračuni spektralnih statistik, predstavljenimi v poglavju 4. V primeru dopiranja z eno vrzeljo v prisotnosti spinskega nereda povečevanje parametra nereda vodi do prehoda iz ergodične v lokalizirano fazo, kar za oba tipa nereda velja tudi v primeru tretjinskega dopiranja z vrzeli. Podobno kot pri izračunu spektralnih statistik tudi pri izračunu prepletenostne entropije za primer ene vrzeli in vrzelnega nereda prehoda iz ergodične v MBL fazo ne zaznamo.

Poglavje 6

Zaključek

V magistrski nalogi smo prisotnost ergodične oziroma MBL faze v preučevanih sistemih analizirali s tremi različnimi statističnimi indikatorji, temelječimi na polni diagonalizaciji modelskih hamiltonk. Pri različnih vrednostih parametrov velikosti nereda smo izračunali povprečno razmerje zaporednih razmikov med energijskimi nivoji $\langle \tilde{r} \rangle$ ter spektralni oblikovni faktor $K(\tau)$ (v nadaljevanju SFF). Medtem ko se prva količina zaradi razmeroma enostavne implementacije v literaturi pogosto uporablja pri presojanju ergodičnosti oziroma lokaliziranosti sistemov, so študije MBL pojavov z uporabo SFF redkejša. Izračuni spektralnih statistik, ki temeljijo na korelacijah med sosednjimi energijskimi nivoji, razkrijejo informacije o obnašanju sistema le na najdaljših časovnih skalah, ki so v komplementarnih študijah časovne dinamike sistemov praviloma nedosegljive. Na drugi strani izračun SFF zaradi upoštevanja korelacij med vsemi energijskimi nivoji v sistemu vključuje vse časovne skale, hkrati pa se rezultati za dolge čase ujemajo z izračuni povprečnega razmerja razmikov med nivoji. Poleg omenjenih spektralnih metod smo ergodičnost oziroma lokaliziranost presojali še na podlagi izračuna prepletenostne entropije vseh lastnih stanj. V nasprotju s spektralnima metodama smo tako dobili tudi informacijo o ergodičnosti oziroma lokaliziranosti posameznih večdelčnih stanj.

Osredotočili smo se na model t - J v prisotnosti spinskega ter potencialnega nereda za primer dopiranja z eno vrzeljo in primer tretjinskega dopiranja. Rezultati vseh treh statističnih indikatorjev v primeru dopiranja z eno vrzeljo ob prisotnosti potencialnega nereda ne kažejo na možnost prehoda v MBL fazo. Za velike vrednosti parametra velikosti potencialnega nereda se vrednost $\langle \tilde{r} \rangle$ ustali pri vrednosti, ki ne ustreza niti Poissonovi niti Wigner-Dysonovi spektralni statistiki. Podobno za velike jakosti potencialnega nereda krivulja SFF ne zavzame konstantne vrednosti, ki bi ustrezala Poissonovi statistiki in bi naznanjala nastop MBL faze. Napovedim na spektralni statistiki temelječih indikatorjev ustrezajo tudi izračuni prepletenostne entropije vseh lastnih stanj sistema, ki pri vseh preučevanih vrednostih nereda kažejo na obstoj znatno prepletenih stanj. V vseh preostalih obravnavanih primerih povečevanje nereda vodi do prehoda med ergodično in lokalizirano fazo, za katero so značilne šibka prepletenost vseh stanj v spektru, vrednost $\langle \tilde{r} \rangle \approx 0.39$ in konstantna vrednost krivulje SFF v univerzalnem režimu, $K(\tau) = 1$. Zaradi hitrega naraščanja dimenzije Hilbertovega prostora z velikostjo sistema v modelu t - J smo bili pri izvedbi polne diagonalizacije omejeni na razmeroma majhno število primernih sistemov. Skalirna analiza, s katero bi točneje napovedali vrednosti kritičnih parametrov

nereda v termodinamski limiti neskončnega sistema, je pri našem pristopu neizvedljiva, zato so vrednosti parametrov nereda, pri katerih pride do prehoda v naših izračunih, zgolj ocene. Dimenzija največjega preučevanega Hilbertovega prostora je znašala 34650 stanj, in sicer v sistemu z $L = 12$ mesti, $N_h = 4$ vrzeli in skupno projekcijo spina $S^z = 0$.

Tipični modelski sistemi pri preučevanju MBL pojavov so sistemi brezspinskih fermionov in Hubbardove verige. Kolikor nam je znano, zato rezultati za model t - J , predstavljeni v tem magistrskem delu, še niso bili predhodno izračunani. Podobno velja za samo uporabo izračuna SFF za presojo ergodičnosti oziroma večdelčne lokaliziranosti sistemov. Ne samo, da je bil tovrsten pristop prvokrat uporabljen pri analizi modela t - J , dosedanjega primera uporabe ne poznamo niti na širšem področju analize MBL pojavov v drugih sistemih. Hkrati s presojo ergodičnosti oziroma večdelčne lokaliziranosti na podlagi ujemanja izračunov z limitnimi napovedmi omogoča izračun SFF tudi vpogled v značilne časovne skale sistema. Vrednost Thoulessovega časa τ_H , po katerem v odvisnosti $K(\tau)$ ne opazimo več neuniverzalnih pojavov, je pomembna pri preučevanju ergodičnosti na podlagi časovne dinamike tipičnih začetnih stanj. Pristop je komplementaren našemu, τ_H pa podaja informacijo o tem, najmanj kako dolg naj bo časovni razvoj, če želimo z njim preučevati ergodičnost oziroma večdelčno lokaliziranost sistema.

Medtem ko smo v nalogi izračune za Heisenbergovo spinsko verigo prikazovali le kot ilustrativne zglede ob vpeljavah konceptov SFF in prepletenostne entropije, se zdi sistem primeren za podrobnejšo analizo SFF kot primernega orodja za presojo ergodičnosti oziroma večdelčne lokaliziranosti. Heisenbergova veriga namreč omogoča bistveno lažjo izvedbo skalirne analize, hkrati pa je možna tudi primerjava izračunov z že znanimi napovedmi drugih metod. Drugo izhodišče za prihodnje raziskave je vpeljava mikrokanične različice izračuna SFF, s katero bi namesto lastnosti celotnega spektra slednje preučevali le v ozkem energijskem oknu. Ker bi v energijskem oknu morali zagotoviti zadostno število stanj, bi to terjalo preučevanje večjih sistemov. Posledično izračun lastnih stanj ne bi več temeljil na polni diagonalizaciji, medtem ko bi sam postopek izračuna SFF na dobljenem spektru ostal enak postopku, predstavljenem v tem magistrskem delu.

Literatura

- [1] D. A. Abanin in dr., *Ergodicity, entanglement and many-body localization*, arXiv preprint arXiv:1804.11065 (2018).
- [2] E. Abrahams, *50 years of Anderson Localization*, world scientific, 2010.
- [3] E. Abrahams in dr., *Scaling theory of localization: Absence of quantum diffusion in two dimensions*, Physical Review Letters **42**(10) (1979) 673.
- [4] A. A. Abul-Magd in A. Y. Abul-Magd, *Unfolding of the spectrum for chaotic and mixed systems*, Physica A: Statistical Mechanics and its Applications **396** (2014) 185–194.
- [5] B. L. Altshuler in dr., *Quasiparticle lifetime in a finite system: A nonperturbative approach*, Physical review letters **78**(14) (1997) 2803.
- [6] P. W. Anderson, *Absence of diffusion in certain random lattices*, Physical review **109**(5) (1958) 1492.
- [7] P. W. Anderson, *Local moments and localized states*, Reviews of Modern Physics **50**(2) (1978) 191.
- [8] Y. Y. Atas in dr., *Distribution of the ratio of consecutive level spacings in random matrix ensembles*, Phys. Rev. Lett. **110** (2013) 084101, doi:10.1103/PhysRevLett.110.084101.
- [9] D. Basko, I. Aleiner in B. Altshuler, *Metal–insulator transition in a weakly interacting many-electron system with localized single-particle states*, Annals of physics **321**(5) (2006) 1126–1205.
- [10] D. Basko, L. Aleiner in B. Altshuler, *On the problem of many-body localization*, Problems of Condensed Matter Physics (2006) 50–70.
- [11] B. Bauer in C. Nayak, *Area laws in a many-body localized state and its implications for topological order*, Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment **2013**(09) (2013) P09005.
- [12] M. V. Berry in M. Tabor, *Level clustering in the regular spectrum*, Proc. R. Soc. Lond. A **356**(1686) (1977) 375–394.
- [13] J. Bonča in M. Mierzejewski, *Delocalized carriers in the t – j model with strong charge disorder*, Phys. Rev. B **95** (2017) 214201, doi:10.1103/PhysRevB.95.214201.

- [14] P. Bordia in dr., *Coupling identical one-dimensional many-body localized systems*, Phys. Rev. Lett. **116** (2016) 140401, doi:10.1103/PhysRevLett.116.140401.
- [15] X. Chen in A. W. Ludwig, *Universal spectral correlations in the chaotic wave function, and the development of quantum chaos*, arXiv preprint arXiv:1710.02686 (2017).
- [16] L. D'Alessio in dr., *From quantum chaos and eigenstate thermalization to statistical mechanics and thermodynamics*, Advances in Physics **65**(3) (2016) 239–362.
- [17] J. M. Deutsch, *Quantum statistical mechanics in a closed system*, Physical Review A **43**(4) (1991) 2046.
- [18] A. Finkel'shtein, *Influence of coulomb interaction on the properties of disordered metals*, Sov. Phys. JETP **57**(1) (1983) 97–108.
- [19] L. Fleishman in P. Anderson, *Interactions and the anderson transition*, Physical Review B **21**(6) (1980) 2366.
- [20] F. Grasselli in G. Grignani, *Entanglement entropy* .
- [21] M. Karabach in dr., *Introduction to the bethe ansatz i*, Computers in Physics **11**(1) (1997) 36–43.
- [22] S. S. Kondov in dr., *Disorder-induced localization in a strongly correlated atomic hubbard gas*, Phys. Rev. Lett. **114** (2015) 083002, doi:10.1103/PhysRevLett.114.083002.
- [23] P. Kos, M. Ljubotina in T. Prosen, *Many-body quantum chaos: Analytic connection to random matrix theory*, Physical Review X **8**(2) (2018) 021062.
- [24] B. Kramer in A. MacKinnon, *Localization: theory and experiment*, Reports on Progress in Physics **56**(12) (1993) 1469.
- [25] A. Lagendijk, B. Van Tiggelen in D. S. Wiersma, *Fifty years of anderson localization*, Phys. Today **62**(8) (2009) 24–29.
- [26] G. Lemut, M. Mierzejewski in J. Bonča, *Complete many-body localization in the t - j model caused by a random magnetic field*, Physical review letters **119**(24) (2017) 246601.
- [27] D. J. Luitz, N. Laflorencie in F. Alet, *Many-body localization edge in the random-field heisenberg chain*, Physical Review B **91**(8) (2015) 081103.
- [28] M. L. Mehta, *Random matrices*, **142**, Elsevier, 2004.
- [29] R. Mondaini in M. Rigol, *Many-body localization and thermalization in disordered hubbard chains*, Phys. Rev. A **92** (2015) 041601, doi:10.1103/PhysRevA.92.041601.
- [30] N. Mott, *Metal-insulator transitions*, CRC Press, 1990.

-
- [31] N. Mott in W. Twose, *The theory of impurity conduction*, Advances in Physics **10**(38) (1961) 107–163, doi:10.1080/00018736100101271.
 - [32] N. F. Mott in E. A. Davis, *Electronic processes in non-crystalline materials*, OUP Oxford, 2012.
 - [33] R. Nandkishore in D. A. Huse, *Many-body localization and thermalization in quantum statistical mechanics*, Annu. Rev. Condens. Matter Phys. **6**(1) (2015) 15–38.
 - [34] V. Oganesyan in D. A. Huse, *Localization of interacting fermions at high temperature*, Phys. Rev. B **75** (2007) 155111, doi:10.1103/PhysRevB.75.155111.
 - [35] A. Pal in D. A. Huse, *Many-body localization phase transition*, Physical review b **82**(17) (2010) 174411.
 - [36] P. Prelovšek in dr., *Density correlations and transport in models of many-body localization*, Annalen der Physik **529**(7) (2017) 1600362.
 - [37] M. Rigol, V. Dunjko in M. Olshanii, *Thermalization and its mechanism for generic isolated quantum systems*, Nature **452**(7189) (2008) 854.
 - [38] M. Schreiber in dr., *Observation of many-body localization of interacting fermions in a quasi-random optical lattice*, Science (2015) aaa7432.
 - [39] M. Serbyn, Z. Papić in D. A. Abanin, *Local conservation laws and the structure of the many-body localized states*, Physical review letters **111**(12) (2013) 127201.
 - [40] M. Sieber in K. Richter, *Correlations between periodic orbits and their rôle in spectral statistics*, Physica Scripta **2001**(T90) (2001) 128.
 - [41] J. Spalek, *tj model then and now: a personal perspective from the pioneering times*, arXiv preprint arXiv:0706.4236 (2007).
 - [42] M. Srednicki, *The approach to thermal equilibrium in quantized chaotic systems*, Journal of Physics A: Mathematical and General **32**(7) (1999) 1163.
 - [43] P. Wölfle in D. Vollhardt, *Self-consistent theory of anderson localization: General formalism and applications*, International Journal of Modern Physics B **24**(12n13) (2010) 1526–1554.
 - [44] M. Žnidarič, T. Prosen in P. Prelovšek, *Many-body localization in the heisenberg $x x z$ magnet in a random field*, Physical Review B **77**(6) (2008) 064426.

Dodatek A

Preslikava med Hubbardovim modelom in modelom t - J

Zanima nas izpeljava preslikave med Hubbardovim modelom in modelom t - J , pri čemer želimo obravnavati tudi vpliv potencialnega nereda, ki se sklaplja bodisi z nosilci naboja bodisi s spini. Uvodoma obravnavamo enostavnejši primer brez dodatnega naključnega nereda, v drugem delu pa vključimo tudi tega.

A.1 Primer brez nereda

Obravnavamo Hubbardov model, ki ga v približku tesne vezi podaja hamiltonka

$$H = H_t + H_U = -t \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} \left(c_{i, \sigma}^\dagger c_{j, \sigma} + c_{j, \sigma}^\dagger c_{i, \sigma} \right) + U \sum_i n_{i \uparrow} n_{i \downarrow}. \quad (\text{A.1})$$

Pri tem $\langle ij \rangle$ označuje vsoto po najbližjih sosedih, σ pa vsoto po projekcijah spina na os z . Fermionski kreacijski in anihilacijski operatorji $c_{i, \sigma}^\dagger, c_{i, \sigma}$ ustvarijo oziroma uničijo delec z dano projekcijo spina σ na i -tem mestu v kristalni rešetki. Med izpeljavo bomo pri zapisu večdelčnih stanj upoštevali naslednjo ureditev fermionskih operatorjev

$$|\psi\rangle = \prod_{\{i \uparrow\}} c_{i, \uparrow}^\dagger \prod_{\{j \downarrow\}} c_{j, \downarrow}^\dagger |0\rangle,$$

kjer je $|0\rangle$ vakuumsko stanje, produkta pa tečeta po vseh mestih, na katerih se nahajajo spini z dano projekcijo.

V hamiltonki, ki jo podaja En. (A.1), skakalni člen H_t opisuje skakanje elektronov med sosednjimi mesti v kristalni rešetki, pri čemer je t verjetnost za tovrstno tuneliranje. Interakcijski člen H_U modelira coulombski odboj med elektroni in ob dvojni zasedenosti mesta povzroči energijski prirastek U . V limitnem primeru $t \rightarrow 0$, oziroma v limiti popolnoma lokaliziranih enodelčnih valovnih funkcij, so večdelčna stanja brez dvojne zasedenosti mest medsebojno degenerirana pri ničelni energiji. Pri izpeljavi modela t - J predpostavimo močno coulombsko interakcijo U in posledično nizko koncentracijo energijsko neugodnih dvojno zasedenih mest. V tem primeru so visokoenergijska stanja z dvojno zasedenimi mesti v energijskem spektru dobro ločena od stanj z največ enojno zasedenimi mesti. Za opis nizkoenergijskih stanj Hubbardove hamiltonke, podane z En. (A.1), torej v tej limiti zadošča obravnavo problema na podprostoru največ enojno zasedenih stanj.

Preslikavo med Hubbardovim modelom in modelom t - J bomo izpeljali perturbativno, začenši v limiti popolnoma lokaliziranih enodelčnih valovnih funkcij, kjer kot neperturbirani del hamiltonke vzamemo interakcijski člen H_t , kinetični člen H_U pa vključimo kot perturbacijo. Zanima nas oblika efektivne hamiltonke \tilde{H} , s katero v limiti močne coulombske interakcije opišemo fiziko nizkoenergijskih stanj Hubbardove hamiltonke. Ker se v slednji sklapljajo le sosednja mesta, lahko problem brez škode za splošnost obravnavamo na dveh sosednjih mestih. Ob upoštevanju prepovedi dvojne zasedenosti mest razpenjajo bazo pripadajočega Hilbertovega podprostora naslednja stanja:

$$\begin{aligned}
 |\alpha_1\rangle &= |\uparrow\uparrow\rangle = c_{i,\uparrow}^\dagger c_{j,\uparrow}^\dagger |0\rangle & |\alpha_2\rangle &= |\downarrow\downarrow\rangle = c_{i,\downarrow}^\dagger c_{j,\downarrow}^\dagger |0\rangle \\
 |\alpha_3\rangle &= |\uparrow\downarrow\rangle = c_{i,\uparrow}^\dagger c_{j,\downarrow}^\dagger |0\rangle & |\alpha_4\rangle &= |\downarrow\uparrow\rangle = c_{j,\uparrow}^\dagger c_{i,\uparrow}^\dagger |0\rangle \\
 |\alpha_5\rangle &= |\uparrow\bullet\rangle = c_{i,\uparrow}^\dagger |0\rangle & |\alpha_6\rangle &= |\bullet\uparrow\rangle = c_{j,\uparrow}^\dagger |0\rangle \\
 |\alpha_7\rangle &= |\downarrow\bullet\rangle = c_{j,\downarrow}^\dagger |0\rangle & |\alpha_8\rangle &= |\bullet\downarrow\rangle = c_{j,\downarrow}^\dagger |0\rangle
 \end{aligned} \tag{A.2}$$

Označimo podprostor stanj brez vrzeli z $\{|\alpha^0\rangle\}$ in podprostor stanj z vrzeljo $\{|\alpha^1\rangle\}$. Prepovedana stanja z energijo U in dvojno zasedenostjo mest bomo potrebovali pri perturbacijski obravnavi in jih zapišemo kot

$$|\beta\rangle = |\uparrow\downarrow\bullet\rangle = c_{i,\uparrow}^\dagger c_{i,\downarrow}^\dagger |0\rangle, \quad |\beta'\rangle = |\bullet\uparrow\downarrow\rangle = c_{j,\uparrow}^\dagger c_{j,\downarrow}^\dagger |0\rangle. \tag{A.3}$$

V modelu t - J so skoki delcev med posameznimi mesti dovoljeni le v primeru, ko je na ciljnem mestu pred skokom vrzel. Formalno zahtevi zadostimo z uvedbo projiciranih fermionskih operatorjev $\tilde{c}_{i\sigma}$ v skladu s predpisom

$$\tilde{c}_{i\sigma}^\dagger = c_{i\sigma}^\dagger (1 - n_{i-\sigma}), \tag{A.4}$$

s čimer preprečimo možnost dvojne zasedenosti posameznega mesta. Kinetični del \tilde{H}_{kin} efektivne hamiltonke \tilde{H} tako dobimo v prvem redu perturbacije z delovanjem operatorja H_{kin} na podprostoru $\{|\alpha^1\rangle\}$. S projiciranimi operatorji ga zapišemo kot

$$\tilde{H}_t = -t \sum_{\langle ij \rangle \sigma} \left(\tilde{c}_{i,\sigma}^\dagger \tilde{c}_{j\sigma} + \tilde{c}_{j\sigma}^\dagger \tilde{c}_{i\sigma} \right). \tag{A.5}$$

Pri nadaljnji perturbacijski obravnavi moramo upoštevati drugi red degenerirane perturbacijske teorije, saj v podprostoru $\{|\alpha^0\rangle\}$ direktni matrični elementi $\langle \alpha | H_t | \alpha \rangle$ ne obstajajo, vsa stanja $|\alpha\rangle$ pa so ob odsotnosti perturbacije degenerirana. Matrične elemente efektivne hamiltonke v tem primeru podaja zveza

$$\left(\tilde{H}_{\text{eff}} \right)_{\alpha, \alpha'} = \sum_{\beta \neq \alpha} \frac{\langle \alpha | H_t | \beta \rangle \langle \beta | H_t | \alpha' \rangle}{E_\alpha^0 - E_\beta^0}, \tag{A.6}$$

kjer vsota teče po vzbujenih stanjih, podanih z En. (A.3). Hitro vidimo, da je $H_t |\beta\rangle = H_t |\beta'\rangle = -t (|\alpha_3\rangle + |\alpha_4\rangle)$ in da so potemtakem neničelni le matrični elementi $\tilde{H}_{33} = \tilde{H}_{44} = \tilde{H}_{34} = \tilde{H}_{43} = -\frac{2t^2}{U}$. Tu smo upoštevali $E_\alpha^0 - E_\beta^0 \sim -U$. Če

zapišemo matrične elemente \tilde{H}_{eff} kot

$$\begin{aligned}\tilde{H}_{33} &= |\alpha_3\rangle\langle\alpha_3| = \frac{-2t^2}{U} c_{i,\uparrow}^\dagger c_{j,\downarrow}^\dagger c_{j,\downarrow} c_{i,\uparrow} = \frac{2t^2}{U} c_{i,\uparrow}^\dagger c_{i,\uparrow} c_{j,\downarrow}^\dagger c_{j,\downarrow}, \\ \tilde{H}_{44} &= |\alpha_4\rangle\langle\alpha_4| = \frac{-2t^2}{U} c_{j,\uparrow}^\dagger c_{i,\downarrow}^\dagger c_{i,\downarrow} c_{j,\uparrow} = \frac{2t^2}{U} c_{j,\uparrow}^\dagger c_{j,\uparrow} c_{i,\downarrow}^\dagger c_{i,\downarrow}, \\ \tilde{H}_{34} &= |\alpha_3\rangle\langle\alpha_4| = \frac{-2t^2}{U} c_{i,\uparrow}^\dagger c_{j,\downarrow}^\dagger c_{i,\downarrow} c_{j,\uparrow} = \frac{2t^2}{U} c_{i,\uparrow}^\dagger c_{i,\downarrow} c_{j,\downarrow}^\dagger c_{j,\uparrow}, \\ \tilde{H}_{43} &= |\alpha_4\rangle\langle\alpha_3| = \frac{-2t^2}{U} c_{j,\uparrow}^\dagger c_{i,\downarrow}^\dagger c_{j,\downarrow} c_{i,\uparrow} = \frac{2t^2}{U} c_{j,\uparrow}^\dagger c_{j,\downarrow} c_{i,\downarrow}^\dagger c_{i,\uparrow},\end{aligned}\tag{A.7}$$

potem lahko \tilde{H}_{eff} zapišemo kot

$$\tilde{H}_{\text{eff}} = \frac{2t^2}{U} \sum_{\langle ij \rangle \sigma} \left[\tilde{c}_{i,\sigma}^\dagger \tilde{c}_{i,-\sigma} \tilde{c}_{j,-\sigma}^\dagger \tilde{c}_{j,\sigma} + n_{i,\sigma} n_{j,-\sigma} \right].\tag{A.8}$$

En. (A.8) lahko prikladneje zapišemo z uporabo spinskih operatorjev. Prepoznamo namreč $S_i^+ = \tilde{c}_{i,\uparrow}^\dagger \tilde{c}_{i,\downarrow}$ in $S_i^- = \tilde{c}_{i,\downarrow}^\dagger \tilde{c}_{i,\uparrow}$, pri zapisu $\sum_{\sigma} n_{i,\sigma} n_{j,-\sigma}$ pa uporabimo zvezi $n_i = (n_{i,\uparrow} + n_{i,\downarrow})$ in $S_i^z = \frac{1}{2} (n_{i,\uparrow} - n_{i,\downarrow})$. Dobimo

$$\begin{aligned}\tilde{H}_{\text{eff}} &= \frac{2t^2}{U} \sum_{\langle ij \rangle} \left[(S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+) - \frac{n_i n_j - 4S_i^z S_j^z}{2} \right] = \\ &= J \sum_{\langle ij \rangle} \left[\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - \frac{n_i n_j}{4} \right].\end{aligned}\tag{A.9}$$

Pri tem smo vpeljali izmenjalno sklopitev $J = \frac{4t^2}{U}$, na vmesnem koraku zgornje izpeljave pa smo uporabili enakost $2S_i \cdot S_j = 2S_i^z S_j^z + S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+$. Celotna hamiltonka \tilde{H} se ob upoštevanju mobilnih vrzeli in sklopitve magnetnih prostostnih stopenj zapiše kot

$$\tilde{H} = -t \sum_{\langle ij \rangle \sigma} \left(\tilde{c}_{i,\sigma}^\dagger \tilde{c}_{j\sigma} + \tilde{c}_{j\sigma}^\dagger \tilde{c}_{i\sigma} \right) + J \sum_{\langle ij \rangle} \left[\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - \frac{n_i n_j}{4} \right]\tag{A.10}$$

Pri izpeljavi nismo upoštevali prispevkov drugega reda zaradi sklopitve mesta z levim in desnim sosedom, ki vodijo do t.i. *koreliranega skakanja*.

A.2 Dodatek nereda

Tokrat nas zanima, na kateri tip nereda v modelu t - J se preslika nered, ki ga v Hubbardovem modelu sklopimo bodisi s spini bodisi z vrzelmi. Hamiltonki, ki jo podaja En. (A.1), v vsej splošnosti dodamo člen z neredom kot

$$H = H_t + H_U + H_{\text{dis}} = -t \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} \left(c_{i,\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + c_{j\sigma}^\dagger c_{i\sigma} \right) + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} + \sum_{i,\sigma} h_{i,\sigma} n_{i,\sigma}\tag{A.11}$$

kjer so $h_{i,s}$ v skladu z neko verjetnostno porazdelitvijo izžrebane naključne vrednosti, pri čemer sta porazdelitvi za posamezni projekciji spina v splošnem lahko različni. V prvem redu perturbacije dobimo za kinetični člen in člen z neredom naslednji izraz

$$\tilde{H}_{\text{kin}} + \tilde{H}_{\text{dis}} = -t \sum_{\langle ij \rangle \sigma} \left(\tilde{c}_{i,\sigma}^\dagger \tilde{c}_{j\sigma} + \tilde{c}_{j\sigma}^\dagger \tilde{c}_{i\sigma} \right) + \sum_{i,\sigma} h_{i,\sigma} (1 - n_{i,-\sigma}) n_{i,\sigma}\tag{A.12}$$

Na mestih i, j smo tako dodali nered $h_{\{i,j\},\sigma}$. Stanji $|\beta\rangle$ in $|\beta'\rangle$ imata sedaj energiji

$$E_\beta = U + h_{i,\uparrow} + h_{i,\downarrow}, \quad E_{\beta'} = U + h_{j,\uparrow} + h_{j,\downarrow} \quad (\text{A.13})$$

za uporabo perturbacijske teorije drugega reda pa potrebujemo bazo medsebojno degeneriranih stanj. Iz stanj, podanih v En. (A.2), sestavimo bazo

$$|\tilde{\alpha}_3\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\alpha_3\rangle + |\alpha_4\rangle), \quad |\tilde{\alpha}_4\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\alpha_3\rangle - |\alpha_4\rangle). \quad (\text{A.14})$$

Od prej vemo, da stanji $|\alpha_1\rangle$ in $|\alpha_2\rangle$ za našo izpeljavo nista pomembni, saj bosta prispevali le ničelne matrične elemente v efektivni hamiltonki, medtem ko sta zgornji stanji ob odsotnosti perturbacije degenerirani z energijo

$$E_0^\alpha = \frac{1}{2}(h_{i,\uparrow} + h_{i,\downarrow} + h_{j,\uparrow} + h_{j,\downarrow}).$$

Takoj vidimo, da je $H_{\text{kin}}|\beta\rangle = H_{\text{kin}}|\beta'\rangle = -t(|\alpha_3\rangle + |\alpha_4\rangle) = -t\sqrt{2}|\tilde{\alpha}_3\rangle$. V efektivni hamiltonki imamo tako samo člen

$$\tilde{H}_{\tilde{3},\tilde{3}} = 2t^2 \left(\frac{1}{U - \Xi_{i,j}} + \frac{1}{U + \Xi_{i,j}} \right),$$

kjer je

$$\Xi_{i,j} = \frac{1}{2} \sum_{\sigma} (h_{i,\sigma} - h_{j,\sigma}). \quad (\text{A.15})$$

V bazi stanj $|\alpha_3\rangle, |\alpha_4\rangle$ imamo tako

$$\tilde{H}_{3,3} = \tilde{H}_{4,4} = \tilde{H}_{3,4} = \tilde{H}_{4,3} = t^2 \left(\frac{1}{U - \Xi_{i,j}} + \frac{1}{U + \Xi_{i,j}} \right).$$

Od tu naprej je razprava enaka kot zgoraj, zaradi vpliva nereda očitno postane tudi sklopitvena konstanta krajevno odvisna, $J \rightarrow J_{i,j}$, kjer je

$$J_{i,j} = 2t^2 \left(\frac{1}{U - \Xi_{i,j}} + \frac{1}{U + \Xi_{i,j}} \right). \quad (\text{A.16})$$

V odsotnosti nereda pridemo nazaj v predhodni primer, $J = \frac{4t^2}{U}$. Z dodatkom nereda se tako Hubbardova hamiltonka, podana z En. (A.1), v hamiltonko modela t - J preslika kot

$$\tilde{H} = -t \sum_{\langle ij \rangle \sigma} (\tilde{c}_{i,\sigma}^\dagger \tilde{c}_{j,\sigma} + \tilde{c}_{j,\sigma}^\dagger \tilde{c}_{i,\sigma}) + \sum_{\langle ij \rangle} J_{i,j} \left[\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - \frac{n_i n_j}{4} \right] + \sum_{i,\sigma} h_{i,\sigma} (1 - n_{i,-\sigma}) n_{i,\sigma}. \quad (\text{A.17})$$

V tem magistrskem delu privzamemo, da je J konstanten, $J_{i,j} = J$. Vrzelní in spinski nered lahko uvedemo kot ustrezno linearno kombinacijo členov $h_{i,\uparrow}$ in $h_{i,\downarrow}$. Spinski nered ustreza izbiri

$$h_{i,\uparrow} = -h_{i,\downarrow}, \quad (\text{A.18})$$

vrzelní nered pa izbiri

$$h_{i,\uparrow} = h_{i,\downarrow}. \quad (\text{A.19})$$

Iz En. (A.15) lahko razberemo, da uvedba spinskega nereda ne vpliva na vrednost izmenjalne konstante, saj je $\Xi_{i,j}$ v tem primeru enak nič. Možne so tudi vpeljave drugih tipov nereda, denimo takšnega, ki se sklapija zgolj z eno vrsto spinov, v tem primeru izžrebamo $h_{i,\sigma}$ in postavimo $h_{i,-\sigma} = 0$.