UNIVERZA V LJUBLJANI
FAKULTETA ZA MATEMATIKO IN FIZIKO
ODDELEK ZA FIZIKO
PROGRAM in SMER ŠTUDIJA

Ime in priimek

NASLOV MAGISTRSKEGA DELA

Magistrsko delo

MENTOR\-ICA: naziv, Ime in priimek
SOMENTOR\-ICA: naziv, Ime in priimek

Ljubljana, leto

Zahvala

Hvala ker šumniki ne delajo Na tem mestu zapišite, komu se zahvaljujete za pomoč pri nastanku magistrskega dela.

Izvleček

Kratek izvleček v slovenskem jeziku.

Ključne besede:
PACS:

Abstract

Kratek izvleček v angleškem jeziku.

Keywords:
PACS:

Kazalo

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. Zaradi odsotnosti sklopitve z zunanjim rezervoarjem je tovrstna relaksacija neravnovesnih začetnih stanj proti ravnovesnim termalnim vrednostim v izoliranem sistemu možna, če sistem sam sebi predstavlja efektivno 'toplotno kopel'. To pomeni, da se mora podsistem z makroskopsko zanemarljivim deležem prostostnih stopenj celotnega sistema s preostankom sistema sklapljati podobno, kot se v običajni formulaciji statističnomehanskih ansamblov sistemi sklapljajo z zunanjim rezervoarjem [1] [28].

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 [21] [2] in dolgo preučevano, saj je P.W. Anderson v svojem prelomnem članku [5] 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 [26], 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 [25]. Pri ničelni temperaturi 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] [29] in o zahtevanih lastnostih meddelčnih interakcij. V zadnjih letih postaja področje vse bolj privlačno ne samo zaradi rezultatov numeričnih analiz [38] [29] [24], temveč tudi zaradi porajajočih se možnosti realizacije MBL sistemov v eksperimentih z ultrahladnimi atomi [19] [33] [13]. Nekatera izmed odprtih vprašanj s področja so naslovljena tudi v raziskovalnem delu, predstavljenem v magistrski nalogi, kjer se ukvarjam s prehodom med ergodičnim in MBL režimom v kvantnomehanskem modelu t-J [35]. 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 [14] (ang. *random matrix theory*, v nadaljevanju RMT), v okviru katere so podane teoretične napovedi [23] za vrednosti različnih spektralnih statistik in opazljivk, s katerimi primerjam svoje izračune. Med omenjenimi statistikami sta posebej izpostavljena povprečen razmik med sosednjimi nivoji in statistika razmikov sosednjih energijskih nivojev [8] [29]. Slednji sta zaradi sorazmerne enostavnosti implementacije pogosto uporabljani 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 dobim 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, dopolnim in primerjam 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.

V nadaljevanju uvodnega poglavja najprej podrobneje predstavim pojav Andersonove lokalizacije v neurejenih sistemih neinteragirajočih delcev in razložim pomen različnih modelov nereda. Nato prek dodatka meddelčnih interakcij obravnavo razširim na področje MBL. V drugem poglavju predstavim 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 predstavim tudi numerično implementacijo točne diagonalizacije. V tretjem poglavju predstavim statistične lastnosti hamiltonskih spektrov in vpeljem ključne pojme s področja RMT. Predstavljeni so rezultati analize sosednjih energijskih nivojev v odvisnosti od različnih tipov nereda in rezultati analize SFF. Četrto poglavje je namenjeno vpeljavi prepletenostne entropije in predstavitvi izračunov za to količino.

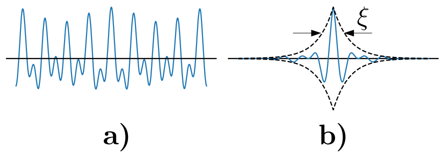
Poglavje 2

Od Andersonove do večdelčne lokalizacije

2.1 Andersonova lokalizacija in osnove neurejenih sistemov

Obravnavo lokalizacijskih pojavov začnem 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.

Zahvaljujoč se translacijski simetriji 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 pojemajočo ovojno funkcijo, kot prikazuje Slika 2.1. Elektroni z lokaliziranimi valovnimi funkcijami so



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.

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 [20]. 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 obravnavam.

Možnost lokalizacije elektronskih valovnih funkcij ob prisotnosti dovolj močnega potencialnega nereda je leta 1958 prvi napovedal P.W. Anderson [5]. 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 [26] nastop lokalizacije ob prisotnosti vsakršnega končnega nereda, enak rezultat pa v termodinamski 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* [25], 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 [6].

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 je bila elektronska prevodnost tipično opisovana v okviru kvantnomehanske različice 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 [21] [6]. V nasprotju z Drudejevim modelom rezultate uspešno razloži model, v katerem valovne funkcije pri dovolj močnem neredu postanejo lokalizirane z eksponentno pojemajočo 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 dizufivna propagacija v neurejenem mediju ne samo upočasni, temveč popolnoma ustavi - delci postanejo ujeti, prevodnost pa pade na ničelno vrednost [37]. Presenetljiv rezultat je možno razložiti preko obravnave večkratne interference valovnih komponent, sipanih na naključno porazdeljenih sipalcih - lokalizacija je namreč v svojem bistvu interferenčni pojav.

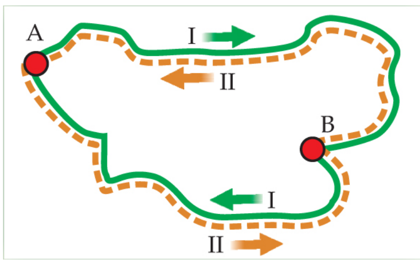
2.1.2 Ojačano povratno sipanje

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 interfenčnih 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

$$w = |A_1 + A_2|^2 = w_{\mathrm{cl}} + w_{\mathrm{int}}, \tag{2.1}$$

kjer je $w_{\mathrm{cl}} = |A_1|^2 + |A_2|^2$ in $w_{\mathrm{int}} = 2\,\mathrm{Re}\,(A_1^* A_2)$ [37]. 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



Slika 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 [21].

verjetnost povratka kot v klasičnem primeru:

$$w = 4\,|A_1|^2 = 2w_{\mathrm{cl}}. \tag{2.2}$$

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.

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 [20] 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

$$\beta = \frac{\mathrm{d}\log g}{d\log L}. \tag{2.3}$$

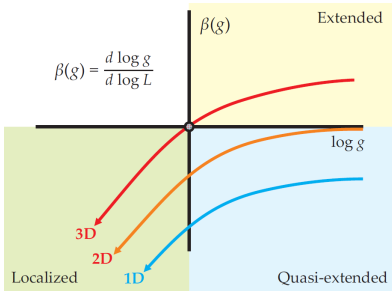
Teorija privzame eksplicitno odvisnost β zgolj od g, ne pa tudi od energije, nereda ali dolžine stranice L. Kvalitativno obnašanje količine β določata znani asimptotski limiti majhne in velike prevodnosti, medtem ko so vmesne vrednosti določene z interpolacijo ob predpostavki, da je β zvezna in monotono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

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

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

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 tridimenzionalne 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 tem režimu podana z zvezo

$$\beta = \frac{\mathrm{d}\log g}{\mathrm{d}L}\frac{\mathrm{d}L}{\mathrm{d}\log L} = \log g \qquad (2.5)$$



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 [21].

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.

2.1.4 Modeli nereda

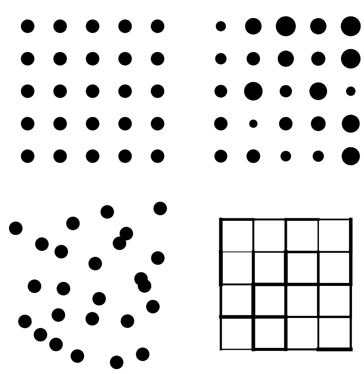
V tem podpoglavju predstavim različne modele nereda v kvantnomehanskih sistemih. Podana je razlaga uvedbe nereda v idealno urejene kristalne sisteme, kot najpogosteje uporabljan model neurejenega sistema neinteragirajočih delcev pa je podrobneje predstavljen Andersonov model.

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

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

kjer je $\hat{p}$ 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 izbranima normaliziranima 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:

$$H = \sum_{j\nu} u_{j\nu} c^\dagger_{j\nu} c_{j\nu} + \sum_{j\nu,k\mu} t_{j\nu,k\mu} c^\dagger_{j,\nu} c_{k\mu}. \tag{2.7}$$

Tu so $c^\dagger_{j\nu}, c_{j\nu}$ 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 nereda, saj so mesta v kristalni rešetki dobro definirana in sovpadajo z mesti urejene kristalne mreže.

Andersonov model [5] 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 konstantno hitrostjo tuneliranja t in prisotnostjo le ene orbitale, $\nu = 1$. Naključne potencialne energije u_j so porazdeljene enakomerno na intervalu $[-W, W]$ v skladu s porazdelitvijo

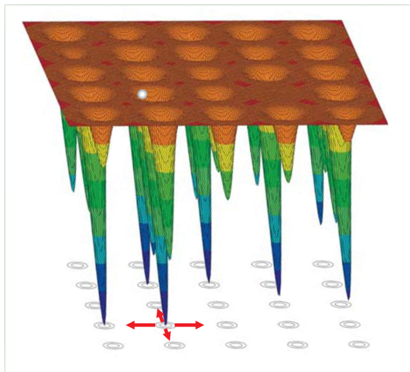
$$p(u_j) = \frac{1}{2W}\Theta\left(W - |u_j|\right), \tag{2.8}$$

kjer je W *parameter moči nereda.* Hamiltonka Andersonovega modela se tako zapiše kot

$$H = \sum_j u_j n_j + t \sum_{\text{n.s.}} \left(c^\dagger_i c_j + \text{h.c.}\right), \tag{2.9}$$

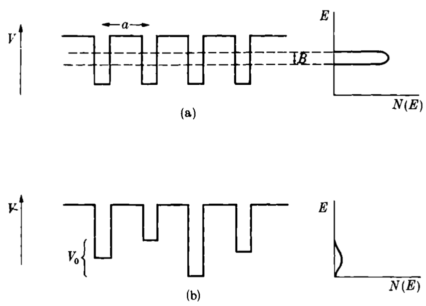
kjer je $n_j = c_j^\dagger c_j$ operator številske gostote delcev na j-tem mestu kristalne mreže.

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.



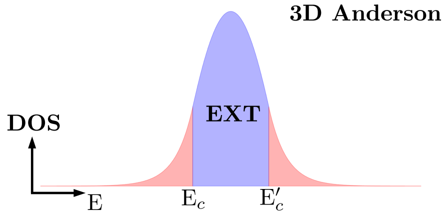
Slika 2.5: Shematski prikaz Andersonovega modela v dveh dimenzijah. Slika je bila vzeta iz [21].

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.



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 [27].

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.



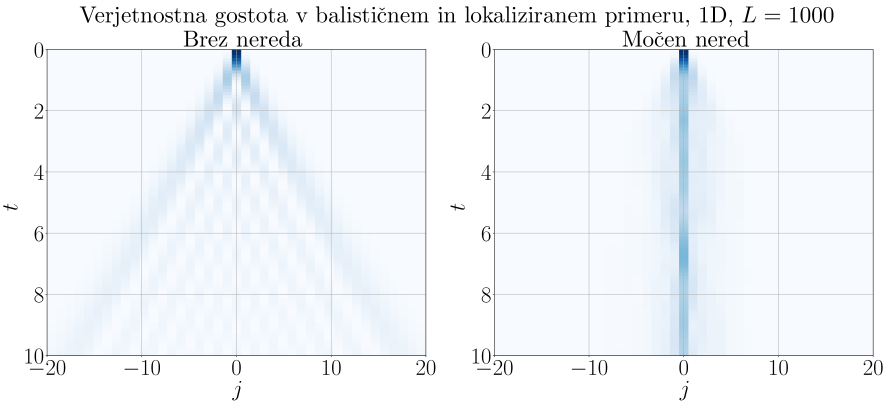
Slika 2.7: Shematski prikaz tipične gostote stanj v odvisnosti od energije za tridimenzionalni Andersenov model za neko podkritično vrednost nereda, $W < W_c$. Stanja v robovih pasu (ki sta obarvana rdeče) so lokalizirana, medtem ko so stanja v sredini pasu (ki je obarvana modro) razsežna. E_c in E'_c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

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 vrednosti 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 znatnega prekrivalnega integrala in 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,

$$\sigma(T) \propto \exp\left(\frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_{\mathrm{F}}}{T}\right). \tag{2.10}$$

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.

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 dosedanjo 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].

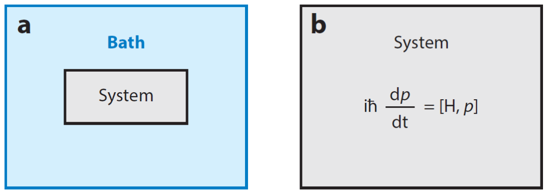
Leta 1980 sta Fleishman in Anderson [17] podala kvalitativne argumente v prid nastopu lokalizacije ob prisotnosti šibkih interakcij kratkega dosega. Uporaba teorije renormalizacijske grupe je omogočila posplošitev koncepta Andersonovega izolatorja in posledično opis osnovnih stanj neurejenih sistemov z interakcijami. V ta okvir spada delo Finkelsteina [16], 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 [4] 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]. Obstoj večdelčno lokalizirane faze tudi pri neskončni temperaturi v neurejenem interagirajočem sistemu na diskretni mreži sta leta 2007 utemeljila Oganesyan in Huse [29], 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 navdahnil 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. Interakcije v interagirajočih večdelčnih sistemih sklapljajo različna večdelčna stanja. V kolikor v sistemu obstajajo delokalizirana stanja, lahko interakcije denimo omogočijo prehod iz lokaliziranega osnovnega stanja v vzbujeno delokalizirano večdelčno stanje in povzročijo fazni prehod med izolatorskim in prevodnim obnašanjem. Pri presoji obstoja večdelčno lokalizirane faze moramo tako 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 poglavitna lastnost MBL sistemov odsotnost termalizacije, je zatem podrobneje predstavljen mehanizem termalizacije v kvantnih sistemih skupaj s *hipotezo termalizacije lastnih stanj* (ang. *eigenstate thermalization hypothesis*, 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. [28].

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

$$|\psi(t)\rangle = \mathrm{e}^{-iHt}|\psi(0)\rangle, \tag{2.11}$$

je časovni razvoj gostotne matrike določen z zvezami

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

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

$$\langle\hat{O}\rangle_t = \mathrm{Tr}\left(\hat{O}\hat{\rho}(t)\right). \tag{2.13}$$

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:

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

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,

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

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 [15] [1]

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

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 [28].

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 [36]

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

Širina energijskega okna Δ_E tipično pojema s korenom velikosti sistema, $\Delta \propto 1/\sqrt{L}$ (izpeljava je navedena v prilogi k Ref. [32]). 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 [32]. Z upoštevanjem ozkega energijskega okna En. (2.15) prepišemo

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

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 $\bar{E}$.

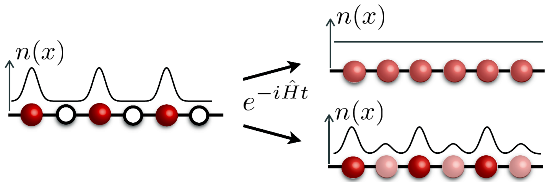
Veljavnost ETH v sistemu pomeni njegovo termalizacijo in tako implicira ergodičnost v kvantnem primeru. Podrobnim numeričnim študijam ETH navkljub [14] trenutno še ni povsem jasno, ali je veljavnost hipoteze potreben pogoj za termalizacijo - za zdaj vemo zgolj, da ETH velja v vseh termalizirajočih sistemih. 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 [32]. 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.

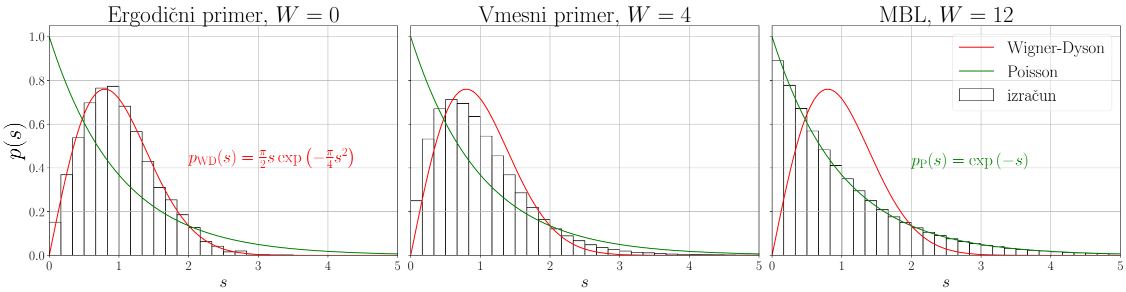
Kot smo opisali v predhodnem poglavju, so v ergodičnih sistemih večdelčna lastna stanja termalna, kar v izoliranem sistemu dovoljuje relaksacijo poljubnega začetnega stanja proti ravnovesni vrednosti - pravimo, da sistem lahko sam sebi služi *toplotna kopel*. V MBL sistemih je drugače, saj zanje ETH 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 dolgočasovnim razvojem v En. (2.15) uniči izvendiagonalne matrične elemente $\langle\alpha|\hat{O}|\beta\rangle$, ki tipično nosijo glavnino informacije o prekrivanju začetnega stanja z lastnimi funkcijami hamiltonke. Zaradi veljavnosti ETH so v ergodičnem sistemu lastna stanja termalna in neodvisno 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 Oganesyan in Huse [29], 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 [23] [8] [14]. Vrednosti različnih spektralnih opazljivk, v nalogi denimo preučujemo porazdelitev *razmikov* med sosednjimi energijskimi nivoji in statistiko *razmerij razmikov* med sosednjimi energijskimi nivoji [29], 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.



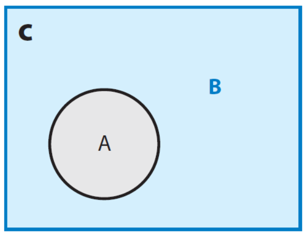
Slika 2.11: Ilustrativen primer uporabe spektralne statistike za presojo ergodičnosti oziroma lokaliziranosti sistema. Prikazana je porazdelitev statistike sosednjih energijskih nivojev za model t-J z naključnim potencialnim neredom, v katerem pride do prehoda med ergodično in MBL fazo. Formalno je model 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 $\hat{\rho}_{\mathrm{A}}$ podsistema A:

$$S_{\mathrm{ent}}\left(A\right) = \mathrm{Tr}\left\{\hat{\rho}_{\mathrm{A}} \log \hat{\rho}_{\mathrm{A}}\right\}. \tag{2.18}$$

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

$$\hat{\rho}_{\mathrm{A}} = \mathrm{Tr}_{\mathrm{B}}\ \hat{\rho}. \tag{2.19}$$



Slika 2.12: Shema v pomoč k vpeljavi pojma prepletenostne entropije. Izoliran kvantni sistem razdelimo na podsistema A in B. Slika je bila vzeta iz Ref. [28].

Za lastna stanja $|\alpha\rangle$ mora biti reducirana gostotna matrika $\hat{\rho}^{\alpha}_{\mathrm{A}} = \mathrm{Tr}_{\mathrm{B}}\, |\alpha\rangle\langle\alpha|$ 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 $S_{\mathrm{ent}}(A)$ enaka termodinamski entropiji podsistema A in je zato ekstenzivna - skalira z velikostjo podsistema A, $S_{\mathrm{ent}}(A) \propto \mathrm{vol}(A)$. 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 [34] [11] nakazujejo, da je skaliranje prepletenostne entropije *površinsko* (ang. *area-law scaling*) oziroma sorazmerno površini roba podsistema A, $S_{\mathrm{ent}}(A) \propto \mathrm{vol}(\partial A)$. Z numerično analizo prepletenostne entropije v konkretnih modelskih sistemih se ukvarjamo v poglavju 4.3.

Poglavje 3

Modeli in metode

vi 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 sta si modela ekvivalentna. Izmed fermionskih modelov s spinskimi prostostnimi stopnjami (ang. *spinful fermions*, v nadaljevanju *spinski* fermioni) je v poglavju 3.2 podrobjene predstavljen 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 4.3.

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 moč določa parameter V:

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

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 moči 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 [31].

Leta 2007 sta s točno diagonalizacijo končnih sistemov Oganesyan in Huse [29] v modelu t-V pokazala obstoj 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

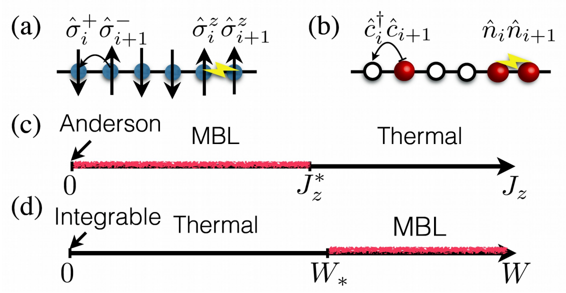
$$H = J \sum_i \left[\frac{1}{2} \left(S_{i+1}^+ S_i^- + S_i^+ S_{i+1}^- \right) + \Delta S_{i+1}^z S_i^z \right] + \sum_i h_i S_i^z. \tag{3.2}$$

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 $J = 2t$ [31], 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 [18]. Naključne vrednosti magnetnega polja so porazdeljene enakomerno na intervalu $[-2W, 2W]$. Jordan-Wignerjevo transformacijo v eni dimenziji podajajo zveze

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

Limita $\Delta \to 0$ 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 [22] 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. 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].

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 [30]. Model XXZ je bil podrobno preučevan tudi v enem izmed prelomnih del s področja [38], 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 rast prepletenostne entropije ni opažena.

3.2 Fermionski modeli s spinskimi prostostnimi stopnjami

V poglavju v obravnavo fermionskih sistemov vključimo tudi spinske prostostne stopnje in podrobneje predstavimo model t-J, ki ga numerično preučujemo v poglavjih 4 in 4.3. Gre za model, ki v limiti močne meddelčne interakcije ustreza fiziki nizkoenergijskih stanj Hubbardovega modela. Zavoljo 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 za primer 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

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

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 $c^\dagger_{i,\sigma}, c_{i,\sigma}$ 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

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

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 projekcih spina na os z. Zadnje stanje pomeni zasedenost mesta z dvema elektronoma z nasprotnim spinom.

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

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

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 [35] 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 dvojna 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:

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

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

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

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

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

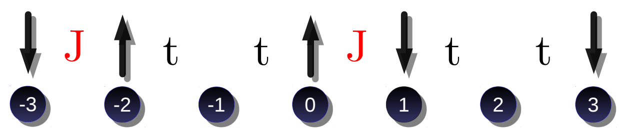
Tako definirani kreacijski operatorji lahko na i-tem mestu v kristalni verigi ustvarijo delec z dano z-projekcijo spina σ samo v primeru, ko se na mestu predhodno še ne nahaja delec z nasprotno projekcijo spina na os z. Na ta način upoštevamo prepoved dvojne fermionske zasedenosti mest. Ob upoštevanju 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 $S_i \cdot S_j = \frac{1}{2}\left(S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+\right) + S_i^z S_j^z$. 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.

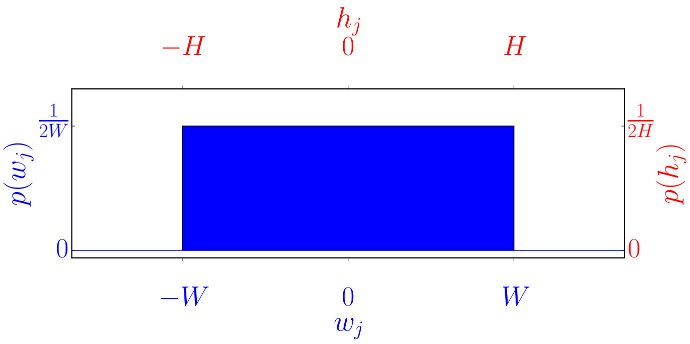
S členom H_w v hamiltonki modeliramo prispevek naključnega magnetnega polja v smeri osi z, ki se zeemansko sklaplja s spinskimi prostostnimi stopnjami, pri čemer je w_i velikost naključno izžrebanega magnetnega polja na i-tem mestu v kristalni rešetki. Podobno člen H_h modelira potencialni nered, ki se sklaplja z vrzelmi v kristalni rešetki, h_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 z ničelno skupno projekcijo spina so v hamiltonki najštevilčnejša in se pojavljajo v vseh spinskih blokih, zato gre za statistično najbolj zastopan sektor. 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

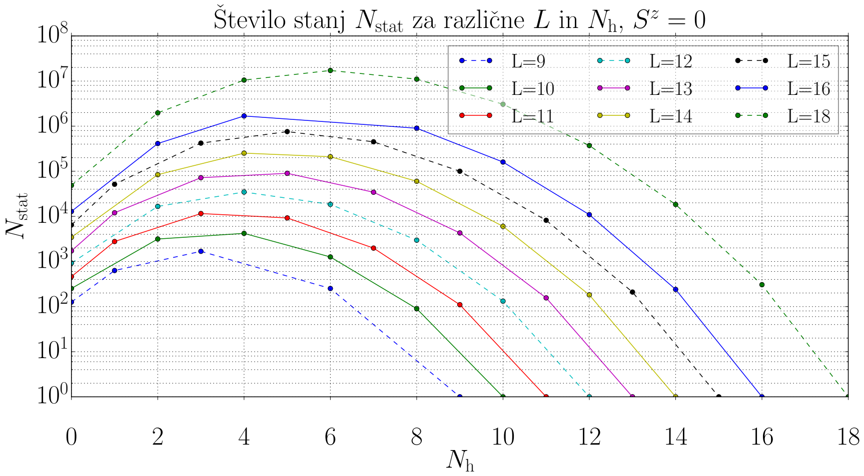
$$N_{\text{stat}} = \binom{L}{N_j}\binom{L - N_h}{N_u}, \tag{3.10}$$



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

Poglavje 4

Statistične lastnosti hamiltonskih spektrov

4.1 Statistika sosednjih energijskih nivojev

Za presojo ergodičnosti oziroma večdelčne lokaliziranosti sistema analiziramoat

istiko energijskih spektrov modelske hamiltonke pri različnih vrednostih parametrov nereda W in H. Pri tem se zanašamo na spoznanja teorije naključnih matrik [23] (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 [14]. 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 odmikov med sosednjimi nivoji preučujemo tudi statistiko razmerij odmikov med sosednjimi energijskimi nivoji, ki sta jo v članku iz leta 2007 [29] prva uvedla Oganesyan in Huse:

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

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 [7]. Poleg tega je povprečje $\langle \tilde{r} \rangle$ za vizualizacijo prikladnejša količina kot porazdelitev energijskih nivojev.

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. [14]. 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:

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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:

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

Zgornja statistika izkazuje dve splošni generični lastnosti, značilni za nivojske statistike kvantnih kaotičnih sistemov. V limiti $s \to 0$ 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 $P_{\mathrm{WD}}(s)$ 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 omenjene analogije.

Izraz (4.7) je eksakten za hamiltonke velikosti 2×2, izkaže pa se [1] [7], 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

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

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. [7], 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 zaključni nalogi, bom tu navedel zgolj ključne rezultate.

Med enostavnejše primere neergodičnega sistema sodi veriga neodvisnih kvantnih harmonskih oscilatorjev z nesoizmerljivimi 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

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

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:

$$P_{\text{Poisson}}(s) = P_0 = \exp\left(-s\right) \tag{4.11}$$

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* Berrya in Taborja (ang. *Berry-Tabor conjecture*) [12].

Na Sliki **??** 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, ki ga opišem v poglavju o numerični implementaciji izračunov, izračunam povprečno vrednost količine $\tilde{r}$, ki jo podaja En. (4.2). V ergodičnem primeru mora izračunana vrednost $\langle \tilde{r} \rangle$ čim bolje ustrezati GOE vrednosti, ki znaša:

$$\langle \tilde{r} \rangle_{\text{GOE}} = 0.5307 \tag{4.12}$$

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

$$\langle \tilde{r} \rangle_{\text{Poisson}} = 0.38629 \tag{4.13}$$

4.2 Spektralni oblikovni faktor

4.3 Prepletenostna entropija

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] B. L. Altshuler in dr., *Quasiparticle lifetime in a finite system: A nonperturbative approach*, Physical review letters **78**(14) (1997) 2803.

[5] P. W. Anderson, *Absence of diffusion in certain random lattices*, Physical review **109**(5) (1958) 1492.

[6] P. W. Anderson, *Local moments and localized states*, Reviews of Modern Physics **50**(2) (1978) 191.

[7] Y. Atas in dr., *Distribution of the ratio of consecutive level spacings in random matrix ensembles*, Physical review letters **110**(8) (2013) 084101.

[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] P. Bordia in dr., *Coupling identical one-dimensional many-body localized systems*, Phys. Rev. Lett. **116** (2016) 140401, doi:10.1103/PhysRevLett.116.140401.

[14] L. D'Alessio in dr., *From quantum chaos and eigenstate thermalization to statistical mechanics and thermodynamics*, Advances in Physics **65**(3) (2016) 239–362.

[15] J. M. Deutsch, *Quantum statistical mechanics in a closed system*, Physical Review A **43**(4) (1991) 2046.

[16] A. Finkelshtein, *Influence of coulomb interaction on the properties of disordered metals*, Sov. Phys. JETP **57**(1) (1983) 97–108.

[17] L. Fleishman in P. Anderson, *Interactions and the anderson transition*, Physical Review B **21**(6) (1980) 2366.

[18] M. Karabach in dr., *Introduction to the bethe ansatz i*, Computers in Physics **11**(1) (1997) 36–43.

[19] 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.

[20] B. Kramer in A. MacKinnon, *Localization: theory and experiment*, Reports on Progress in Physics **56**(12) (1993) 1469.

[21] A. Lagendijk, B. Van Tiggelen in D. S. Wiersma, *Fifty years of anderson localization*, Phys. Today **62**(8) (2009) 24–29.

[22] 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.

[23] M. L. Mehta, *Random matrices*, **142**, Elsevier, 2004.

[24] 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.

[25] N. Mott, *Metal-insulator transitions*, CRC Press, 1990.

[26] N. Mott in W. Twose, *The theory of impurity conduction*, Advances in Physics **10**(38) (1961) 107–163, doi:10.1080/00018736100101271.

[27] N. F. Mott in E. A. Davis, *Electronic processes in non-crystalline materials*, OUP Oxford, 2012.

[28] 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.

[29] 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.

[30] A. Pal in D. A. Huse, *Many-body localization phase transition*, Physical review b **82**(17) (2010) 174411.

[31] P. Prelovšek in dr., *Density correlations and transport in models of many-body localization*, Annalen der Physik **529**(7) (2017) 1600362.

[32] M. Rigol, V. Dunjko in M. Olshanii, *Thermalization and its mechanism for generic isolated quantum systems*, Nature **452**(7189) (2008) 854.

[33] M. Schreiber in dr., *Observation of many-body localization of interacting fermions in a quasi-random optical lattice*, Science (2015) aaa7432.

[34] 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.

[35] J. Spalek, *tj model then and now: a personal perspective from the pioneering times*, arXiv preprint arXiv:0706.4236 (2007).

[36] M. Srednicki, *The approach to thermal equilibrium in quantized chaotic systems*, Journal of Physics A: Mathematical and General **32**(7) (1999) 1163.

[37] 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.

[38] 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 pravilno obravnavati vlogo 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

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

Pri tem $\langle ij \rangle$ označuje vsoto po najbližjih sosedih, σ pa vsoto po projekcijah spina na os z. Fermionski kreacijski in anihilacijski operatorji $c^\dagger_{i,\sigma}, c_{i,\sigma}$ 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

$$|\psi\rangle = \prod_{\{i_\uparrow\}} c^\dagger_{i,\uparrow} \prod_{\{j_\downarrow\}} c^\dagger_{j,\downarrow} |0\rangle,$$

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 $t \to 0$, oziroma v limiti popolnoma lokaliziranih enodelčnih valovnih funkcij, so večdelčna stanja brez dvojne zasedenosti mest medsebojno degenerirana pri ničelni energiji. Pri izpeljavi modela tJ 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 obravnava 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:

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

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

$$|\beta\rangle = |\overset{i}{\uparrow\downarrow}\,\overset{j}{\bullet}\rangle = c^\dagger_{i,\uparrow}c^\dagger_{i,\downarrow}|0\rangle, \qquad |\beta'\rangle = |\overset{i}{\bullet}\,\overset{j}{\uparrow\downarrow}\rangle = c^\dagger_{j,\uparrow}c^\dagger_{j,\downarrow}|0\rangle. \tag{A.3}$$

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 $\tilde{c}_{is}$ v skladu s predpisom

$$\tilde{c}^\dagger_{is} = c^\dagger_{is}\left(1 - n_{i-s}\right), \tag{A.4}$$

s čimer preprečimo možnost dvojne zasedenosti posameznega mesta. Kinetični del $\tilde{H}_{\mathrm{kin}}$ 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

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

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

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

kjer vsota teče po vzbujenih stanjih, podanih z En. (A.3). Hitro vidimo, da je $H_t|\beta\rangle = H_t|\beta'\rangle = -t\left(|\alpha_3\rangle + |\alpha_4\rangle\right)$ 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 $E^0_\alpha - E^0_\beta \sim -U$. Če zapišemo matrične elemente $\tilde{H}_{\text{eff}}$ kot

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

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

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

En. (A.8) lahko prikladneje zapišemo z uporabo spinskih operatorjev. Prepoznamo namreč $S_i^+ = \tilde{c}^\dagger_{i,\uparrow} \tilde{c}_{i,\downarrow}$ in $S_i^- = \tilde{c}^\dagger_{i,\downarrow} \tilde{c}_{i,\uparrow}$, pri zapisu $\sum_s n_{i,s} n_{j,-s}$ 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

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

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

$$\tilde{H} = -t \sum_{\langle ij\rangle s} \left(\tilde{c}^\dagger_{i,s} \tilde{c}_{js} + \tilde{c}^\dagger_{js} \tilde{c}_{is} \right) + J \sum_{\langle ij\rangle} \left[S_i \cdot S_j - \frac{n_i n_j}{4} \right] \tag{A.10}$$

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

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

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

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

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

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

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

$$|\tilde{\alpha_3}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\alpha_3\rangle + |\alpha_4\rangle\right), \quad |\tilde{\alpha_4}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|\alpha_3\rangle - |\alpha_4\rangle\right). \tag{A.14}$$

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

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

Takoj vidimo, da je $H_{\mathrm{kin}}|\beta\rangle = H_{\mathrm{kin}}|\beta'\rangle = -t\left(|\alpha_3\rangle + |\alpha_4\rangle\right) = -t\sqrt{2}|\tilde{\alpha}_3\rangle$. 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

$$\Xi_{i,j} = \frac{1}{2} \sum_s \left(h_{i,s} - h_{j,s}\right).$$

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, $J \to J_{i,j}$, kjer je

$$J_{i,j} = 2t^2 \left(\frac{1}{U - \Xi_{i,j}} + \frac{1}{U + \Xi_{i,j}}\right). \tag{A.15}$$

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

$$\tilde{H} = -t \sum_{\langle ij\rangle s} \left(\tilde{c}_{i,s}^\dagger \tilde{c}_{js} + \tilde{c}_{js}^\dagger \tilde{c}_{is}\right) + \sum_{\langle ij\rangle} J_{i,j} \left[S_i \cdot S_j - \frac{n_i n_j}{4}\right] + \sum_{i,s} h_{i,s} \left(1 - n_{i,-s}\right) n_{i,s}. \tag{A.16}$$