

9 Scientific Essay: Thermalization and Localization

Lorem ipsum dolor sit amet, consectetur adipisicing elit, sed do eiusmod tempor incididunt ut labore et dolore magna aliqua. Ut enim ad minim veniam, quis nostrud exercitation ullamco laboris nisi ut aliquip ex ea commodo consequat. Duis aute irure dolor in reprehenderit in voluptate velit esse cillum dolore eu fugiat nulla pariatur. Excepteur sint occaecat cupidatat non proident, sunt in culpa qui officia deserunt mollit anim id est laborum. EP-LP
Графики без ссылок получены мной

9.1 Intro

Model. We will study the effects of thermalization and localization using the Hubbard model

$$\hat{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} (\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j + \text{h.c.}) + V \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{n}_i \hat{n}_j + \Delta \sum_j \delta_j \hat{n}_j, \quad (1)$$

with V – nearest neighbor interaction, Δ – noise level, $\delta_j \in [-1, 1]$ evenly distributed (fig. 4c). To obtain numerical results, the hard-bosons limit is used (unless explicitly stated otherwise)¹. This system is convenient in that we can look at various experimental implementations and all phases (EP and LP) of interest to us are implemented in it.

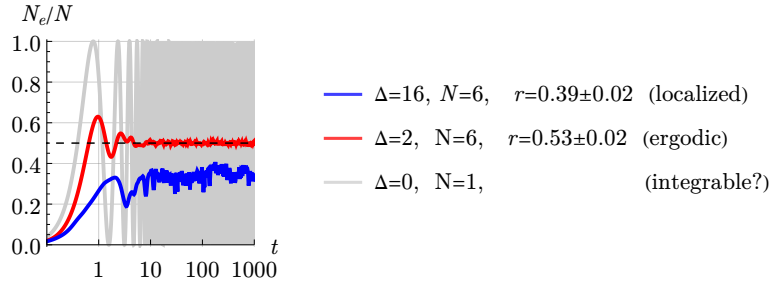


Figure 1: An example of different behavior scenarios for some observable .

Thermalization. Let's start by building some intuition about what could be called thermalization for an isolated quantum system [1]. Let the initial state be given by $|\psi_0\rangle$, then, in the basis of energy eigenstates $|j\rangle$, the evolution

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{j=1}^{\mathcal{N}} c_j e^{-i\varepsilon_j t} |E_j\rangle$$

with $c_j = \langle E_j | \psi_0 \rangle$, $\varepsilon_j = \langle j | \hat{H} | j \rangle$ and $\mathcal{N} = \dim H$. For some observable $\hat{A}(t)$ the mean value could be expressed as

$$A(t) = \langle \psi(t) | \hat{A} | \psi(t) \rangle = \sum_{j,k} \bar{c}_k c_j e^{-i(\varepsilon_j - \varepsilon_k)t} \langle k | \hat{A} | j \rangle = \sum_j |c_j|^2 \langle j | \hat{A} | j \rangle + \sum_{k \neq j} c_j \bar{c}_k e^{-i(\varepsilon_j - \varepsilon_k)t} \langle k | \hat{A} | j \rangle. \quad (2)$$

After some time of thermalization t_{th} we would like to see that the observables reach thermal values (independent of the initial conditions) with small fluctuations around (fig. 1, red curve)

$$A(t \gg t_{th}) = A(E) + \text{small fluctuations}, \quad E = \langle \psi_0 | \hat{H} | \psi_0 \rangle.$$

To achieve small fluctuations around the average value, as we see from (2), it is enough to require the smallness of the off-diagonal elements². And so that $A(E)$ does not depend on the initial conditions, we can consider the case when diagonal elements are smooth functions of energy

$$\langle j | \hat{A} | j \rangle = A(\varepsilon_j).$$

Indeed, then for the initial state lying in ΔE such that the spread $\partial_E A(E) \Delta E$ is small, the final result is

$$A(t \gg t_{th}) \approx \sum_j |c_j|^2 \langle j | \hat{A} | j \rangle \approx A(E).$$

This is how we come to the formulation of the Eigenstate Thermalization Hypothesis (ETH), put forward by Deutsch [2] and Srednicki [3]: if off-diagonal terms $\langle k | \hat{A} | j \rangle$ are small in compared to diagonal and diagonal terms are smooth functions of energy, then the observed one seems to be thermalized. It is worth making some reservation that for an isolated system a pure state remains pure $\text{tr} \rho^2 = 1$, while for a thermal state $\text{tr} \rho^2 < 1$, which is why we talk about

¹The term $+\frac{1}{2}U \sum_j \hat{n}_j(\hat{n}_j - 1)$ was added to the Hamiltonian with $U \rightarrow \infty$.

²Note that the number of diagonal terms is \mathcal{N} and off-diagonal $\mathcal{N}^2 - \mathcal{N}$. If we consider the contribution of each off-diagonal term to be random, then the fluctuations can be estimated as $\sqrt{\mathcal{N}^2} |\langle k | \hat{A} | j \rangle|$, which leads to the requirement of smallness.

the thermalization of observables³. Again, judging by the conditions, it seems that systems and observables A_1, A_2 are possible such that A_1 is thermalized, but A_2 is not.

The main conclusion of this section: sometimes it happens that in some system and for some observable \hat{A} its value $A(t \gg t_{\text{th}})$ reaches a constant with small fluctuations around, most likely this will correspond to the indicated ETH terms.

Локализация. The fundamental opposite of thermalization is localization. It happens that the system retains information about the initial conditions even with $t \rightarrow \infty$ (fig. 1, blue curve) and $A = A(\psi_0)$. For example, we can divide the system into two equal subsystems Ω_1, Ω_2 , populate only Ω_1 and monitor the contrast

$$\mathcal{I} = \frac{N_{\Omega_1} - N_{\Omega_2}}{N_{\Omega_1} + N_{\Omega_2}}.$$

So in [4] in 1D the even lattice nodes (fig. 2) were chosen as Ω_1 , and in [5] in 2D the left side of the system was taken as Ω_1 (fig.3). Just for $\mathcal{I}(t)$ the declared thermal behavior is already visible when $\mathcal{I}(t \gg t_{\text{th}}) \approx 0$, but at some point there is a transition to localization and $\mathcal{I}(t \gg t_{\text{th}}) \approx \text{const} > 0$. This behavior is typical when frozen noise $\Delta > 0$ is added to the system; this effect was first described by Anderson [6] for non-interacting particles (AL - Anderson Localization). In the case of interaction (MBL - Many Body Localization), the theoretical description, as far as I know, remains an open task and therefore is of great interest for experiment.

For a single-particle problem, it would be logical to assume that this behavior arises due to the localization of eigenfunctions. Indeed, in fig. 2 the eigenstates of the single-particle 1D Hamiltonian (1) are presented at different noise levels Δ .

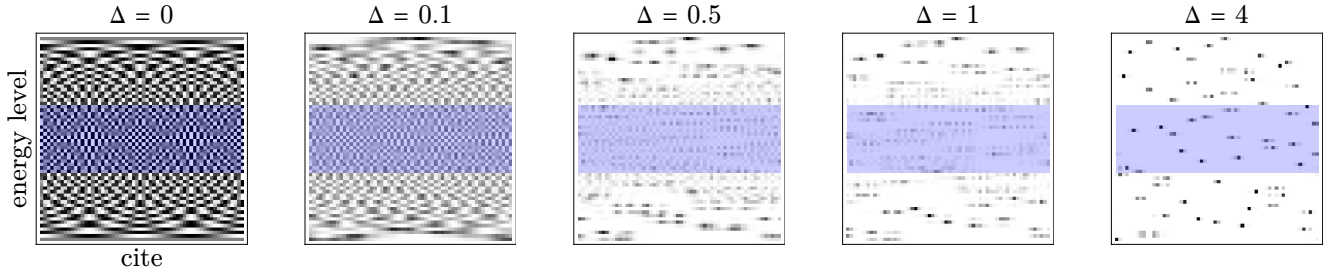


Figure 2: Eigenvectors for $L = 60$ and $N = 1$

9.2 MBL experiment in 2D

Рассмотрим экспериментальную реализацию системы (1) в [5]. Для этого, совместив лазерные лучи, получим некоторую интерференционную картину, пучности которой при красной отстройке будут выступать минимумами потенциала для атомов в силу их поляризуемости (альтернативой может выступат решётка optical tweezers). Между этими минимумами потенциала атомы будут туннелировать с характерной энергией J , которую и будем использовать в качестве масштаба по энергиям. Подстроить взаимодействие U между атомами можем с помощью резонансов Фейшбаха, выкрутив которое до значения $U = 24J$ получим систему близкую к hard-bosons. Поверх решётки наложим глобальный гармонический потенциал, также фокусировкой лазера. Заполним ловушку достаточно холодными атомами, с помощью микроволнового ножа оставим заполненной только левую половину и немного подождём (fig. 3). Шумы Δ в систему добавляются с помощью DMD (альтернативно используются SLM, AOD или квазслучайный потенциал как в [4], подробнее в [7]), результат усредняют по 50 реализациям δ_j .

Видно, что в отсутствии шумов система выходит на термальное состояние – термализация ($\mathcal{I} \rightarrow 0$). При достаточно сильных шумах наступает локализация: $\mathcal{I}(t \rightarrow \infty) = \mathcal{I}_\infty > 0$. Считая выход на \mathcal{I}_∞ экспоненциальным можем заметить, как растёт необходимое для выхода на стационарное состояние по мере увеличения уровня шума.

Видно, что $\mathcal{I}_\infty > 0$ появляется с $\Delta_c \approx 5.5(4)J$. В статье подчеркивают, что Δ_c будет увеличиваться по мере decreasing initial filling. The clear difference in critical disorder strengths highlights the strong influence of interactions on the localization.

³The hope arises that if we divide the system into two subsystems $\Omega_1 \cup \Omega_2$, then $\rho_1 = \text{tr}_{\Omega_2} \rho$ can actually turn out to be thermal, and Ω_2 acts in some sense thermostat for Ω_1 . This assumption will not be developed within the framework of this essay, but the I hope to return to this issue later.

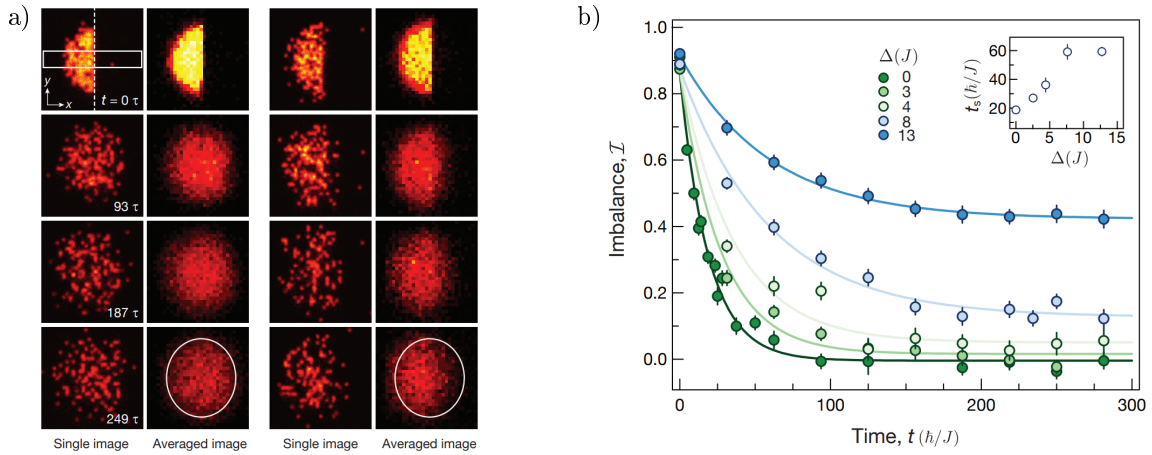


Figure 3: a) Raw fluorescence images (red to yellow corresponds to increasing detected light level) showing the evolution of the initial density step without disorder [5]. b) Relaxation dynamics of a density domain wall [5].

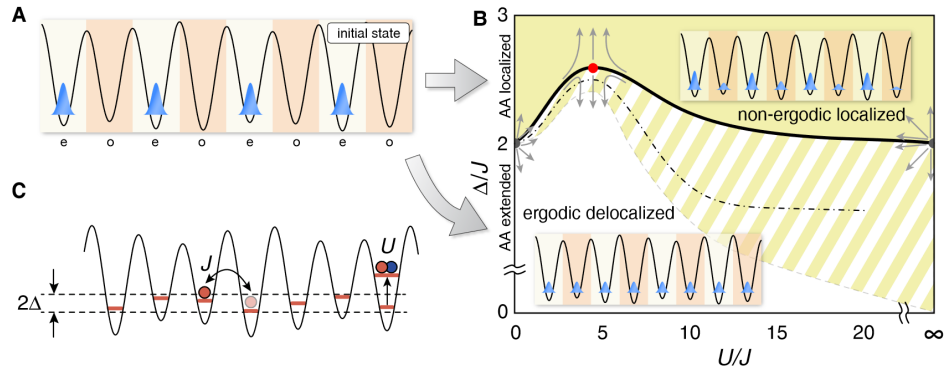


Figure 4: [4] a) Initial state of the system consisting of a charge density wave, where all atoms occupy even sites only. For an interacting many-body system, the evolution of this state over time depends on whether the system is ergodic or not. b) Schematic phase diagram for the system: in the ergodic, delocalized phase (white) the initial state quickly decays, while it persists for long times in the non-ergodic, localized phase (yellow). c) Schematic showing a visual representation of the three terms in the Hamiltonian.

9.3 MBL experiment in 1D

Для демонстрации перехода EP-LP можем рассмотреть также эксперимент по реализации одномерной системы [4]. Теперь рассматривается движение в quasi-random optical lattice созданной двумя решетками с несоизмерным шагом, но в целом всё также описывающейся гамильтонианом (1).

Теперь в качестве Ω_1 выбраны нечётные узлы и также исследуется на сколько быстро исчезнет и до какой степени контрастность \mathcal{I} заселенности чётных и нечётных узлов (fig. 5). Видно, что за $t \approx 15\tau$ наблюдаемая \mathcal{I} также выходит на стационарное значение (fig. 5a), где по результатам усреднения в желтой области строится зависимость $\mathcal{I}(\Delta)$ (fig. 5b).

9.4 Model 2D

Мне было интересно посмотреть на поведение 2D системы для невзаимодействующего случая, в качестве начального состояния выбирался гауссов пакет, полностью лежащий в левой части системы, и также следил за контрастностью $I(t)$. Наличие глобального гармонического потенциала описывалось слагаемым, вида $\sum_j u_j \hat{n}_j$. Эволюция считалась через ED (Exact Diagonalization) и разложением начального состояния по собственным (fig. 6a). Аналогично при небольшом уровне шума система термализовалась, а при больших значениях выходила на локализованное состояние.

При термализующемся состоянии результат статзначим не зависит от начального состояния (результаты здесь не представлены). Интересно посмотреть на получающееся распределение заселенности узла $\langle n_j \rangle_t$, усредненное во времени, от энергии этого узла $\delta_j + u_j$ (fig. 6c). Также интересно сравнить $\langle n_j \rangle_t$ с получающимся термальным

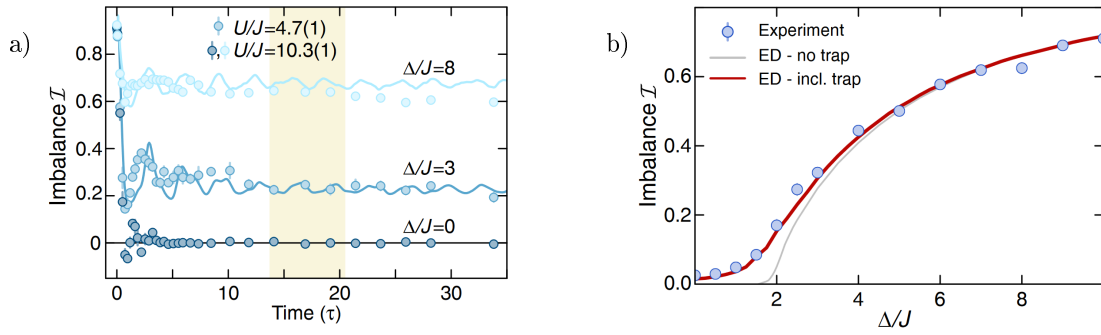


Figure 5: [4] a) Time evolution of an initial charge-density wave . b) Stationary values of the imbalance I as a function of disorder Δ for non-interacting atoms .

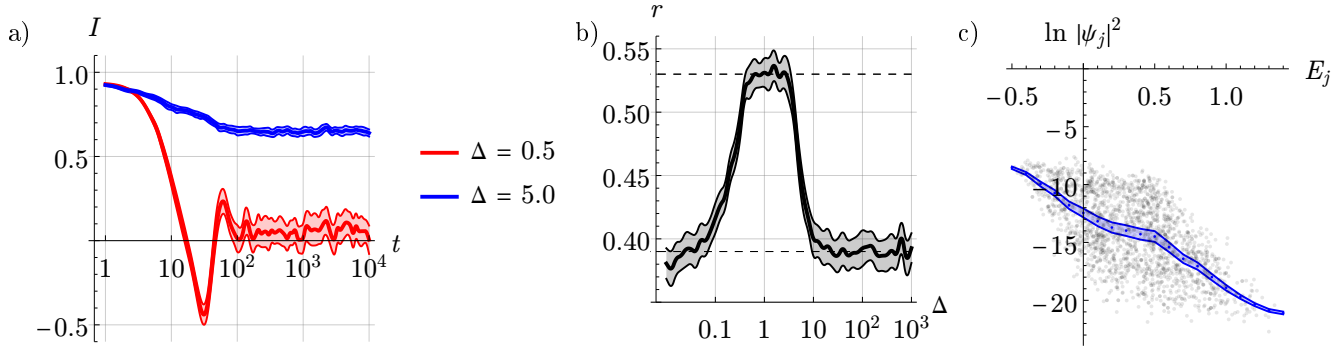


Figure 6: a) Эволюция контрастности $I(t)$, усреднённая по 50 реализациям δ_j для двух уровней шума Δ : термализация и локализация. b) Зависимость r -parameter от уровня шума Δ , усредненная по 50 реализациям δ_j . c) Для термализованного состояния зависимость заселенности узла $|\psi_j|^2$ от энергии узла $E_j = \delta_j + u_j$, чёрными точками обозначена зависимость для конкретной реализации δ_j , синим обозначен результат усреднения по 50 реализациям .

распределением $\text{tr } n_j e^{-\beta H}$, коэффициент корреляции которых у меня получился

$$\text{corr}(\langle n_j \rangle_t, \text{tr } n_j e^{-\beta H})|_{\Delta=0.5} \approx 0.8, \quad \text{corr}(\langle n_j \rangle_t, \text{tr } n_j e^{-\beta H})|_{\Delta=5} \approx 0.2,$$

что вполне соотносится с представлениями о локализации и термализации.

Возникает естественный вопрос, каким именно образом можно охарактеризовать фазу локализации и ergodic phase (термализующуюся) системы, какому алгоритму можно скормить гамильтониан. Различные метрики представлены в [8], но лучше всего начать r -параметра, которому и посвящен следующий раздел.

9.5 Random Matrices

Давайте рассмотрим следующую процедуру: для некоторой матрицы M найдём все собственные числа λ_j , упорядоченные по возрастанию, и определим r -параметр [9]

$$r \stackrel{\text{def}}{=} \left\langle \frac{\min(\delta_j, \delta_{j+1})}{\max(\delta_j, \delta_{j+1})} \right\rangle_j, \quad \delta_j = \lambda_{j+1} - \lambda_j.$$

Сразу можем отметить несколько таких свойств, что он не чувствителен к преобразованиям вида $M \rightarrow \alpha_1 M + \alpha_2 \mathbb{1}$, более того как позже заметим он много к чему не чувствителен.

Теперь посмотрим подробнее на систему (1) и фазовый переход, который случается при повышении Δ . В координатном представлении шумы являются просто случайной диагональной добавкой к гамильтониану⁴. Таким образом при $\Delta \gg J$ (по крайней мере в одночастичном случае) гамильтониан практически диагонализуется (fig. 2). С другой стороны есть недиагональная часть, за которую отвечает J . В статье [9] предлагается моделировать этот фазовый переход с помощью двух случайных матриц: случайной эрмитовой M_1 (GOE) и случайной диагональной M_2 , таким образом $M = (1 - k)M_1 + kM_2$. The limiting values $k = 0$ and $k = 1$

⁴Тут нужно быть аккуратным, потому что как мы увидим позднее, небольшим изменением диагонали через $V \neq 0$ приводят к принципиально другому поведению системы [10].

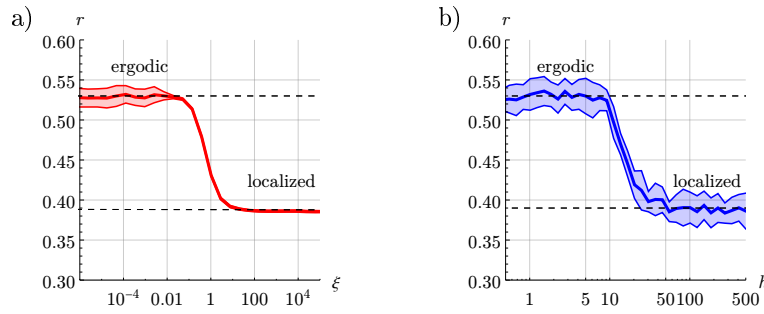


Figure 7: a) Phase transition EP-LP with random matrix. b) Phase transition EP-LP with 1D hard-bosons (1), $h \equiv \Delta$

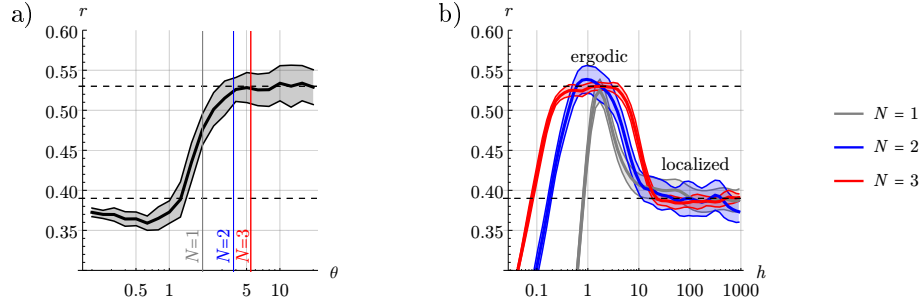


Figure 8: a) The influence of matrix rarefaction θ on phase formation. b) Phase transition with 1D hard-bosons

characterize chaotic and nonchaotic regimes (термализующийся и локализующийся). Чтобы переход не зависел от параметров $M_{1,2}$ можем scale k as

$$\xi = \frac{1}{D} \frac{k\sigma_2}{(1-k)\sigma_1},$$

where $\sigma_{1,2}$ are the standard deviation of elements in $M_{1,2}$ respectively and D is the size of the matrix.

Найдём, как зависит $r(\xi)$ для матриц при $D = 200$, $\sigma_1 = \sigma_2 = 1$ (для других значений зависимость такая же), усредняя результат по 100 реализациям (fig. 7a). Для сравнения приведена зависимость $r(\xi)$ для 1D системы (1) hard-bosons по уровню шума h (то же самое, что и Δ) на решётке в $L = 14$ узлов с половинным заполнением⁵ (7 частицами). В соответствии с [9, 8] значение $r \approx 0.53$ является маркером эргодической фазы (характерное значение для GOE), а $r \approx 0.39$ является маркером локализованной фазы (так называемая Poisson statistics):

$$r \approx 0.53 - \text{ergodic}$$

$$r \approx 0.39 - \text{localized}$$

Замечу, что используется именно слово маркер, так как эти условия не являются необходимыми и не являются достаточными.

Аналогичная зависимость получится, если в качестве M_1 будем рассматривать матрицу связности случайного графа (эрмитова матрица со случайными элементами 0,1). Считая, что в среднем на строчку приходится θ ненулевых элементов, можем задаться вопросом о влиянии θ на формировании эргодической фазы (fig. 8a). При слишком маленьких θ высока вероятность Hilbert Space Fragmentation [11], что очевидно не может давать термализацию системы. Тем более система не термализуется, когда является интегрируемой [12].

Такое внимание к θ и фрагментации уделил, так как это в каком-то смысле помогает понять, почему для небольшого числа частиц в системе эргодическая фаза (судя по r) практически не наступает (fig. 8). Действительно, при меньшем числе частиц ($N = 1, 2, 3$) и том же размере решётки $L = 14$ гамильтониан более разреженный (fig. 8a), происходит Hilbert Space Fragmentation (то есть гамильтониан можно представить в блочно диагональном виде) и, соответственно, не происходит термализации.

Основной вывод этого раздела: r -параметр носит достаточно универсальный характер, может использоваться как маркер эргодичной фазы и локализованной фазы. Фазовый переход EP-LP может моделироваться случайными матрицами (GOE, random diagonal, random graph adjacency matrix).

9.6 Entropy growth

⁵Если бы мы говорили про Heisenberg model, то это соответствовало полному спину равному нулю.

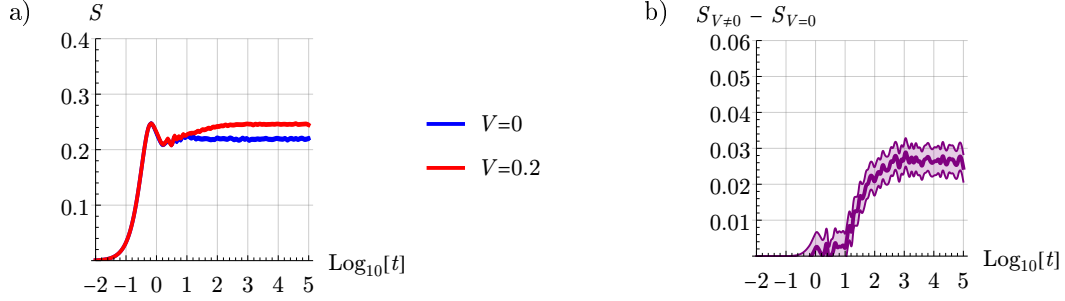


Figure 9: a) Entanglement growth. b) The same data but with subtracted values.

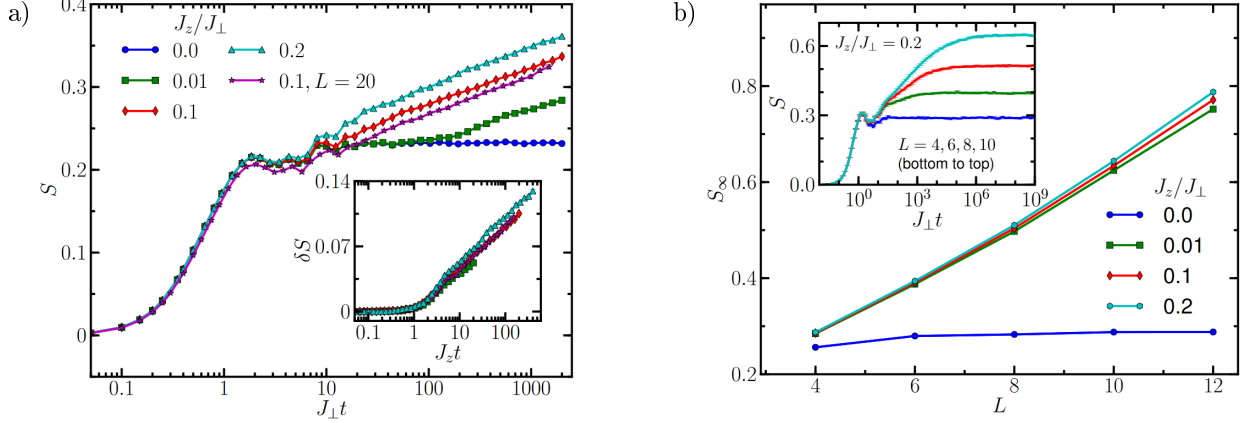


Figure 10: a) Entanglement growth [10]. b) Saturation values of the entanglement entropy as a function of L [10].

References

- [1] Sergei Khlebnikov and Martin Kruczenski. Thermalization of isolated quantum systems, March 2014.
- [2] J. M. Deutsch. Quantum statistical mechanics in a closed system. *Phys. Rev. A*, 43:2046–2049, Feb 1991.
- [3] Mark Srednicki. Chaos and quantum thermalization. *Phys. Rev. E*, 50:888–901, Aug 1994.
- [4] Michael Schreiber, Sean S. Hodgman, Pranjal Bordia, Henrik P. Lüschen, Mark H. Fischer, Ronen Vosk, Ehud Altman, Ulrich Schneider, and Immanuel Bloch. Observation of many-body localization of interacting fermions in a quasi-random optical lattice. *Science*, 349(6250):842–845, August 2015.
- [5] Jae-yoon Choi, Sebastian Hild, Johannes Zeiher, Peter Schauß, Antonio Rubio-Abadal, Tarik Yefsah, Vedika Khemani, David A. Huse, Immanuel Bloch, and Christian Gross. Exploring the many-body localization transition in two dimensions. *Science*, 352(6293):1547–1552, June 2016.
- [6] P. W. Anderson. Absence of diffusion in certain random lattices. *Phys. Rev.*, 109:1492–1505, Mar 1958.
- [7] Dmitry A. Abanin, Ehud Altman, Immanuel Bloch, and Maksym Serbyn. Many-body localization, thermalization, and entanglement. *Reviews of Modern Physics*, 91(2):021001, May 2019.
- [8] Arijeet Pal and David A. Huse. The many-body localization phase transition. *Physical Review B*, 82(17):174411, November 2010.
- [9] Xingbo Wei, Rubem Mondaini, and Gao Xianlong. Characterization of many-body mobility edges with random matrices, January 2020.
- [10] Jens H. Bardarson, Frank Pollmann, and Joel E. Moore. Unbounded growth of entanglement in models of many-body localization. *Physical Review Letters*, 109(1):017202, July 2012.
- [11] Sanjay Moudgalya, B Andrei Bernevig, and Nicolas Regnault. Quantum many-body scars and hilbert space fragmentation: a review of exact results. *Reports on Progress in Physics*, 85(8):086501, July 2022.

- [12] Marcos Rigol, Vanja Dunjko, and Maxim Olshanii. Thermalization and its mechanism for generic isolated quantum systems. *Nature*, 452(7189):854–858, April 2008.