

# Lokalizace a termalizace kvantových stavů ve spinových systémech

Jakub Koňárek

29. srpna 2024

## 1 Heisenbergovy spinové modely

Heisenbergovy 1/2-spinové modely jsou jednoduché mnohočásticové kvantověmechanické modely používané zejména k popisu chování magnetických systémů [1], ačkoliv je dnes lze realizovat pomocí kvantových simulátorů, například s použitím ochlazených atomů na optické mříži [2, 3]. Model úspěšně teoreticky popisuje například kritické jevy, jako jsou termální či kvantové fázové přechody [4], nerovnovážnou dynamiku [5], kvantový chaos [6, 7, 8], nebo dynamickou lokalizaci [9, 10].

Každý ze spinů je umístěn ve svém uzlu<sup>1</sup> a je popsán svým dvojrozměrným Hilbertovým prostorem  $\mathcal{H}^{(j)}$  generovaným dvojicí ortonormálních vektorů  $|\uparrow\rangle$  a  $|\downarrow\rangle$ . Celkový systém s  $N$  uzly je tak prvkem direktního součinu prostorů

$$\mathcal{H} = \bigotimes_{j=1}^N \mathcal{H}^{(j)} . \quad (1)$$

Sílu interakce mezi jednotlivými spiny můžeme prostřednictvím hamiltoniánu vyjádřit pomocí symetrických *matic konektivity*  $J_x^{(ij)}$ ,  $J_y^{(ij)}$ ,  $J_z^{(ij)}$  jako

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \left( J_x^{(ij)} \hat{\sigma}_x^{(i)} \hat{\sigma}_x^{(j)} + J_y^{(ij)} \hat{\sigma}_y^{(i)} \hat{\sigma}_y^{(j)} + J_z^{(ij)} \hat{\sigma}_z^{(i)} \hat{\sigma}_z^{(j)} \right) + \sum_{j=1}^N B_z^{(j)} \hat{\sigma}_z^{(j)} , \quad (2)$$

kde  $\hat{\sigma}_x^{(j)}$ ,  $\hat{\sigma}_y^{(j)}$ ,  $\hat{\sigma}_z^{(j)}$  jsou Pauliho operátory na  $j$ -tém uzlu, tedy např.

$$\hat{\sigma}_x^{(j)} = \hat{I}^{\otimes(j-1)} \otimes \hat{\sigma}_x \otimes \hat{I}^{\otimes(N-j)} \quad (3)$$

a  $B_z^{(j)}$  je externí magnetické pole ve směru osy  $z$ . Uzly tak dohromady tvoří mříž, jejíž topologii a dimenzionalitu lze maticemi konektivity modelovat.

Speciálním případem Heisenbergova modelu je *homogenní Heisenbergův XXZ řetízek*, jehož hamiltonián se zjednoduší na

$$\hat{H} = \sum_{j=1}^{N-1} \left( J_{xy} \hat{\sigma}_x^{(j)} \hat{\sigma}_x^{(j+1)} + J_{xy} \hat{\sigma}_y^{(j)} \hat{\sigma}_y^{(j+1)} + J_z \hat{\sigma}_z^{(j)} \hat{\sigma}_z^{(j+1)} \right) + \sum_{j=1}^N B_z^{(j)} \hat{\sigma}_z^{(j)} \quad (4)$$

---

<sup>1</sup>Anglicky site.

s konstantními koeficienty  $J_{xy}$  a  $J_z$ . Ukážeme, že takový model zachovává celkovou magnetizaci  $\hat{M} = \sum_{j=1}^N \hat{\sigma}_z^{(j)}$ , tedy že operátor magnetizace komutuje s hamiltoniánem. Členy se  $\hat{\sigma}_z$  komutují triviálně. Dále máme

$$\begin{aligned} \left[ \sum_{j=1}^{N-1} \hat{\sigma}_x^{(j)} \hat{\sigma}_x^{(j+1)}, \sum_{j=1}^N \hat{\sigma}_z^{(j)} \right] &= -2i \sum_{j=1}^{N-1} \left( \hat{\sigma}_y^{(j)} \hat{\sigma}_x^{(j+1)} + \hat{\sigma}_x^{(j)} \hat{\sigma}_y^{(j+1)} \right) \\ \left[ \sum_{j=1}^{N-1} \hat{\sigma}_y^{(j)} \hat{\sigma}_y^{(j+1)}, \sum_{j=1}^N \hat{\sigma}_z^{(j)} \right] &= 2i \sum_{j=1}^{N-1} \left( \hat{\sigma}_x^{(j)} \hat{\sigma}_y^{(j+1)} + \hat{\sigma}_y^{(j)} \hat{\sigma}_x^{(j+1)} \right), \end{aligned}$$

tyto členy se tak vyruší a dostáváme  $[\hat{H}, \hat{M}] = 0$ .

Důsledkem toho lze celkový Hilbertův prostor zapsat jako direktní součet podprostorů

$$\mathcal{H} = \bigoplus_{L=0}^N \mathcal{H}_L, \quad (5)$$

kde prostor  $\mathcal{H}_L$  odpovídá prostoru generovanému stavy s  $L$  spiny  $|\downarrow\rangle$  a  $N - L$  spiny  $|\uparrow\rangle$  a má dimenzi  $D_L = \binom{N}{L}$ .

Časový vývoj stavu  $|\Psi(t)\rangle \in \mathcal{H}$  je určen evolučním operátorem  $\hat{U}(t)$  v jednotkách s  $\hbar = 1$  jako

$$|\Psi(t)\rangle = \hat{U}(t) |\Psi(0)\rangle = e^{-i\hat{H}t} |\Psi(0)\rangle = \left( \sum_n e^{-iE_n t} |n\rangle \langle n| \right) |\Psi(0)\rangle, \quad (6)$$

kde  $|n\rangle$  jsou stacionární stavy příslušející energii  $E_n$ .

## 2 Analýza časového vývoje

Lokalizaci či termalizaci počátečního stavu lze sledovat hned několika metodami. Můžeme počítat např. *pravděpodobnost přežití*

$$P = |\langle \Psi(t) | \Psi(0) \rangle|^2. \quad (7)$$

Ta je nulová, pokud je stav  $|\Psi(t)\rangle$  kolmý k počátečnímu stavu  $|\Psi(0)\rangle$ , a nabývá hodnoty jedna, pokud se s ním shoduje (až na fázi).

Dále lze zkoumat *entropii provázání* [11]. Ta je definována pro libovolnou bipartitní faktORIZACI

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B \quad (8)$$

a k jejímu výpočtu je třeba zkonstruovat jednu z příslušných *redukovaných matic hustoty*. Matici hustoty čistého stavu  $|\Psi\rangle$  definujeme jako

$$\hat{\rho} = |\Psi\rangle \langle \Psi|, \quad (9)$$

redukovanou matici hustoty pro např. subsystém A potom jako

$$\hat{\rho}_A = \text{Tr}_B(\hat{\rho}). \quad (10)$$

Z ní lze nyní vypočíst příslušnou entropii provázání

$$\begin{aligned} S &= S(\hat{\rho}_A) = -\text{Tr}(\hat{\rho}_A \log \hat{\rho}_A) \\ &= -\sum_i \lambda_i \log \lambda_i, \end{aligned} \quad (11)$$

kde  $\lambda_i$  jsou vlastní čísla operátoru  $\hat{\rho}_A$ . Poznamenejme, že pro faktorizaci tvaru (8) platí  $S(\hat{\rho}_A) = S(\hat{\rho}_B)$ , což plyne např. ze Schmidtova rozkladu stavu  $|\Psi\rangle$ .

Nakonec nás bude zajímat také lokální magnetizace jednotlivých uzlů. Tu definujeme jako střední hodnotu lokálních spinových operátorů ve směru osy  $z$

$$M^{(j)} = \langle \Psi | \hat{\sigma}_z^{(j)} | \Psi \rangle. \quad (12)$$

Vykreslením těchto hodnot pro každý z uzlů v čase dostaneme tzv. *konturový graf*.

### 3 Program k práci s Heisenbergovým XXZ modelem

Za účelem této práce byl vytvořen program k práci s Heisenbergovým XXZ modelem dostupný ve veřejném repozitáři [12]. Stručně zde popíšeme několik jeho základních funkcí, a to zejména

- vytvoření hamiltoniánu na podprostoru  $\mathcal{H}_L$  pro zadané matice konektivity  $J_{xy}$  a  $J_z$ ,
- diagonalizace tohoto hamiltoniánu,
- vytvoření speciálních počátečních stavů (viz níže),
- časový vývoj libovolného stavu z  $\mathcal{H}_L$ ,
- výpočet jeho pravděpodobnosti přežití v čase,
- výpočet entropie provázání v čase,
- tvorba konturového grafu.

Zahrnuté speciální počáteční stavy jsou všechny konstruované na XXZ řetízku s otevřenými okrajovými podmínkami. Možné je vytvořit

- *domain-wall (DW) stav* na prostoru se sudým  $N$  ve tvaru

$$|\Psi\rangle = |\downarrow\rangle^{\otimes N/2} \otimes |\uparrow\rangle^{\otimes N/2} \quad (13)$$

ležící v podprostoru s  $L = N/2$ ,

- *Néelův stav* na prostoru se sudým  $N$  ve tvaru

$$|\Psi\rangle = |\uparrow\rangle \otimes |\downarrow\rangle \otimes \cdots \otimes |\uparrow\rangle \otimes |\downarrow\rangle \quad (14)$$

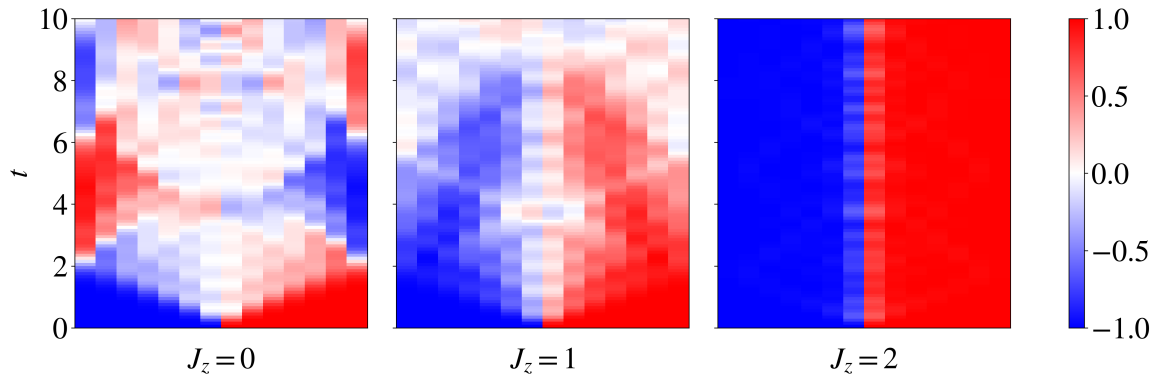
taktéž ležící v podprostoru s  $L = N/2$ ,

- *single-spin (SS) stav* na  $j$ -tém uzlu ve tvaru

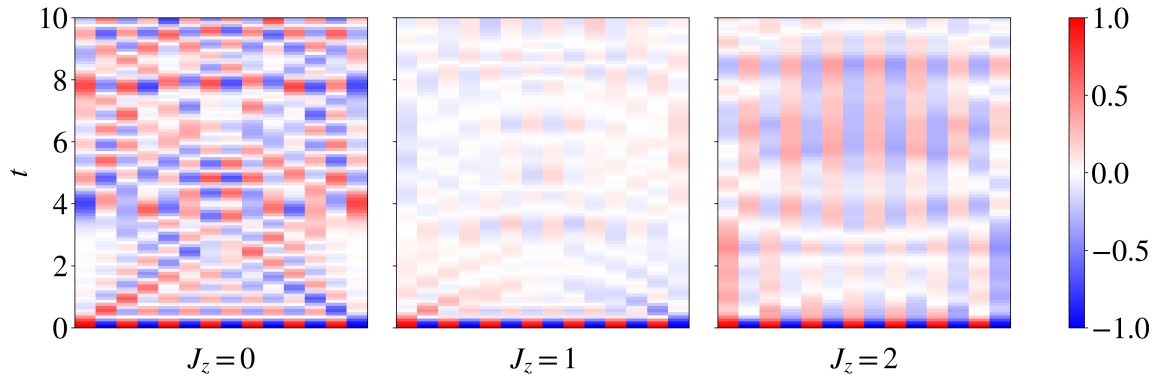
$$|\Psi\rangle = |\uparrow\rangle^{\otimes (j-1)} \otimes |\downarrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle^{\otimes (N-j)} \quad (15)$$

ležící v podprostoru s  $L = 1$ .

Dále program umožňuje zkoumat a vykreslovat závislost střední pravděpodobnosti přežití a entropie provázání na volbě různých parametrů.



(a) DW stav pro  $N = 14$



(b) Néelův stav pro  $N = 14$

Obrázek 1: Konturové grafy pro různé druhy počátečních stavů bez magnetického pole s parametrem  $J_{xy} = 1$ .

## 4 Výsledky simulací

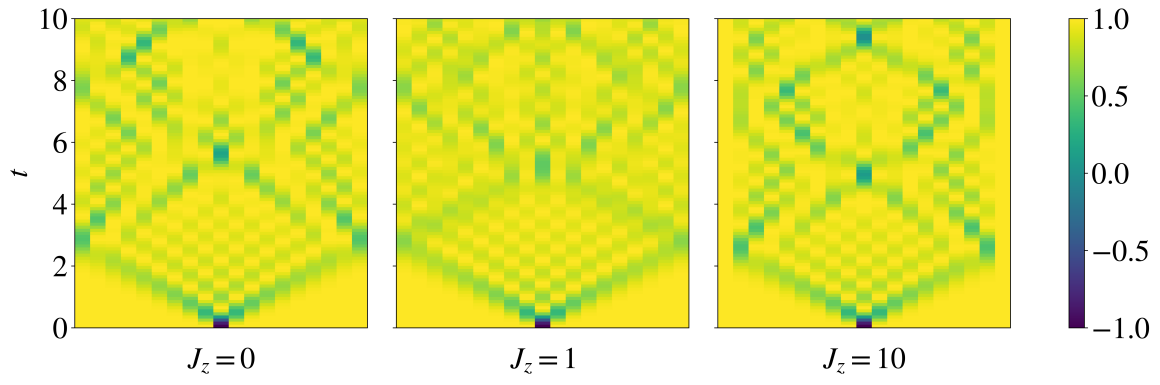
Ve všech simulacích je volen fixní parametr  $J_{xy} = 1$ . Stejně tak je ponechána střední hodnota magnetického pole  $\langle B_z \rangle = 0$ . Hodnoty  $B_z$  jsou voleny z rovnoměrného náhodného rozdělení na intervalu  $(-\Delta B, \Delta B)$ . Zkoumáme pouze parametry  $J_z > 0$ , neboť výsledky jsou pro záporné hodnoty symetrické.

Na obrázcích (1) a (2) jsou zobrazeny konturové grafy DW, Néelova a SS stavu bez přítomnosti magnetického pole. Přitom jsou voleny různé hodnoty parametru  $J_z$ .

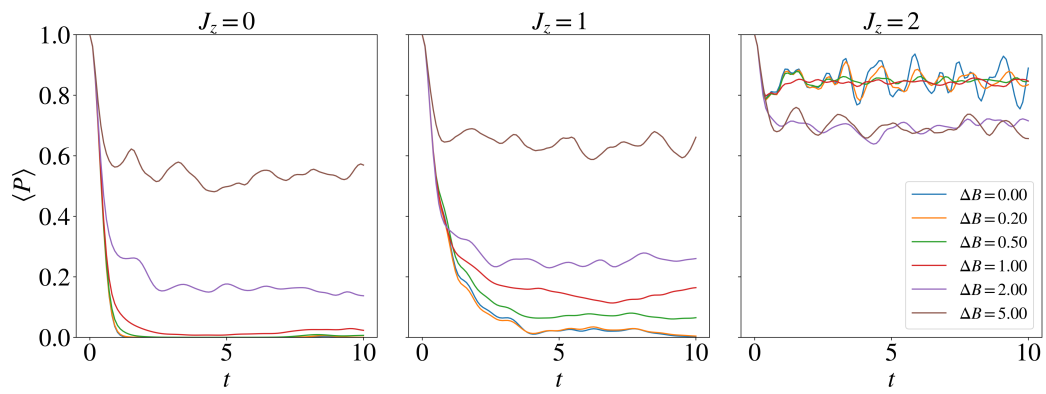
Na obrázcích (3) a (4) jsou vykresleny odpovídající pravděpodobnosti přežití, které zahrnují i simulace s přítomností magnetického pole. Pro každé nastavení parametrů bylo vygenerováno 50 vzorků s různým náhodně zvoleným magnetickým polem, ze kterých se průměruje výsledná střední hodnota.

Na obrázku (5) je vykreslena odpovídající entropie provázání, tentokrát z výpočetních důvodů bez zahrnutí vnějšího magnetického pole. V případě DW stavu je počítána entropie provázání levé a pravé poloviny uzlů, v případě Néelova a SS stavu potom entropie prostředního (nebo nejbližšího možného) z uzlů.

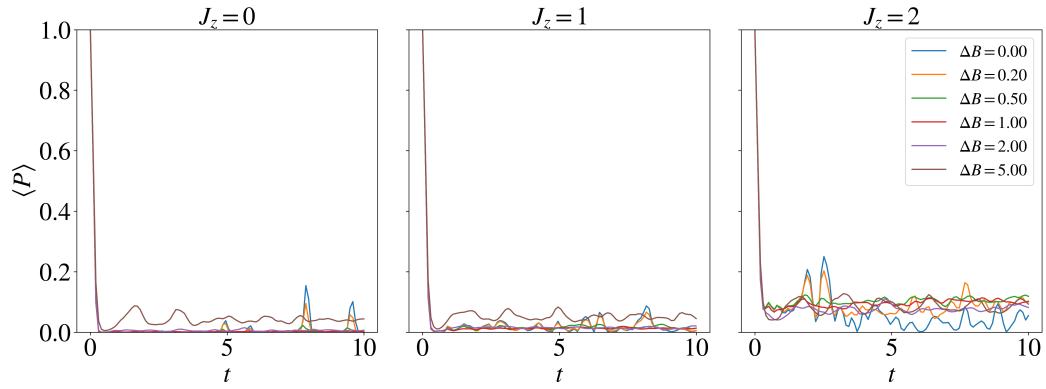
Na obrázcích (6) a (7) je nakonec zobrazena závislost střední hodnoty pravděpodobnosti přežití a entropie provázání (bez vnějšího magnetického pole) na parametru  $J_z$ .



Obrázek 2: Konturové grafy SS stavu bez magnetického pole pro  $N=19$  s parametrem  $J_{xy} = 1$ .

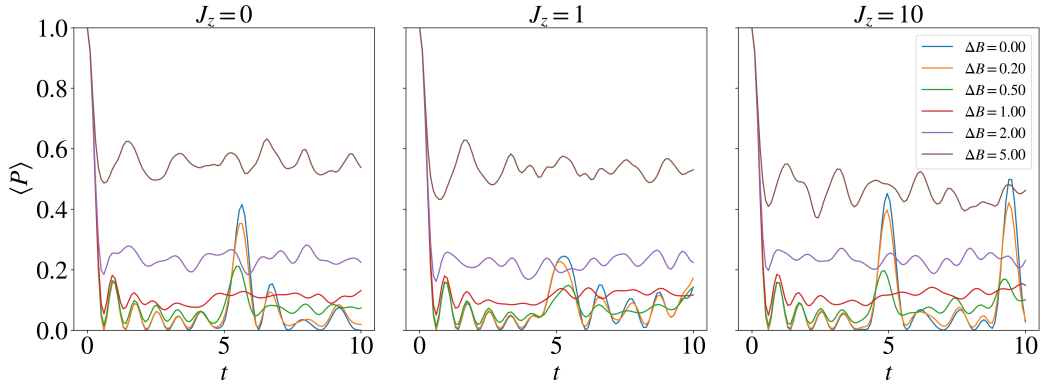


(a) DW stav pro  $N = 14$



(b) Néelův stav pro  $N = 14$

Obrázek 3: Pravděpodobnost přežití pro různé druhy počátečních stavů s magnetickým polem zprůměrovaná z 50 vzorků s parametrem  $J_{xy} = 1$ .



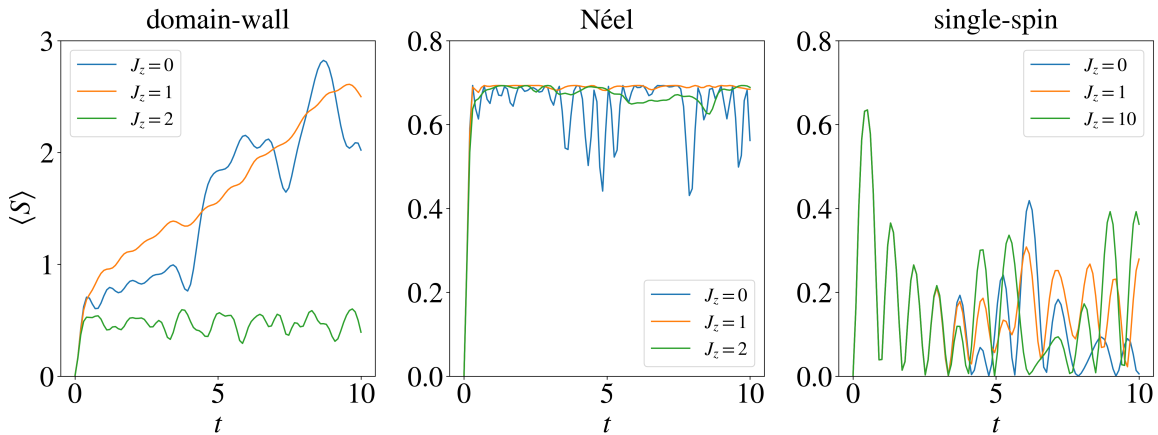
Obrázek 4: Pravděpodobnost přežití pro SS stav s magnetickým polem pro  $N = 19$  zprůměrovaná z 50 vzorků s parametrem  $J_{xy} = 1$ .

## 5 Diskuse výsledků

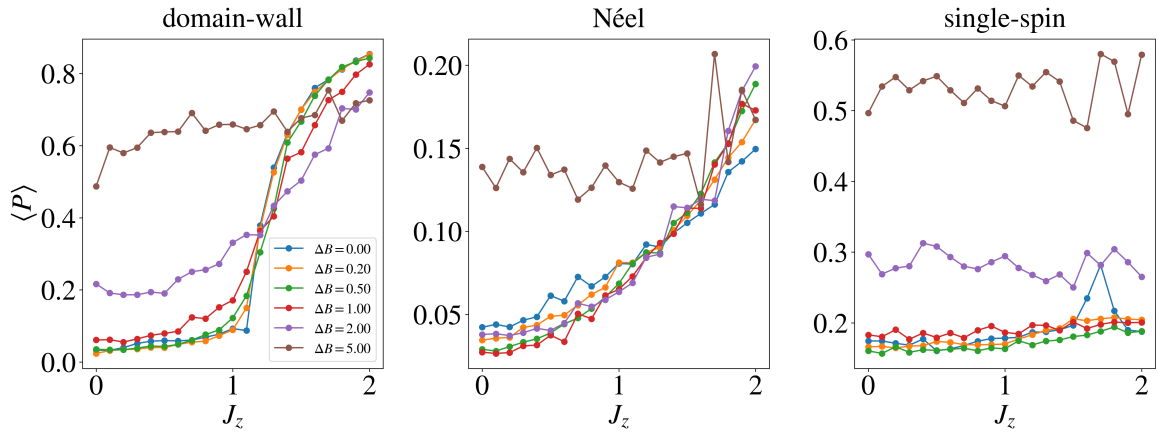
Na výsledcích simulací lze sledovat, zda systém v průběhu času termalizuje, či zda zůstává lokalizovaný. Termalizaci systému indikuje nízká pravděpodobnost přežití, oscilující kolem ustálené hodnoty, a vysoká entropie provázání. Naopak lokalizované zůstávají ty stavy, jejichž pravděpodobnost přežití je vysoká a entropie provázání nízká.

Z grafů je patrné, že chování DW stavu výrazně závisí na velikosti parametru  $J_z$ . Při dostatečně nízkých hodnotách se DW stav v krátkém čase *zcela rozpadá*. Konturový graf je znatelně promíchaný, pravděpodobnost přežití rapidně klesá a poté zůstává nízká, zatímco entropie provázání naopak pozvolna roste během celé doby simulace. V tomto režimu vykazuje DW stav známky úplné termalizace.

Pro vysoká  $J_z$  naopak systém zůstává lokalizován v počátečním stavu a pouze kolem něj mírně osciluje. Pravděpodobnost přežití jen lehce poklesne a drží se na konstantní hodnotě blízké jedné, stejně tak entropie provázání pouze mírně vzroste a drží se na konstantní hodnotě blízké nule.



Obrázek 5: Entropie provázání pro různé druhy počátečních stavů bez magnetického pole. Počet uzlů  $N$  byl volen 14 pro DW a Néelův stav a 19 pro SS stav. Parametr  $J_{xy} = 1$ .



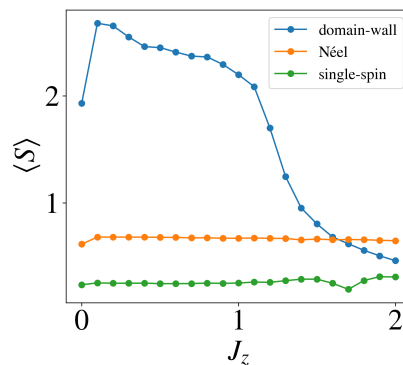
Obrázek 6: Střední hodnota pravděpodobnosti přežití s magnetickým polem zprůměrovaná z 50 vzorků s  $t_{\max} = 200$ . Počet uzlů  $N$  byl volen 10 pro DW a Néelův stav a 11 pro SS stav. Parametr  $J_{xy} = 1$ .

Na obrázku (6) a (7) pozorujeme, že ke změně chování dochází v okolí hodnoty  $J_z = 1$ , kde ostře nárůstá střední pravděpodobnost přežití a ostře klesá entropie provázání vzhledem k  $J_z$ . Tento bod by měl v limitě  $N \rightarrow \infty$  odpovídat *fázovému přechodu* [4].

Povšimnout si můžeme také prudkého nárůstu entropie provázání DW stavu v okolí bodu  $J_z = 0$ . Ta je zřejmě způsobena výraznou symetrií tohoto stavu bez přítomnosti magnetického pole.

Néelův stav se oproti DW stavu rozpadá rychleji, zároveň ale vykazuje četnější a větší revivality, indikované náhlými nárůsty pravděpodobnosti přežití a poklesy entropie provázání. Se zvyšujícím se parametrem  $J_z$  lze sledovat stejný trend jako u DW stavu, s tím rozdílem, že kritické chování u hodnoty  $J_z$  není v tomto případě pozorováno. Pravděpodobnost přežití se zvyšujícím se  $J_z$  pozvolna roste a entropie provázání, narozdíl od DW stavu, zůstává přibližně konstantní.

SS stav se od ostatních dvou stavů liší zejména velikostí svého prostoru  $\mathcal{H}_L$ , který oproti nim roste lineárně s  $N$ . Dimenze tohoto podprostoru je tedy pro podobný počet uzlů výrazně menší. Tomu odpovídá i jeho chování, které obecně vykazuje vyšší míru symetrie. Časový vývoj se pro různá  $J_z$  příliš neliší. Přesto je jeho rozpad v pravděpodobnosti přežití i entropii provázání patrný, obě veličiny však mnohem více oscilují. Střední hodnota pravděpodobnosti přežití se



Obrázek 7: Entropie provázání bez magnetického pole pro  $t_{\max} = 200$ . Počet uzlů  $N$  byl volen 10 pro DW a Néelův stav a 11 pro SS stav. Parametr  $J_{xy} = 1$ .

zvyšujícím se  $J_z$  mírně roste. Entropie provázání pak zůstává přibližně konstantní.

Na obrázcích (6) a (7) si můžeme povšimnout lokálních extrémů těchto dvou veličin v okolí bodu  $J_z = 1,7$ . Jejich fyzikální význam byl však vyloučen provedením simulací s různým počtem časových kroků, kde k výchylce nedocházelo. Jedná se tak pouze o numerickou chybu.

Zdá se, že vnější magnetické pole funguje pro malá  $\Delta B$  jako tlumení oscilací pravděpodobnosti přežití. Volba vysokého  $\Delta B$  však již začíná systém stabilizovat blízko  $P = 1$ , přičemž pro velmi vysoká  $\Delta B$  zůstává systém zcela lokalizovaný ve svém počátečním stavu. K této změně chování dochází mezi hodnotami  $\Delta B = 2$  a  $\Delta B = 5$ , v souladu s hodnotou popsanou v [10].

## Závěr

V rámci této práce jsem se seznámil s Heisenbergovými spinovými modely a metodami analýzy jejich termalizace a lokalizace, zejména prostřednictvím

- pravděpodobnosti přežití,
- entropie provázání
- a lokální magnetizace uzlů.

K tomuto účelu jsem napsal kód pro práci s Heisenbergovým XXZ modelem a pomocí něj zkoumal vývoj a charakteristiky

- domain-wall (DW) stavu,
- Néelova stavu
- a single-spin (SS) stavu.

Z těchto simulací jsem dále vyvodil, že

- DW stav přechází se zvyšujícím se parametrem  $J_z$  od úplné termalizace k úplné lokalizaci, přičemž mezní hodnotou tohoto přechodu je  $J_z = 1$ ,
- Néelův stav přechází se zvyšujícím se parametrem  $J_z$  od úplné termalizace k úplné lokalizaci, nevykazuje však kritické chování v okolí  $J_z = 1$ ,
- SS stav se se zvyšujícím se parametrem  $J_z$  příliš nemění a jeho chování je obecně méně chaotické, což je způsobeno malou velikostí jeho Hilbertova prostoru,
- malé hodnoty  $\Delta B$  fungují jako tlumení oscilací pravděpodobnosti přežití, zatímco velké hodnoty systém zcela lokalizují v počátečním stavu.

## Literatura

- [1] MAJLIS, Norberto. *The Quantum Theory of Magnetism*. WORLD SCIENTIFIC, 2007. ISBN 9789812779748. Dostupné z DOI: 10.1142/6094.
- [2] DUAN, L.-M.; DEMLER, E.; LUKIN, M. D. Controlling Spin Exchange Interactions of Ultracold Atoms in Optical Lattices. *Physical Review Letters*. 2003, roč. 91, č. 9. ISSN 1079-7114. Dostupné z DOI: 10.1103/physrevlett.91.090402.



- [3] WEI, David; RUBIO-ABADAL, Antonio; YE, Bingtian; MACHADO, Francisco; KEMP, Jack; SRAKAEW, Kritsana; HOLLERITH, Simon; RUI, Jun; GOPALAKRISHNAN, Sarang; YAO, Norman Y.; BLOCH, Immanuel; ZEIJER, Johannes. Quantum gas microscopy of Kardar-Parisi-Zhang superdiffusion. *Science*. 2022, roč. 376, č. 6594, s. 716–720. ISSN 1095-9203. Dostupné z DOI: 10.1126/science.abk2397.
- [4] PETERS, Thomas. Elements of Phase Transitions and Critical Phenomena, by H. Nishimori and G. Ortiz: Scope: textbook. Level: graduate. *Contemporary Physics*. 2012, roč. 53, č. 1, s. 78–78. ISSN 1366-5812. Dostupné z DOI: 10.1080/00107514.2011.634926.
- [5] TORRES-HERRERA, E. J.; SANTOS, Lea F. Local quenches with global effects in interacting quantum systems. *Physical Review E*. 2014, roč. 89, č. 6. ISSN 1550-2376. Dostupné z DOI: 10.1103/physreve.89.062110.
- [6] AVISHAI, Y.; RICHERT, J.; BERKOVITS, R. Level statistics in a Heisenberg chain with random magnetic field. *Physical Review B*. 2002, roč. 66, č. 5. ISSN 1095-3795. Dostupné z DOI: 10.1103/physrevb.66.052416.
- [7] SANTOS, L. F.; BORGONOV, F.; IZRAILEV, F. M. Onset of chaos and relaxation in isolated systems of interacting spins: Energy shell approach. *Physical Review E*. 2012, roč. 85, č. 3. ISSN 1550-2376. Dostupné z DOI: 10.1103/physreve.85.036209.
- [8] SANTOS, Lea F.; PÉREZ-BERNAL, Francisco; TORRES-HERRERA, E. Jonathan. Speck of chaos. *Physical Review Research*. 2020, roč. 2, č. 4. ISSN 2643-1564. Dostupné z DOI: 10.1103/physrevresearch.2.043034.
- [9] BARDARSON, Jens H.; POLLMANN, Frank; MOORE, Joel E. Unbounded Growth of Entanglement in Models of Many-Body Localization. *Physical Review Letters*. 2012, roč. 109, č. 1. ISSN 1079-7114. Dostupné z DOI: 10.1103/physrevlett.109.017202.
- [10] PAL, Arijeet; HUSE, David A. Many-body localization phase transition. *Physical Review B*. 2010, roč. 82, č. 17. ISSN 1550-235X. Dostupné z DOI: 10.1103/physrevb.82.174411.
- [11] NANDKISHORE, Rahul; HUSE, David A. Many-Body Localization and Thermalization in Quantum Statistical Mechanics. *Annual Review of Condensed Matter Physics*. 2015, roč. 6, č. 1, s. 15–38. ISSN 1947-5462. Dostupné z DOI: 10.1146/annurev-conmatphys-031214-014726.
- [12] <https://github.com/pyhertz99/Heisenberg-XXZ>