

Mnogočestična lokalizacija u bazi mnogočestičnih Andersonovih lokaliziranih stanja

Juraj Krsnik

Fizički odsjek, PMF, Zagreb, Republika Hrvatska

Mentor: dr. sc. Osor Slaven Barišić

Institut za fiziku, Zagreb, Republika Hrvatska

(Datum: 24. siječnja 2018.)

Unutar modela mnogočestične lokalizacije korištena je aproksimacija reducirane baze za izračun korelacijskih funkcija. Razmatran je Hubbardov model s neredom i razlika u nabojnim i spinskim stupnjevima slobode, a unutar jednodimenzionalnog Heisenbergovog modela s neredom, koji se mapira na model fermiona bez spina, izravno je računata krutost nabojnih stupnjeva slobode te njena ovisnost o neredu. Ona poprima konačne vrijednosti za jaki nered unutar neergodične faze, dok nestaje u granici slabog nereda. Aproksimacija reducirane baze pokazuje svoje prednosti pri računanju korelacija za jače nered, omogućavajući proučavanje sustava dimenzija koje nije moguće ispitati standardnim metodama egzaktne dijagonalizacije. Rezultati aproksimacije reducirane baze uspoředeni su s egzaktnim vrijednostima u različitim režimima parametara te su raspravljena pojedina tipična i netipična ponašanja metode u ovisnosti o konfiguracijama nereda.

I. UVOD

Mnogočestična fizika predstavlja jedan od složenijih područja moderne teorijske fizike, no zauzvrat pruža mikroskopski uvid u niz zanimljivih, često neočekivanih, svojstava raznih fizikalnih sustava. Mnogočestična lokalizacija (MBL), kao tema ovoga seminara, upravo je jedan takav problem u kojem nas zanima međugra nereda i interakcije (korelacija) mnoštva kvantnih čestica [1],[2]. Odnosno, ovdje ćemo nastojati bolje razumjeti kako međudjelovanje između fermiona (elektrona) utječe na stabilnost dobro poznate pojave Andersonove lokalizacije [3],[4]. Ujedno, problem mnogočestične lokalizacije dotiče se i fundamentalnog problema statističke fizike, odnosno problema kvantne evolucije izoliranog mnogočestičnog sustava, budući da u lokaliziranoj fazi MBL sustav predstavlja prototip mnogočestičnog sustava s interakcijom koji se ne uspijeva termalizirati suprotno ergotskoj hipotezi [1],[2].

Dosadašnja teorijska razmatranja, posebice numerička koja simuliraju konačne sustave, utvrdila su neke ključne karakteristike mnogočestične lokalizacije [5],[6],[7],[8]. Međutim, pri analizi rezultata ovakvih numeričkih pristupa valja biti na oprezu zbog moguće vrlo spore dinamike MBL sustava, zbog koje je onda potrebno gledati relaksacije sustava na vrlo dugim vremenskim skalama. Duge vremenske skale odmah otvaraju pitanje važnosti učinaka rubnih uvjeta zbog konačnosti sustava. Uzimajući ovo zadnje u obzir, pojavljuje se automatski i problem skaliranja rezultata dobivenih na temelju proučavanja manjih, konačnih sustava, na termodinamičku granicu.

Osnovni numerički problem pri simuliranju mnogočestičnih sustava je što broj mnogočestičnih stanja obično eksponencijalno brzo raste uz stalnu gustoću s linearnom dimenzijom sustava L , odnosno s brojem čestica. Zadaća ovog seminara je na neki način od svih stanja izdvojiti ona relevantna za dinamiku sustava na dugim vremenima, te pomoću tih stanja odrediti svojstva sus-

tava obzirom na svojstvo termalizacije. Time ne bi bili ograničeni na proučavanje razmjerno malih sustava te bi prikladnim odabirom relevantnih stanja mogli proučavati i one sustave koje obično nije moguće simulirati drugim metodama.

Valja napomenuti da su paralelno teorijskom istraživanju mnogočestične lokalizacije zabilježeni i pokušaji eksperimentalne realizacije takvih sustava, ponajviše u području atomske fizike ultrahladnih atoma [9],[10]. Pri tome je uočeno ponašanje koje odgovara predviđanjima dobivenim na temelju teorijskih razmatranja. No slično kao i numeričke simulacije, i pokusi s ultrahladnim atomima imaju ograničenja na veličinu sustava koje je moguće eksperimentalno realizirati, kao i ograničenja na pouzdanost dugovremenskih ponašanja.

U nastavku ćemo prvo ukratko opisati Andersonovu lokalizaciju te iznijeti glavne rezultate i predviđanja mnogočestične lokalizacije. Zatim ćemo objasniti način na koji je moguće efikasno odabrati relevantna stanja za proučavanje dinamike sustava kada se približi MBL fazi. Konačno, promatrati ćemo korelacijsku funkciju gustoće te na temelju dobivenih numeričkih rezultata unutar Heisenbergovog jednodimenzionalnog modela s neredom iznijeti neke zaključke o svojstvima ergotske i lokalizirane faze, uz ocjenu prednosti korištene aproksimativne metode.

II. OD ANDERSONOVE DO MNOGOČESTIČNE LOKALIZACIJE

A. Andersonova lokalizacija

Jedan od najjednostavnijih modela koji opisuje Andersonovu lokalizaciju dan je hamiltonijanom

$$\hat{H}_A = -t \sum_i \left(c_{i+1,s}^\dagger c_{i,s} + \text{h.c.} \right) + \sum_i h_i c_i^\dagger c_i, \quad (1)$$

gdje operator $c_{i,s}$ ($c_{i,s}^\dagger$) poništava (stvora) česticu na čvoru rešetke i spina s , te je t integral preskoka, a h_i uniformo distribuiran dijagonalni nered unutar intervala $-W < h_i < W$. Prvi član hamiltonijana (1) opisuje preskoke čestica na susjedne čvorove u aproksimaciji čvrste veze i prvih susjeda, odnosno predstavlja kinetičku energiju sustava. Drugim članom određen je nered u sustavu te će očito svojstva sustava biti određena omjerom parametara W/t .

Da hamiltonijan (1) može voditi na prijelaz iz metalne u izolatorsku fazu moguće je intuitivno procijeniti promatrajući navedeni omjer W/t . U granici $W/t \ll 1$ kinetički član prevladava nad neredom pa je na prvi pogled za očekivati metalno ponašanje. U drugoj granici, $W/t \gg 1$, čestice bi trebale ostajati lokalizirane na pojedinim čvorovima rešetke što vodi na izolatorsko ponašanje. Između ta dva suprotstavljena ponašanja moglo bi se onda očekivati postojanje kritične vrijednosti omjera $(W/t)_c$ na kojem se događa metal-izolator prijelaz.

Međutim, stvarno ponašanje je složenije i ovisno o dimenziji sustava. Tako pažljivija teorijska razmatranja [4] pokazuju da u niskodimenzionalnim sustavima čak i najmanja vrijednost nereda dovodi do Andersonove lokalizacije, odnosno izolatorskog ponašanja. Točnije, za jednodimenzionalni (1D) sustav, sva jednočestična stanja su lokalizirana, a omjer parametra W/t određuje lokalizacijsku dužinu. $D = 2$ je donja kritična dimenzija za Andersonovu lokalizaciju. Za $D = 3$ postoji tzv. prag mobilnosti u spektru jednočestičnih stanja koji razdvaja rubna stanja od onih u sredini spektra. Stanja na donjem i gornjem rubnom dijelu spektra su lokalizirana, a ona u sredini spektra su delokalizirana. Omjer W/t određuje položaj praga mobilnosti u spektru jednočestičnih stanja.

U nastavku ćemo se posvetiti jednodimenzionalnim sustavima s neredom za koje su sva stanja, kako smo upravo opisali, lokalizirana neovisno o omjeru W/t . Naime, zbog reducirane dimenzionalnosti upravo bi ovi sustavi trebali biti najviše podložni mnogočestičnoj lokalizaciji jednom kada se uključe učinci interakcija među česticama.

B. Mnogočestična lokalizacija

Model koji na jednostavan način proširuje hamiltonijan (1) uključivanjem interakcije među česticama je dobro poznati Hubbardov model, od posebnog značaja u proučavanju fizike jakih korelacija,

$$\hat{H} = -t \sum_{i,s} \left(c_{i+1,s}^\dagger c_{i,s} + \text{h.c.} \right) + \sum_i h_i c_i^\dagger c_i + U \sum_i \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow}, \quad (2)$$

gdje je U jakost interakcije. Hubbardov model opisuje lokalnu interakciju čestica suprotnih spinova na istom čvoru i . Dakako, zbog Paulijeveg principa isključenja dvije čestice istog spina ne mogu se nikad zajedno naći na

istom čvoru. Ovako proširen hamiltonijan (2) modelira spinski neovisan nered u naboju te nije unaprijed jasno hoće li se nabojni i spinski stupnjevi slobode drugačije ponašati, pogotovo na visokim energijama (temperaturama).

Nedavne numeričke simulacije unutar modela (2) u granici beskonačne temperature [6], kada sva stanja sustava imaju istu statističku težinu, ukazuju na različito ponašanje nabojnih i spinskih stupnjeva slobode. Konkretno, za $W < W_c$ korelacijske funkcije gustoće naboja i spina iščekavaju na dugim vremenskim skalama te se sustav ponaša ergodično. U drugom slučaju, $W > W_c$, spinske korelacije trnu u vremenu znatno brže od onih nabojnih, te se čini kako one nabojne ostaju sačuvane čak i na vrlo dugim vremenskim skalama. Obzirom na nabojne stupnjeve slobode sustav se ponaša neergodično, odnosno čini se kako dolazi do lokalizacije naboja za $W > W_c$.

Tek uvođenjem spinski ovisnih nabojnih nečistoća u hamiltonijan (2) za dovoljno jaki spinski nered dolazi do lokalizacije i u spinskom sektoru te je takav sustav u potpunosti lokaliziran, odnosno tek tada čini se dolazi do potpune mnogočestične lokalizacije. Potpuno analogno ponašanje očekujemo ukoliko umjesto nabojnih uzmemo samo spinske nečistoće, gdje bi samo spinski stupnjevi slobode ostali lokalizirani. No svi ovi zaključci vezani za model (2) dobiveni su numeričkim računima za razmjerno male sustave, zbog čega nije moguće do kraja predvidjeti ponašanja u termodinamičkoj granici, odnosno nije moguće odbaciti mogućnost postojanja vrlo dugih vremenskih relaksacija koje bi karakterizirale dinamiku velikih sustava.

Lokalizacija nabojnih i spinskih stupnjeva slobode za sobom odmah povlači zaključak da se takav sustav ne će termalizirati budući da nema transporta naboja i spina, odnosno energije. Ako postoji takva faza, postavlja se pitanje koji je točno mehanizam prijelaza iz ergodične u neergodičnu fazu i obrnuto, te je li djelomična mnogočestična lokalizacija, primjerice u naboju, dovoljna zapreka termalizaciji sustava? Ova pitanja trenutno su predmet intenzivnog istraživanja raznih scenarija mnogočestične lokalizacije.

III. APROKSIMACIJA REDUCIRANE BAZE

Kako je rečeno u uvodu, broj stanja u mnogočestičnim sustavima obično eksponencijalno brzo raste s linearnom dimenzijom sustava L , što predstavlja velik problem pri numeričkim simulacijama. Ukoliko bismo na neki način od svih stanja uspjeli izdvojiti samo neka, najrelevantnija stanja za dinamiku sustava na dugim vremenima, tada bismo mogli proučavati i sustave dimenzija koje nije inače moguće numerički modelirati i dobiti bolja predviđanja ponašanja modela u termodinamičkoj granici. Relevantna stanja sustava tvore reduciranu bazu te u nastavku opisujemo način i kriterije konstrukcije jedne takve baze, uz raspravu uspješnosti primijenjenoga postupka.

A. Baza mnogočestičnih Andersonovih lokaliziranih stanja

Krenimo od hamiltonijana (2) te ga razdvojimo na dva dijela

$$\hat{H} = \hat{H}_A + \hat{H}_I, \quad (3)$$

gdje je \hat{H}_A Andersonov dio hamiltonijana (1), a $\hat{H}_I = U \sum_i \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow}$ gledamo kao smetnju na Andersonov problem.

Ideja je krenuti od Andersonovog problema kojeg je moguće numerički egzaktno dijagonalizirati, odnosno za kojeg možemo pisati

$$\hat{H}_A = \sum_{l,s} \epsilon_l \varphi_{l,s}^\dagger \varphi_{l,s}, \quad (4)$$

gdje operator $\varphi_{l,s}$ ($\varphi_{l,s}^\dagger$) poništava (stvara) česticu u jednočestičnom Andersonovom lokaliziranom stanju l i spina s , dok su ϵ_l pripadne jednočestične energije Andersonovih lokaliziranih stanja.

Sada je dosta jednostavno konstruirati mnogočestična lokalizirana stanja u Andersonovoj bazi. Dovoljno je fermionima (elektronima) popunjavati jednočestična Andersonova lokalizirana stanja pa se dobiva

$$|n\rangle = \prod_{l,s} \varphi_{l,s}^\dagger |0\rangle, \quad E_n^0 = \sum_{l,s} \epsilon_l n_{l,s}. \quad (5)$$

Međutim, dodamo li interakciju \hat{H}_I mnogočestična Andersonova lokalizirana stanja (5) više nisu svojstvena stanja punog hamiltonijana. S druge strane, ova baza je prirodan odabir baze za razmatranje utjecaja hamiltonijana interakcije \hat{H}_I u granici jakog nereda, kada je lokalizacijska dužina vrlo kratka, što omogućava efikasno razdvajanje rezonantnih (relevantnih) od perturbativno malih doprinosa za konstruiranje reducirane baze. Naime, u toj granici očekujemo kako će i relevantni matrični elementi koji opisuju interakciju (raspršenje između jednočestičnih Andersonovih stanja) biti prostorno jako lokalizirani.

B. Struktura interakcije \hat{H}_I ; razdvajanje nabojnih i spinskih stupnjeva slobode

Prije nego što se posvetimo pitanju konstrukcije reducirane baze, u ovom koraku želimo detaljnije razmotriti strukturu hamiltonijana interakcije \hat{H}_I , identificirajući doprinose koji utječu na nabojne i spinske stupnjeve slobode. Općenito, u bazi jednočestičnih Andersonovih lokaliziranih stanja možemo pisati

$$\hat{H}_I = U \sum_{jklm,ss'} \chi_{jk}^{lm} \varphi_{l,s}^\dagger \varphi_{m,s'}^\dagger \varphi_{k,s'} \varphi_{j,s}, \quad (6)$$

gdje \hat{H}_I odgovara Hubbardovoj interakciji. Kako su Andersonova lokalizirana baza i baza zaposjednuća pojedinog čvora rešetke povezane unitarnom transformacijom

$$\varphi_{l,s}^\dagger = \sum_i \phi_{l,i} c_{i,s}^\dagger, \quad (7)$$

za matrične elemente imamo

$$\chi_{jk}^{lm} = (1 - \delta_{ss'}) \sum_i \phi_{l,i}^* \phi_{m,i}^* \phi_{k,i} \phi_{j,i}. \quad (8)$$

Nadalje, koristeći fermionske antikomutacijske relacije lako je pokazati kako vrijedi

$$\chi_{jk}^{lm} = \chi_{kj}^{ml} = (\chi_{lm}^{jk})^*, \quad \chi_{jk}^{lm} = 0 \quad \text{za } s = s'. \quad (9)$$

Sada možemo razdvojiti četiri različita doprinosa hamiltonijana \hat{H}_I koji se međusobno razlikuju po broju jednakih indeksa j, k, l i m . Prvi takav doprinos uključuje slučaj kada su sva četiri indeksa jednaka

$$\hat{H}_I^1 = 2U \sum_j \chi_{jj}^{jj} \hat{n}_{j,\uparrow} \hat{n}_{j,\downarrow}, \quad (10)$$

te je takav doprinos dijagonalan u bazi mnogočestičnih Andersonovih lokaliziranih stanja, mijenjajući samo njihove energije.

Sljedeći doprinos je jednak

$$\hat{H}_I^2 = 2U \sum_{j \neq k} \left[\chi_{jk}^{jk} \hat{n}_{j,\uparrow} \hat{n}_{k,\downarrow} + \chi_{jk}^{kj} \varphi_{k,\uparrow}^\dagger \varphi_{j,\downarrow}^\dagger \varphi_{k,\downarrow} \varphi_{j,\uparrow} \right], \quad (11)$$

gdje primjećujemo da je prvi član ponovno dijagonalan u bazi mnogočestičnih Andersonovih lokaliziranih stanja, dok drugi opisuje istovremenu promjenu projekcije spina dvama različitim jednočestičnim Andersonovim lokaliziranim stanjima, ne mijenjajući pritom nabojnu konfiguraciju sustava.

Preostala dva doprinosa možemo interpretirati kao jednostruko i dvostruko čestično-šupljinsko pobuđenje, odnosno jednostruko i dvostruko čestično-šupljinsko pobuđenje uz istovremenu promjenu projekcije spina takvih pobuđenja

$$\begin{aligned} \hat{H}_I^3 = 2U \sum_{j \neq k \neq m} & \left[\chi_{jk}^{jm} \left(\varphi_{m,\downarrow}^\dagger \varphi_{k,\downarrow} \hat{n}_{j,\uparrow} + \varphi_{m,\uparrow}^\dagger \varphi_{k,\uparrow} \hat{n}_{j,\downarrow} \right) + \right. \\ & \left. + \chi_{jk}^{mj} \left(\varphi_{m,\downarrow}^\dagger \varphi_{j,\uparrow}^\dagger \varphi_{k,\uparrow} \varphi_{j,\downarrow} + \varphi_{m,\uparrow}^\dagger \varphi_{j,\downarrow}^\dagger \varphi_{k,\downarrow} \varphi_{j,\uparrow} \right) \right], \quad (12) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \hat{H}_I^4 = 2U \sum_{\substack{j \neq k \neq l \neq m \\ l > m, k > j}} & \left[\chi_{jk}^{lm} \left(\varphi_{l,\uparrow}^\dagger \varphi_{m,\downarrow}^\dagger \varphi_{k,\downarrow} \varphi_{j,\uparrow} + \varphi_{l,\downarrow}^\dagger \varphi_{m,\uparrow}^\dagger \varphi_{k,\uparrow} \varphi_{j,\downarrow} \right) \right. \\ & \left. - \chi_{kj}^{lm} \left(\varphi_{l,\uparrow}^\dagger \varphi_{m,\downarrow}^\dagger \varphi_{k,\uparrow} \varphi_{j,\downarrow} + \varphi_{l,\downarrow}^\dagger \varphi_{m,\uparrow}^\dagger \varphi_{k,\downarrow} \varphi_{j,\uparrow} \right) \right]. \quad (13) \end{aligned}$$

Problem koji smo ovako definirali osobito je složen. To se vidi već na razini člana hamiltonijana (11) čijim se djelovanjem ne mijenja nabojna, nego samo spinska struktura mnogočestičnog stanja. Spomenuli smo kako numerički rezultati ukazuju na to da su relaksacijska vremena za nabojne stupnjeve slobode znatno duža od onih spinskih, odnosno da za dovoljno jaki nered i pored interakcije naboj ostaje lokaliziran. No postoji scenarij, posebice u termodinamičkoj granici, po kojem brzi (spinski) stupnjevi slobode mogu djelovati kao termički rezervoar preko kojega onda na dugim vremenskim skalama ipak dolazi i do relaksacije (termalizacije) naboja. Zato je od vitalnog interesa razviti metodu koja bi mogla izračunati vremena relaksacije i za sustave koji su veći od onih dostupnih standardnim metodama. U tu svrhu nešto ćemo pojednostavniti problem, i okrenuti se modelu s lokalnom interakcijom u kojem fermioni nose samo naboj, ali ne i spin.

Kako radimo s fermionima, Paulijev princip isključuje prisustvo dviju čestica u istom jednočestičnom stanju pa modeliranje interakcije mora uključiti različite čvorove rešetke. Prirodno što se dakle nameće je interakcija naboja susjednih čvorova $\hat{H}_I = V \sum_i \hat{n}_i \hat{n}_{i+1}$ (prisjetimo se da Hubbard modelira interakciju na istom čvoru). Tako za interakciju fermiona bez spina dobivamo

$$\hat{H}_I^2 = 2V \sum_{k>j} \left(\chi_{jk}^{jk} - \chi_{jk}^{kj} \right) \hat{n}_j \hat{n}_k, \quad (14)$$

gdje \hat{H}_I^2 dio hamiltonijana postaje u potpunosti dijagonalan te predstavlja Hartree-Fock korekciju energije mnogočestičnog Andersonovog lokaliziranog stanja $|n\rangle$,

$$\tilde{E}_n^0 = E_n^0 + \langle n | \hat{H}_I^2 | n \rangle, \quad (15)$$

$$\hat{H}_I^3 = 2V \sum_{j \neq k \neq m} \left(\chi_{jk}^{jm} - \chi_{jk}^{mj} \right) \hat{n}_j \varphi_m^\dagger \varphi_k, \quad (16)$$

$$\hat{H}_I^4 = 2V \sum_{\substack{j>k \\ m>l \\ j \neq m \neq k \neq l}} \left(\chi_{jk}^{lm} - \chi_{jk}^{ml} \right) \varphi_l^\dagger \varphi_m^\dagger \varphi_k \varphi_j, \quad (17)$$

gdje smo iz prethodnih izraza za Hubbardov model izostavili spin i sumaciju po spinu. Ovako definirani problem mapira se izravno na Heisenbergov spinski model s dijagonalnim neredom preko Jordan-Wigner transformacije, i samo je pitanje praktičnosti hoćemo li raditi u slici fermiona bez spina ili sa spinskim Heisenbergovim hamiltonijanom.

C. Konstrukcija reducirane baze

Mногоčestično Andersonovo lokalizirano stanje opisuje lokalizirani sustav u kojem se svaki fermion (elektron)

nalazi u nekom jednočestičnom Andersonovom lokaliziranom stanju. Utjecaj interakcije H_I delokalizira takav sustav te je za opis sustava sa interakcijom potrebno promatrati sva mnogočestična Andersonova lokalizirana stanja. Ipak, u MBL fazi očekujemo da je utjecaj delokalizacije slab te da je za opis sustava dovoljno promatrati reduciranu bazu s manjim brojem stanja. Ovdje ćemo opisati moguću metodu za odabir relevantnih stanja u reduciranoj bazi.

Reduciranu bazu za pojedino mnogočestično Andersonovo lokalizirano stanje $|n\rangle$ konstruiramo iterativno kroz G generacija. Svaku generaciju dobivamo djelovanjem Hamiltonijana \hat{H}_I^3 i \hat{H}_I^4 na sva stanja prethodne generacije $G-1$, gdje zadržavamo samo stanja koja zadovoljavaju rezonantni uvjet

$$\left| \frac{\langle n^{G-1} | \hat{H}_I^{3,4} | m^G \rangle}{\tilde{E}_0^0 - \tilde{E}_m^G} \right| > R, \quad (18)$$

počevši od stanja $|n\rangle$ kao jedinog stanja u nultoj, početnoj generaciji. Parametar R postavlja uvjet rezonanciji i time kontrolira brzinu rasta reducirane baze po generaciji. Kompletna reducirana baza za neko stanje $|n\rangle$ je stoga $|\tilde{n}\rangle = \{|n\rangle, |n^1\rangle, \dots, |n^G\rangle\}$. Unutar tako konstruirane baze možemo egzaktno dijagonalizirati hamiltonijan sustava te dobiti odgovarajuća svojstvena stanja $|\tilde{m}\rangle$ i svojstvene energije $E_{\tilde{m}}$ kao aproksimaciju egzaktnih.

Ovakav pristup konstrukciji reducirane baze ima mnoge poveznice sa degeneriranim računom smetnje, konkretno Rayleigh-Schrödingerovom perturbacijskom teorijom jer se u izrazu (18) pojavljuje energija \tilde{E}_0^0 početnog stanja nulte generacije. Ideja je da prvo rezonantne doprinose, uvjet (18), uzmemo do beskonačnog reda računa smetnje, a ostale tretiramo kao malo smetnju na njih. Odnosno, u aproksimaciji reducirane baze egzaktnom dijagonalizacijom hamiltonijana unutar reducirane baze računamo rezonantne doprinose do beskonačnog reda, dok ostale doprinose možemo uzeti u vodećem redu perturbacijske teorije ili, radi jednostavnosti kao u ovom seminaru, u potpunosti zanemariti.

Primijetimo da slučaj $R=0$ odgovara egzaktnoj dijagonalizaciji bez aproksimacija, što je pristup primjenjiv za sustave do $L=16$ čvorova. Nasuprot tome, aproksimacijom reducirane baze možemo mijenjanjem parametra R izdvojiti samo neka, nadamo se sva relevantna stanja za proračun danih korelacijskih funkcija na dugim vremenskim skalama, čiji je broj N_{st} (znatno) manji od ukupnog broja stanja N_{tot} . Time onda ujedno možemo proučavati sustave sa više ($L > 16$) čvorova.

Vrijedi spomenuti da je pažljivom analizom ustanovljeno da u slučaju jakog nereda W dominantan doprinos rezonancama (18) dolazi od \hat{H}_I^3 dijela hamiltonijana, te da se broj rezonanci ne mijenja niti na kvalitativan niti na kvantitativan način isključimo li Hartree-Fock korekciju energija (15) mnogočestičnih Andersonovih lokaliziranih stanja.

IV. KORELACIJSKA FUNKCIJA GUSTOĆE

Mnogočestična lokalizacija karakterizirana je neergodičnim ponašanjem korelacijskih funkcija, odnosno od interesa je promatrati relacije

$$\langle \hat{A}(t' + t)\hat{B}(t') \rangle = \frac{1}{N_{tot}} \text{Tr} \left[\hat{A}(t' + t)\hat{B}(t') \right], \quad (19)$$

gdje su \hat{A} i \hat{B} vremenski ovisni lokalni operatori te $\langle \dots \rangle$ predstavlja termodinamički prosjek na temperaturi T . Ovdje nas zanima granica $T \rightarrow \infty$ kada termodinamički prosjek obuhvaća sva mnogočestična Andersonova lokalizirana stanja $|n\rangle$ s jednakom vjerojatnošću.

U kontekstu reducirane baze uprosječavanje po svim stanjima sistema zamijenjeno je uprosječavanjem po reduciranoj bazi, odnosno N_{st} stanja

$$\langle \hat{A}(t' + t)\hat{B}(t') \rangle \simeq \frac{1}{N_{st}} \sum_{n=1}^{N_{st}} \langle n | \hat{A}(t' + t)\hat{B}(t') | n \rangle. \quad (20)$$

Korelacijska funkcija sada ovisi o t' i t , no nas zanima dugovremensko ponašanje $t \rightarrow \infty$ pa se mogu promatrati vremenska usrednjenja bez eksplicitne ovisnosti o početnom trenutku, odnosno u kontekstu reducirane baze vremenski ovisnu korelacijsku funkciju definiramo kao vremenski usrednjeni odgovor za izabranu reduciranu bazu

$$\begin{aligned} C_{AB}(t) &= \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{\tau} \int_0^\tau dt' \frac{1}{N_{st}} \sum_{n=1}^{N_{st}} \langle n | \hat{A}(t' + t)\hat{B}(t') | n \rangle \\ &= \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{\tau} \int_0^\tau dt' \frac{1}{N_{st}} \sum_{\substack{n=1 \\ \tilde{m}\tilde{l}}}^{N_{st}} \langle n | \tilde{m} \rangle A_{\tilde{m}\tilde{l}} B_{\tilde{l}\tilde{p}} \langle \tilde{p} | n \rangle e^{i[E_{\tilde{m}}(t+t') - E_{\tilde{l}}t - E_{\tilde{p}}t']} \\ &= \frac{1}{N_{st}} \sum_{\substack{n=1 \\ \tilde{m}\tilde{l}}}^{N_{st}} |\langle n | \tilde{m} \rangle|^2 A_{\tilde{m}\tilde{l}} B_{\tilde{l}\tilde{m}} e^{i(E_{\tilde{m}} - E_{\tilde{l}})t}. \end{aligned} \quad (21)$$

Nadalje, zanima nas korelacijska funkcija za duga vremena pa možemo opet promatrati samo vremenski prosjek, odnosno

$$\begin{aligned} D_{AB} &= \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{\tau} \int_0^\tau dt C_{AB}(t) \\ &= \frac{1}{N_{st}} \sum_{n, \tilde{m}} |\langle n | \tilde{m} \rangle|^2 A_{\tilde{m}\tilde{m}} B_{\tilde{m}\tilde{m}}, \end{aligned} \quad (22)$$

što se u slučaju uprosječavanja po svim početnim stanjima sustava $|n\rangle$ svodi na

$$D_{AB} = \frac{1}{N_{tot}} \sum_{\tilde{m}} A_{\tilde{m}\tilde{m}} B_{\tilde{m}\tilde{m}}. \quad (23)$$

Primijetimo da doprinosi za dugovremensko ponašanje ovise izravno o preklopu s početnim stanjem $|n\rangle$, odnosno samo svojstvena stanja sustava s velikim preklapom na to početno stanje $|n\rangle$ će znatnije doprinositi u izrazu (22). To je upravo u duhu izbora relevantnih stanja unutar

opisane metode reducirane baze, jer se u nultoj generaciji kreće od stanja $|n\rangle$. Drugim riječima, aproksimacija reducirane baze trebala bi dati vrlo dobru aproksimaciju dugovremenskog ponašanja pojedinih korelacijskih funkcija, odnosno za ponašanje korelacijske funkcije dane izrazom (22), a onda, naknadnim usrednjenjem preko početnih stanja i za korelacijsku funkciju (23).

U ovom seminaru ćemo se detaljnije posvetiti dugovremenskoj korelacijskoj funkciji nabojne gustoće na pojedinom čvoru rešetke i

$$D_i = \frac{1}{N_{st}} \sum_{n, \tilde{m}} |\langle n | \tilde{m} \rangle|^2 [(\delta n_i)_{\tilde{m}\tilde{m}}]^2, \quad (24)$$

gdje su operatori iz izraza (22) fluktuacije gustoće $\hat{A} = \hat{B} = \delta \hat{n}_i = \hat{n}_i / \bar{n} - 1$. Primijetimo da je ovako definirana korelacijska funkcija (24) ekvivalentna Edward-Andersonovom parametru uređenja koji poprima konačnu vrijednost u staklima [11]. Korelacijska funkcija (24) mjeri lokalnu krutost naboja (engleski izraz: charge stiffness).

U ergodičnoj fazi očekujemo da će gustoća naboja na svim čvorovima za duga vremena biti jednaka, $n_i = \bar{n}$, iz čega slijedi da u tom slučaju korelacijska funkcija D_i iščezava. S druge strane, u neergodičnoj fazi naboj je lokaliziran na pojedinim čvorovima, $n_i = 0, 1$, pa će za korelacijsku funkciju (korektno normiranu) vrijediti $0 < D_i \leq 1$. Drugim riječima, u neergotskoj fazi naboj na pojedinom čvoru ostaje koreliran na dugim vremenskim skalama te sustav sporo gubi informaciju, memoriju o početnom stanju, odnosno početnoj raspodjeli naboja, odnosno, ponaša se neergodično.

V. REZULTATI

U raspravi rezultata krećemo od korelacijske funkcije gustoće na pojedinom čvoru (24) za različite vrijednosti jačine nereda W te ćemo pomoću dobivenih vrijednosti korelacijskih funkcija iznijeti zaključke o svojstvima ergodične i lokalizirane faze. Također, ispitati ćemo konvergentnost aproksimacije reducirane baze i njezine različite aspekte ponašanja u različitim parametarskim režimima.

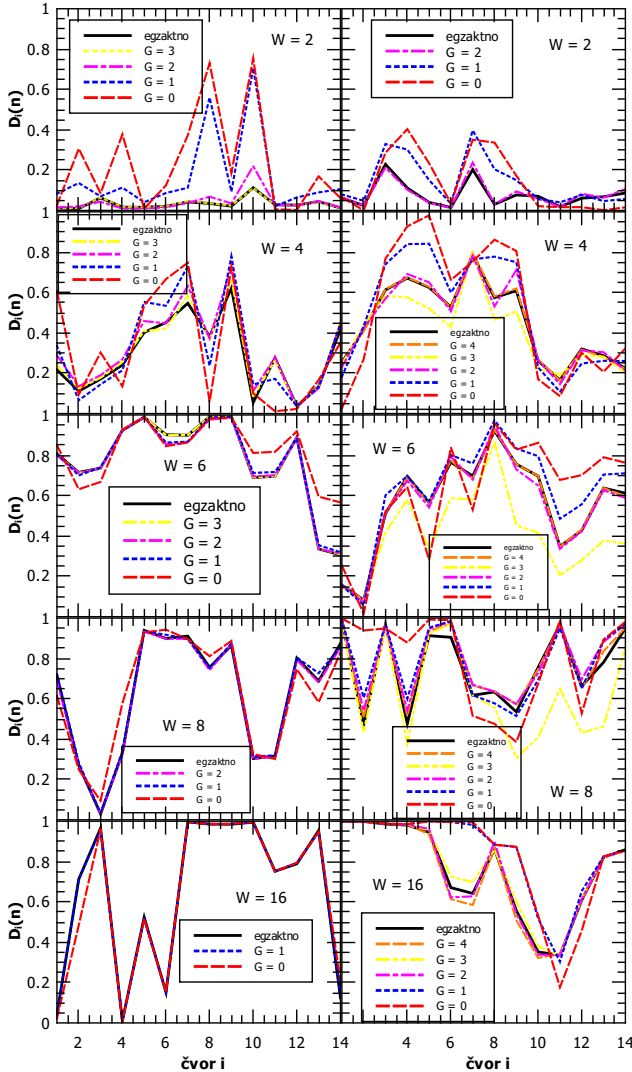
U svim računima koji su ovdje predstavljeni razmatrani su sustavi s $L = 14$ čvorova rešetke, što omogućuje istovremeno usporedbu dobivenih rezultata s egzaktним rješenjima dobivenima metodom egzaktne dijagonalizacije. Kao jedinica energije uzet je integral preskakanja, $t = 1$. Nadalje, za jakost interakcije razmatrana je jedna vrijednost, $V = 1$, a mijenjana je jakost nereda W .

Na slici 1 prikazane su korelacijske funkcije gustoće na pojedinom čvoru bez usrednjavanja po neredu ili početnom stanju $|n\rangle$

$$D_i(n) = \sum_{\tilde{m}} |\langle n | \tilde{m} \rangle|^2 [(\delta n_i)_{\tilde{m}\tilde{m}}]^2. \quad (25)$$

Slika prikazuje rezultate za različite vrijednosti i konfiguracije nereda, a oni su dobiveni u aproksimaciji re-

ducirane baze uz vrijednost parametra R u izrazu (18), $R^2 = 0.001$. Aproximativni rezultati ujedno su uspoređeni s egzaktima. Sa slike 1 je jasno da su dugovremenske korelacije uz dani nered ovisne o čvoru na kojima se promatraju, te da za nered $W \geq 6$ i stanje $|n\rangle$ odabrano za konstruiranje reducirane baze postoje dijelovi sustava koji se na dugim vremenskim skalama ponašaju ergodično $D_i(n) \approx 0$, kao i dijelovi sustava koji pokazuju potpuno suprotno ponašanje $D_i(n) \approx 1$. Nadalje, vidimo kako za $W = 2$ usrednjena vrijednost korelacijske funkcije po svim čvorovima gotovo potpuno iščezava što je konzistentno s očekivanjem da se za mali nered sustav nalazi u ergodičnoj fazi.



Slika 1. Korelacijska funkcija gustoće na pojedinom čvoru (25) izračunata unutar aproksimacije reducirane baze za različite vrijednosti i konfiguracije nereda $W = 2 - 16$. Uvjet rezonancije je postavljen na $R^2 = 0.001$ te G označava broj generacije. Dobiveni rezultati uspoređeni su sa egzaktnim vrijednostima (crna linija).

Slika 1 također daje uvid i u konvergentnost aprok-

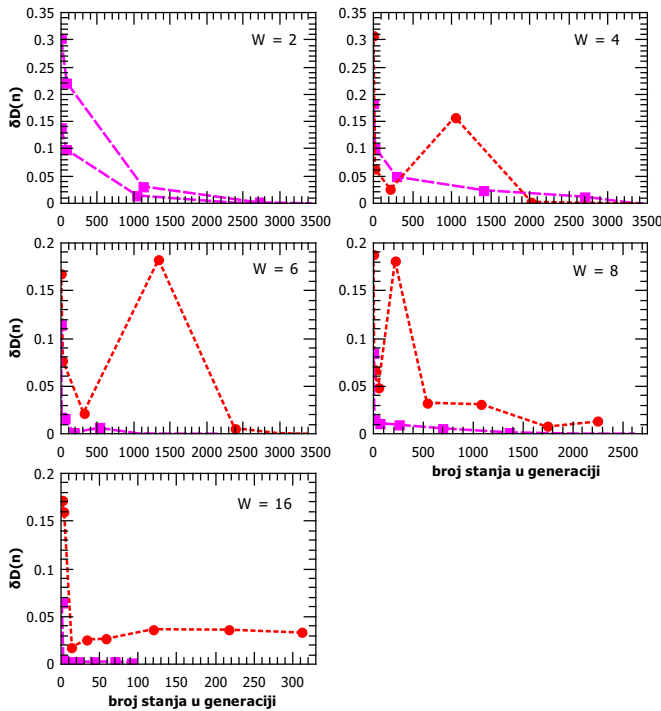
simacije reducirane baze. U lijevom stupcu prikazani su primjeri s tipičnim ponašanjem korelacijskih funkcija kroz generacije. Vidimo da se već u trećoj generaciji, $G = 3$, aproksimativni rezultati izvrsno slažu sa egzaktima. Ono što također treba primijetiti za male nered je kako je konvergencija aproksimacije reducirane baze monotona, svaki puta podrazumijevajući veći broj rezonanci po generaciji. To ujedno znači i kako broj stanja u reduciranoj bazi razmjerno brzo raste s porastom broja generacije G . Ovo ponašanje kroz generacije ujedno daje jednostavan zor ergodičkog ponašanja sustava. Nasuprot tome, za jake nered, $W \geq 8$, vrlo dobro slaganje s egzaktnim rezultatima može se dobiti već u nultoj generaciji, $G = 0$, kada izračun korelacijske funkcije (25) podrazumijeva samo jedno jedino stanje. Točnije, za jače nered slaganje se tipično dobiva s vrlo malim brojem stanja u reduciranoj bazi, što samo po sebi ukazuje na neergodičnu dinamiku.

Međutim, za neka početna stanja $|n\rangle$ pojavljuju se i slučajevi s netipičnim ponašanjem, gdje u višoj generaciji dolazi do vidljivog odstupanja od egzaktnih vrijednosti. Primjere takvih slučajeva posebno smo izdvojili i možemo ih vidjeti u drugom stupcu slike 1, pri čemu možemo razlikovati dva tipa netipičnog ponašanja. Prvi tip karakterizira veliko odstupanje u jednoj generaciji, na slici 1 treća generacija za nered $W = 4 - 8$, dok je za drugi tip specifično da korelacijska funkcija na pojedinim čvorovima iskazuje odstupanja i za veće G , kao na slici 1 za slučaj $W = 16$.

Kako bismo što bolje razmotrili ponašanje rezultata i proučili netipična ponašanja, na slici 2 prikazano je ponašanje standardne devijacije korelacijske funkcije gustoće, sada usrednjene po svim čvorovima rešetke, kroz generacije,

$$\delta D(n) = \sqrt{\frac{1}{L} \sum_{i=1}^L (D_i^{RB}(n) - D_i^{ED}(n))^2}, \quad (26)$$

odnosno njena ovisnost o broju stanja u generaciji G . Kod tipičnog ponašanja usrednjene korelacijske funkcije, odnosno primjeri označeni ružičastom bojom na slici 2, standardna devijacija monotono i brzo pada s generacijama, te vidimo da za nered $W \geq 6$ gotovo iščezava već za razmjerno jako mali broj stanja. Ovo je upravo u skladu s očekivanjima da će aproksimacija reducirane baze dobro raditi u lokaliziranoj fazi s velikim neredima, gdje je dugovremenska (neergodična) dinamika sustava dobro opisana već s manjim brojem stanja. To omogućuje razmatranje svojstva sustava s velikim ukupnim brojem stanja $L > 16$. Netipične slučajeve, crvena boja na slici 2, karakterizira nagli skok standardne devijacije u pojedinoj generaciji ili saturacija k nekoj konačnoj vrijednosti. No istovremeno ovdje treba posebno naglasiti kako pojava netipičnih slučajeva nije vezana za neko kvalitativno fizikalno odstupanje. Naime, pažljiviji uvid pokazuje da odstupanja nastaju kada aproksimacija reducirane baze ne uspijeva obuhvatiti, ili krivo određuje fini (rezonantni) međudnos između jednog do dva stanja po-

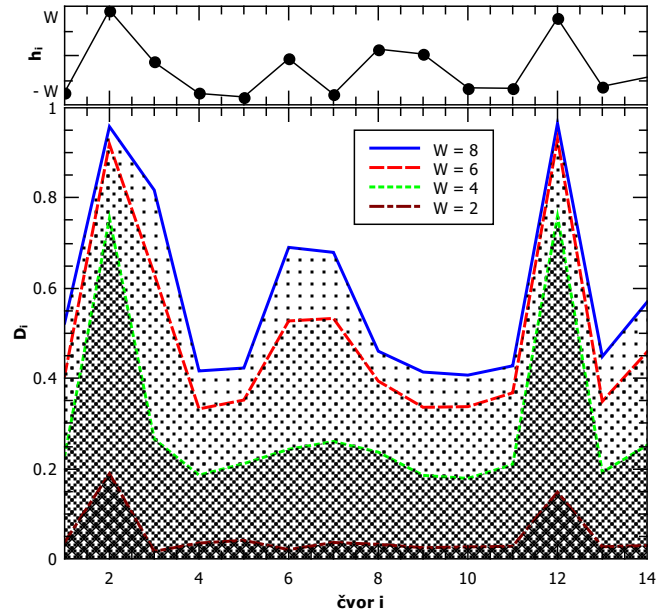


Slika 2. Standardna devijacija korelacijske funkcije gustoće (26) izračunata za slučajeve prikazane na slici 1. Rezultati prikazani ružičastom bojom odnose se na tipično ponašanje korelacijske funkcije kroz generacije, odnosno monoton pad standardne devijacije sa generacijama. Crvenom bojom istaknuti su slučajevi kada dolazi do netipičnog ponašanja, gdje standardna devijacija u nekoj generaciji doživi skok ili saturira nekoj konačnoj vrijednosti.

sebnost relevantna za dugovremensku dinamiku sustava. Posebice, odstupanja ne utječu bitno na srednju vrijednost krutosti naboja, kao osnovnog parametra koji karakterizira globalnu ergodičnost sustava, a mogu se pojaviti i u slučajevima kada je rezonantni parametar postavljen na $R = 0$.

Posebno je zanimljiv rezultat vezan uz termalni prosjek korelacijske funkcije gustoće na beskonačnoj temperaturi D_i (23) prikazan na slici 3 za nereda $W = 2 - 8$ jednakih prostornih konfiguracija h_i/W . Vidimo da čak i u granici beskonačne temperature usrednjeni D_i po svim stanjima pokazuje znatnu ovisnost o čvoru rešetke, te štoviše, postoji jasna prostorno ovisna veza između konfiguracije nereda h_i i vrijednosti korelacijske funkcije D_i . Konkretno, čvorovi $i = 2, 12$ s izraženim maksimumima korelacijskih funkcija odvojeni su velikom energetsom barijerom $\Delta h \sim 2W$ od susjednih čvorova ($i \pm 1$). Ukupno, izgleda kao da se korelacijska funkcija D_i skalira sa jačinom nereda W . Ovakvo ponašanje očituje se na svim vrijednostima nereda i sugerira kontinuirani prijelaz iz ergodične u neergodičnu, lokaliziranu fazu. No ovi zanimljivi aspekti rezultata vezani u prvom redu za ergodičnost sustava ipak zahtijevaju detaljnija daljnja razmatranja, kako bi se s većom sigurnošću mogli dovesti u vezu sa

scenarijima mnogočestične lokalizacije.



Slika 3. Korelacijska funkcija gustoće na pojedinom čvoru u granici beskonačne temperature (23) izračunata egzaktno za različite vrijednosti nereda $W = 2 - 8$ uz fiksnu prostornu konfiguraciju h_i/W .

VI. ZAKLJUČAK

U ovom seminaru opisana je aproksimacija reducirane baze u kontekstu računanja dugovremenskih korelacijskih funkcija u modelu mnogočestične lokalizacije te su numeričkim računom dobivene neke karakteristike ergodične i neergodične faze. Konkretno, za mali nered u ergodičnoj fazi prosječna vrijednost korelacijske funkcije gustoće (krutost) bez usrednjavanja po početnim stanjima ili neredu iščezava, dok u slučaju jakih nereda korelacijska funkcija pokazuje jaku prostornu ovisnost koreliranu s konkretnom konfiguracijom nereda, te se čini kao i da u MBL fazi koja se očekuje za jake nereda postoje dijelovi sustava sa ergodičnim dugovremenskim korelacijama $D_i(n) \approx 0$, ali i potpuno suprotnim, neergodičnim ponašanjem korelacijskih funkcija $D_i(n) \approx 1$. Taj rezultat se ne mijenja niti nakon potpunog uprosječavanja na beskonačnoj temperaturi, odnosno po svim stanjima, što ukazuje na pojavu Griffithsovog efekta kojim se pokušava opisati scenarij MBL prijelaza [12]. Nadalje, čini se da korelacijska funkcija (krutost) uvijek izravno prati svojstva prostorne raspodjele nereda, što je ponašanje koje susrećemo i kod staklastih stanja [11].

Pažnja je također posvećena i svojstvima same aproksimacije reducirane baze te je uočeno da u većini slučajeva dolazi do brze konvergencije rezultata po generacijama egzaktnim vrijednostima. To povlači da već s malim brojem generacija (s procesima koji su u niskom redu

u interakciji V), odnosno za jače neredove već s razmjerno malim brojem stanja, možemo obuhvatiti svu relevantnu fiziku za proučavanje dinamike sustava na dugim vremenskim skalama. Pristup se pokazuje izrazito efikasnim u lokaliziranoj fazi što omogućuje proučavanje lokalizirane faze na sustavima velikih dimenzija i sigurniju raspravu o ponašanju sustava s jakim neredom u termodinamičkoj granici $L \rightarrow \infty$. Također, važno je naglasiti da su numeričke simulacije unutar ovoga seminara izvedene za sustave s $L = 14$ čvorova rešetke, ali da aproksimacija

reducirane baze može obuhvatiti i sustave s puno većim brojem čvorova rešetke, radi proučavanja svojstava ovisnih o L .

ZAHVALE

Zahvaljujem se mentoru dr. sc. Osoru Slavenu Barišiću na prenesenom znanju, korisnim savjetima, uloženom vremenu i pomoći tijekom izrade ovog seminara.

-
- [1] R. Nandkishore and D. A. Huse, *Annu. Rev. Condens. Matter Phys.* 6, 15 (2015)
- [2] D. A. Abanin and Zlatko Papić, arXiv:1705.09103v1
- [3] P. W. Anderson, *Phys. Rev.* 109, 1492 (1958)
- [4] P. Phillips, *Annu. Rev. Phys. Chem.* 44, 115 (1993)
- [5] A. Pal and D. A. Huse, *Phys. Rev. B* 82, 174411 (2010)
- [6] P. Prelovšek, O. S. Barišić and M. Žnidarić, *Phys. Rev. B* 94, 241104(R) (2016)
- [7] J. H. Bardarson, F. Pollmann and J. E. Moore, *Phys. Rev. Lett.* 109, 017202 (2012)
- [8] E. J. Torres-Herrera and L. F. Santos, *Phys. Rev. B* 92, 014208 (2015)
- [9] M. Schreiber, S. S. Hodgman, P. Bordia, H. P. Lüschen, M. H. Fischer, R. Vosk, E. Altman, U. Schneider and I. Bloch, Observation of many-body localization of interacting fermions in a quasi-random optical lattice, *Science* 349, 842 (2015)
- [10] P. Bordia, H. P. Lüschen, S. S. Hodgman, M. Schreiber, I. Bloch and U. Schneider, Coupling identical 1D many-body localized systems, *Phys. Rev. Lett.* 116, 140401 (2016)
- [11] S. F. Edwards and P. W. Anderson, *J. Phys. F: Met. Phys.* 5, 965 (1975)
- [12] K. Agarwal, E. Altman, E. Demler, S. Gopalakrishnan, D. A. Huse and M. Knap, arXiv:1611.00770v1