

# Mnogočestična lokalizacija

---

Krsnik, Juraj

Master's thesis / Diplomski rad

2018

Degree Grantor / Ustanova koja je dodijelila akademski / stručni stupanj: **University of Zagreb, Faculty of Science / Sveučilište u Zagrebu, Prirodoslovno-matematički fakultet**

Permanent link / Trajna poveznica: <https://um.nsk.hr/um:nbn:hr:217:741710>

Rights / Prava: [In copyright](#)/[Zaštićeno autorskim pravom.](#)

Download date / Datum preuzimanja: **2024-10-10**



Repository / Repozitorij:

[Repository of the Faculty of Science - University of Zagreb](#)



SVEUČILIŠTE U ZAGREBU  
PRIRODOSLOVNO-MATEMATIČKI FAKULTET  
FIZIČKI ODSJEK

Juraj Krsnik

MNOGOČESTIČNA LOKALIZACIJA:  
DUGOVREMENSKE KORELACIJE GUSTOĆE  
NABOJA

Diplomski rad

Zagreb, 2018.

SVEUČILIŠTE U ZAGREBU  
PRIRODOSLOVNO-MATEMATIČKI FAKULTET  
FIZIČKI ODSJEK

INTEGRIRANI PREDDIPLOMSKI I DIPLOMSKI SVEUČILIŠNI STUDIJ  
FIZIKA; SMJER ISTRAŽIVAČKI

**Juraj Krsnik**

Diplomski rad

**Mnogočestična lokalizacija:  
dugovremenske korelacije gustoće  
naboja**

Voditelj diplomskog rada: dr. sc. Osor Slaven Barišić

Ocjena diplomskog rada: \_\_\_\_\_

Povjerenstvo: 1. \_\_\_\_\_

2. \_\_\_\_\_

3. \_\_\_\_\_

Datum polaganja: \_\_\_\_\_

Zagreb, 2018.

Zahvaljujem se mentoru dr. sc. Osoru Slavenu Barišiću na prenesenom znanju, korisnim savjetima te uloženom vremenu, trudu i pomoći tijekom izrade ovoga rada.

## Sažetak

Unutar modela mnogočestične lokalizacije korištena je aproksimacija reducirane baze za izračun korelacijskih funkcija. Razmatran je Heisenbergovog model lanca s neredom koji se mapira na fermionski model bez spina. Unutar njega je računata krutost nabojnih stupnjeva slobode te njena ovisnost o jakosti nereda. Krutost poprima konačne vrijednosti za jaki nered unutar neergodične faze dok nestaje u granici slabog nereda. Rezultati aproksimacije reducirane baze uspoređeni su s egzaktnim vrijednostima u različitim režimima parametara te su raspravljena pojedina tipična i netipična ponašanja metode u ovisnosti o konfiguracijama nereda. Posebice, aproksimacija reducirane baze pokazuje svoje prednosti pri računanju dugovremenskih korelacija za jače nered, što omogućuje proučavanje sustava linearnih dimenzija koje nije moguće ispitati metodama egzaktne dijagonalizacije. Vrijednosti krutosti gustoće naboja dobivene egzaktnom dijagonalizacijom nadopunjene su vrijednostima krutosti gustoće naboja sustava većih linearnih dimenzija dobivenim u aproksimaciji reducirane baze te su ukupni rezultati skalirani na termodinamičku granicu. Rezultati skaliranja ukazuju da na jakim neredima krutost nabojnih stupnjeva slobode ostaje konačna kako linearna dimenzija sustava raste dok u granici slabog nereda iščezava, što sugerira pojavu mnogočestične lokalizacije, odnosno prijelaza iz ergodične u neergodičnu, lokaliziranu fazu za konačnu kritičnu vrijednost jakosti nereda i u termodinamičkoj granici.

Ključne riječi: mnogočestična lokalizacija, aproksimacija reducirane baze, krutost gustoće naboja, ergodičnost.

# Many-body localization: Long-time charge-density correlations

## Abstract

Within the model of many-body localization reduced basis approximation is used to evaluate correlation functions. Heisenberg spin chain with disorder is studied which maps directly to the disordered chain of spinless fermions. Within this model charge-density stiffness and its dependence on disorder strength is calculated. Stiffness remains finite for strong disorder within the non-ergodic regime, while its value vanishes in the limit of weak disorder. Results of reduced basis approximation are compared with exact values in various parametric regimes and some typical and atypical behaviours of the method in dependence on disorder configurations are discussed. Reduced basis approximation shows its advantages in calculating correlations in systems with strong disorder, which enables to study systems with large linear dimensions that can not be studied by standard methods of exact diagonalization. Values of charge-density stiffness obtained by exact diagonalization are extended with the values of charge-density stiffness of the systems with larger linear dimensions obtained by reduced basis approximation and combined results are scaled to thermodynamic limit. Results of scaling indicate that in strong disorder limit charge-density stiffness remains finite as the system size increases, while vanishes in the limit of weak disorder, which signals appearance of many-body localization and transition from ergodic to nonergodic, localized phase at some critical value of disorder strength even in thermodynamic limit.

Keywords: many-body localization, reduced basis approximation, charge-density stiffness, ergodicity.

# Sadržaj

|          |  |           |
|----------|--|-----------|
| <b>1</b> | <b>Uvod</b>  | <b>1</b>  |
| <b>2</b> | <b>Kvantna termalizacija</b>   | <b>6</b>  |
| 2.1      | Pojam termalizacije . . . . .  | 6         |
| 2.2      | Termalizacija u izoliranim mnogočestičnim kvantnim sustavima . . . . . | 6         |
| 2.3      | Hipoteza o termalizaciji svojstvenih stanja . . . . .                  | 8         |
| <b>3</b> | <b>Mnogočestična lokalizacija</b>                                      | <b>10</b> |
| 3.1      | Fenomen Andersonove lokalizacije . . . . .                             | 10        |
| 3.2      | Teorija skaliranja . . . . .   | 11        |
| 3.3      | Međudjelovanje u Andersonovom problemu . . . . .                       | 15        |
| 3.4      | Granica slabog međudjelovanja . . . . .                                | 16        |
| 3.5      | Granica jakog nereda . . . . .   | 17        |
| 3.6      | Svojstva MBL faze . . . . .  | 18        |
| <b>4</b> | <b>Aproksimacija reducirane baze</b>                                   | <b>22</b> |
| 4.1      | Motivacija za uvođenje reducirane baze . . . . .                       | 22        |
| 4.2      | Model u bazi mnogočestičnih Andersonovih stanja . . . . .              | 23        |
| 4.3      | Konstrukcija reducirane baze . . . . .                                 | 25        |
| 4.4      | Statistika rezonanci . . . . .   | 27        |
| <b>5</b> | <b>Korelacijska funkcija gustoće</b>                                   | <b>29</b> |
| 5.1      | Korelacijske funkcije i krutosti . . . . .                             | 29        |
| 5.2      | Krutost gustoće naboja i MBL faza . . . . .                            | 31        |
| 5.3      | Korelacijske funkcije i krutosti u ARB . . . . .                       | 32        |
| 5.4      | Krutost gustoće naboja i konvergencija ARB . . . . .                   | 33        |
| 5.5      | Aproksimativni model hamiltonijana međudjelovanja . . . . .            | 35        |
| 5.6      | Skaliranje s linearnom dimenzijom sustava . . . . .                    | 37        |
| <b>6</b> | <b>Zaključak</b>   | <b>43</b> |
|          | <b>Dodaci</b>  | <b>44</b> |
| <b>A</b> | <b>Entropija prepletenosti</b>   | <b>44</b> |

|          |  |           |
|----------|--|-----------|
| <b>B</b> | <b>Struktura hamiltonijana međudjelovanja</b>                      | <b>47</b> |
| B.1      | Svojstva matičnih elemenata . . . . .                              | 47        |
| B.2      | Dijelovi hamiltonijana međudjelovanja . . . . .                    | 48        |
| <b>C</b> | <b>Izvod vremenski usrednjene korelacijske funkcije i krutosti</b> | <b>50</b> |
| C.1      | Izvod korelacijske funkcije i krutosti u ARB . . . . .             | 51        |
|          | <b>Literatura</b>  | <b>53</b> |



# 1 Uvod

Kvantna statistička fizika formulirana je pojavom kvantne mehanike još u prvoj polovici prošloga stoljeća i u međuvremenu se potpuno integrirala u mnoge pristupe kojima se teorijski razmatraju različite pojave u mnogočestičnim sustavima [1]. Može se slobodno reći kako je kvantna statistička fizika danas jednostavno nezaobilazna u atomskoj fizici i fizici kondenzirane materije, koje omogućuju sintezu, kontrolu i proučavanje novih fizikalnih sustava s jako koreliranim kvantnim stupnjevima slobode [2–7]. Takvi sustavi pak otvaraju mogućnost prema otkrivanju novih kvantnih fenomena čije teorijsko razumijevanje zahtijeva potpun opis u okviru mnogočestične kvantne fizike.

U mnogim problemima fizikalno je potpuno opravdano pretpostaviti da je promatrani sustav u termalnoj ravnoteži sa svojom okolinom, vanjskim rezervoarom [8]. Tada se promatrani sustav može opisivati preko dobro poznatih koncepata ravnotežne statističke fizike, krećući na niskim temperaturama od njegovog osnovnog stanja i niskoležećih pobuđenja, šireći njihov opis sve do kritičnih ponašanja i faznih prijelaza [9].

Novi proboji u eksperimentalnoj fizici omogućuju izravno simuliranje i izoliranih mnogočestičnih kvantnih sustava, kada oni nisu u termalnom kontaktu s bilo kakvim vanjskim rezervoarom [10]. Odnosno, razvijeni su i brojni pristupi koji omogućuju izravan uvid u procese termalizacije koji dovode do uravnoteživanja izoliranih kvantnomehaničkih sustava. U tom kontekstu postavlja se posebno zanimljivo pitanje što se događa sa sustavom nakon njegove proizvoljno duge vremenske evolucije bez dodira s okolinom?

U izoliranom mnogočestičnom kvantnom sustavu bez međudjelovanja nema prijenosa impulsa i energije među česticama, a to dovodi do zaključka da takav sustav ne može doći u termalnu ravnotežu, odnosno termalizirati se. Ipak, termodinamička svojstva idealnih plinova redovno se opisuju u terminima ravnotežne statističke fizike [1]. Razlog tome je što zapravo niti jedan sustav nije u potpunosti idealan, odnosno uvijek postoji neko međudjelovanje između čestica pa makar ono bilo i proizvoljno slabo. Upravo je u aproksimaciji idealnog plina međudjelovanje toliko slabo da je zanemarivo u odnosu na kinetičku energiju čestica pa se stoga niti ne uzima u obzir pri računanju statističkih usrednjenja. Međutim, njegova uloga je i dalje važna,

a to je dovođenje sustava u termalnu ravnotežu.

Nasuprot sustavu nezavisnih čestica, scenarij termalizacije u izoliranom mnogočestičnom kvantnom sustavu s međudjelovanjem među česticama obično podrazumijeva da sustav može djelovati kao svoj vlastiti rezervoar [11–14]. Unutar takvog scenarija za svaki podsustav, koji sadrži manji broj stupnjeva slobode originalnog sustava, ostatak podsustava djeluje kao vanjski rezervoar. Ukoliko dinamika sustava ispunjava ovo svojstvo, odnosno ukoliko je ergodična [1], ravnotežni statistički ansambl u potpunosti opisuje dugovremensko ponašanje promatranog podsustava opisanog s nekoliko globalnih parametara pridruženih sačuvanim veličinama u sustavu. Međutim, nova istraživanja mnogočestičnih sustava s nasumičnim neredom ukazuju na postojanje i suprotnog, neergodičnog ponašanja, kada se kvantni mnogočestični sustavi unatoč međudjelovanju među česticama ne uspijevaju termalizirati čak niti na jako dugim vremenskim skalama. Konkretno, ovdje se misli na sustave u kojima se pojavljuje fenomen mnogočestične lokalizacije (MBL<sup>1</sup>) [15–17].

Važan doprinos problemu lokalizacije u kvantnim sustavima dao je P. W. Anderson još sredinom prošloga stoljeća kada je promatrao problem dinamike jedne čestice u nasumično raspodijeljenom potencijalu koji simulira nered [18]. Kako je pokazano, kvantni sustavi s nasumičnim neredom karakterizirani su gušenjem transporta, što je posljedica eksponencijalnog trnjenja jednočestičnih valnih funkcija u realnom prostoru. Kao rezultat toga, čestica ostaje lokalizirana nasumičnim neredom, a ovaj učinak najizraženiji je u niskodimenzionalnim sustavima ( $d \leq 2$ ) [19].

Važno pitanje vezano za Andersonovu lokalizaciju svakako je ono koliko je ona singularna u međudjelovanju među česticama, odnosno hoće li se mnogočestični sustav delokalizirati čim se uključi međudjelovanje među česticama? Ako lokalizacija u ovom smislu nije singularna pojava, onda postoje sustavi za koje dolazi do mnogočestične lokalizacije, odnosno sustavi u kojima postoji MBL faza. Postojanje takve MBL faze značilo bi i postojanje izoliranog mnogočestičnog kvantnog sustava s međudjelovanjem i neergodičnom dinamikom, koji bi bio karakteriziran odsustvom transporta globalno sačuvanih veličina. Takav neergodičan sustav jednom izbačen iz ravnoteže ostajao bi u neravnotežnom stanju, odnosno takav izolirani MBL sustav ne bi se uspijevaio termalizirati.

Intenzivna istraživanja mnogočestične lokalizacije pokrenuli su radovi [20, 21],

---

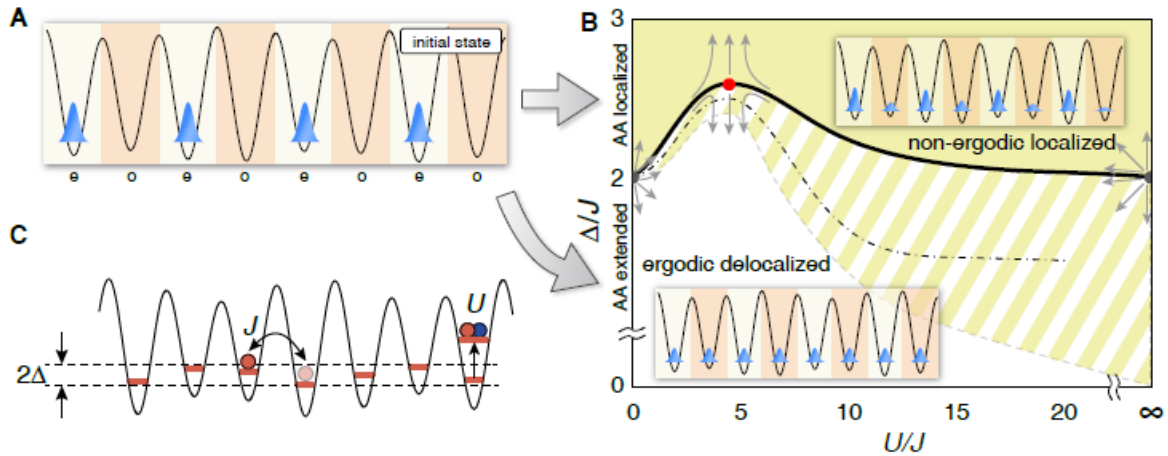
<sup>1</sup>eng. many-body localization

gdje je sugerirano da je fermionska jednočestična lokalizirana faza perturbativno stabilna s obzirom na slabo međudjelovanje. U međuvremenu, najviše pažnje privukle su numeričke simulacije druge granice, one jakog nereda, kada je lokalizacija mnogočestičnog sustava potaknuta smanjenjem učinaka međudjelovanja zbog male lokalizacijske dužine jednočestičnih stanja u jakom neredu [22–26].

Danas postoje i eksperimentalne indikacije o postojanju MBL sustava, odnosno sustava s neergodičnom dinamikom [16, 17]. U sustavu ultrahladnih atoma nered se može simulirati laserskim zrakama koje stvaraju kvaziperiodički potencijal te je Feshbachovim rezonancama moguće podesiti jačinu međudjelovanja između atoma [16], odnosno moguće je eksperimentalno realizirati jednodimenzionalni Aubry-André model [27] s međudjelovanjem [28]. Unutar takvog postava eksperimenta početno stanje pripremljeno je u obliku vala gustoće naboja [29] te je pušteno evoluirati u vremenu. Promatrano je dugovremensko ponašanje razlike zaposjednuća početno popunjenih i početno praznih čvorova te je na temelju dobivenih mjerenja napravljen fazni dijagram modela u ovisnosti o jačini nereda  $\Delta$  i jačini međudjelovanja  $U$ , što je prikazano na slici 1.1. Za ergodične sustave razlika zaposjednuća nestaje u dugovremenskom limitu, dok bi za neergodične sustave neujednačenost zaposjednuća početno popunjenih i početno praznih čvorova trebala ostati vidljiva i na dugim vremenima, što je u eksperimentu opaženo u parametarskom režimu naznačenom na slici 1.1 žutom bojom.

Međutim, pri analizi rezultata vezanih uz pojavu MBL faze valja biti na oprezu radi moguće vrlo spore dinamike takvih sustava, zbog koje je onda potrebno gledati relaksacije sustava na vrlo dugim vremenskim skalama. Naime, u sustavu ultrahladnih atoma postoji problem što je promatrani sustav samo konačno vrijeme u dobroj aproksimaciji odvojen od okoline, pa se ne može odbaciti mogućnost da se sustav ipak ponaša ergodično na puno duljim vremenskim skalama nego što je karakteristična vremenska skala eksperimenta. Slično, zbog konačnih linearnih dimenzija sustava dostupnih numeričkim simulacijama, duge vremenske skale odmah otvaraju pitanje važnosti učinaka rubnih uvjeta, čime se automatski pojavljuje i problem skaliranja rezultata dobivenih na temelju proučavanja manjih, konačnih sustava na termodinamičku granicu.

Cilj ovoga rada je aproksimativnom metodom računati dugovremenske korelacije gustoće naboja, čije konačne vrijednosti signaliziraju pojavu MBL faze [30, 31] na



Slika 1.1: Shematski prikaz jednodimenzionalnog Aubry-André modela s međudjelovanjem, početnog stanja pripremljenog u obliku vala gustoće naboja te faznog dijagrama modela. **A.** Početno stanje pripremljeno u obliku vala gustoće naboja, gdje se svi atomi nalaze samo na čvorovima  $e$ . **B.** Fazni dijagram modela. U ergodičnoj fazi (bijela boja) dolazi do brzog raspada vala gustoće naboja, dok u neergodičnoj fazi (žuta boja) val gustoće naboja opstaje i na dugim vremenima. **C.** Vizualna reprezentacija različitih članova jednodimenzionalnog Aubry-André hamiltonijana s međudjelovanjem. Preuzeto iz [16].

sustavima linearnih dimenzija koje inače nije moguće proučavati metodama egzaktno dijagonalizacije (ED). Ideja aproksimativne metode je postavljanjem rezonantnog uvjeta izdvojiti najrelevantnija stanja za proučavanje dugovremenske dinamike odabranog modela. Takva stanja tvore reduciranu bazu koja sadrži (znatno) manji broj stanja u odnosu na ukupan broj stanja, što omogućuje proučavanje dugovremenskih svojstava sustava veliki linearnih dimenzija. Stoga se takva metoda naziva aproksimacija reducirane baze (ARB), koja se pokazuje izrazito efikasnom u proučavanju sustava s jakim neredom, odnosno za sustave s jakim neredom omogućuje sigurniju raspravu o skaliranju rezultata na termodinamičku granicu.

Ovaj rad je strukturiran na sljedeći način. Poglavlje 2 je uvodno poglavlje u kojemu je razmotren proces termalizacije generičkih kvantnih sustava. U poglavlju 3 ukratko je opisana Andersonova lokalizacija te su iznijeti glavni rezultati i predviđanja mnogočestične lokalizacije. Zatim je u poglavlju 4 opisan način na koji je moguće efikasno odabrati relevantna stanja reducirane baze za proučavanje dugovremenske dinamike sustava kada se očekuje pojava MBL faze. U poglavlju 5 promatrana je dugovremenska korelacijska funkcija gustoće naboja te su na temelju dobivenih numeričkih rezultata unutar jednodimenzionalnog modela međudjelujućih elektrona bez spina s neredom iznijeti neki zaključci o svojstvima ergodične i lokali-

zirane faze, uz ocjenu prednosti korištene aproksimativne metode. Konačno, ARB je korištena za izračun dugovremenskih korelacija u sustavima velikih linearnih dimenzija te su dobiveni rezultati skalirani na termodinamičku granicu uz raspravu faznog dijagrama.

## 2 Kvantna termalizacija

U ovom poglavlju najprije je razmotren pojam termalizacije. Zatim je proces termalizacije detaljnije proučavan u kontekstu izoliranih mnogočestičnih kvantnih sustava. Na kraju je iznesena hipoteza o termalizaciji svojstvenih stanja (ETH<sup>2</sup>) koja postavlja stroge uvjete na strukturu svojstvenih stanja izoliranih mnogočestičnih kvantnih sustava u kojima dolazi do termalizacije.

### 2.1 Pojam termalizacije

Zanimljivo pitanje koje se postavlja u fizici jest što se događa sa sustavom pripremljenim u nekom stanju nakon proizvoljno dugog vremena? Promatrani sustav obično se sastoji od velikog broja čestica s mnogo stupnjeva slobode, odnosno mnoštvo mogućih mikroskopskih realizacija. U takvim uvjetima često se svojstva sustava na dugim vremenima mogu opisati manjim brojem dobro definiranih fizikalnih veličina [1, 8]. U tom slučaju sustav je definiran jednim makroskopskim stanjem, gdje su svojstva sustava u potpunosti opisana s nekoliko usrednjenih veličina jednakima za cijeli sustav čije se vrijednosti ne mijenjaju u vremenu. Za takav sustav se kaže da se nalazi u termalnoj ravnoteži, te se proces dolaska sustava u termalnu ravnotežu naziva termalizacija. Ovo sugerira da je proces termalizacije povezan s gubitkom bilo kakve lokalne informacije o početnom stanju sustava.

Termalizacija se opravdava hipotezom o ergodičnoj dinamici sustava, odnosno pretpostavkom da su sve mikroskopske konfiguracije sustava jednako vjerojatne na dugim vremenskim skalama. Tada se dugovremenska svojstva sustava uistinu mogu opisati preko usrednjenih veličina, gdje se za izračun njihovih ravnotežnih vrijednosti mogu koristiti predviđanja ravnotežne statističke fizike, odnosno mogu se računati usrednjenjem preko statističkih ansambala.

### 2.2 Termalizacija u izoliranim mnogočestičnim kvantnim sustavima

U mnogim slučajevima fizikalno je opravdano pretpostaviti da je sustav vezan na svoju okolinu. Okolina je također neki sustav koji se po pretpostavci zbog svoje

---

<sup>2</sup>eng. eigenstate thermalization hypothesis

veličine i nasumičnog karaktera ponaša ergodično, odnosno nalazi se u termalnoj ravnoteži koja ne može biti narušena zbog vezanja sustava na okolinu. Ukoliko sustav s okolinom izmjenjuje energiju i čestice na način da je njihovo međudjelovanje dovoljno slabo da kvalitativno bitno ne mijenja sama svojstva sustava, kažemo da je sustav u termalnom kontaktu s okolinom, te da okolina za sustav djeluje kao vanjski rezervoar. Prema nultom zakonu termodinamike tada će i promatrani sustav nakon dovoljno dugog vremena biti u termalnoj ravnoteži opisan onim istim termodinamičkim parametrima koji opisuju okolinu. Drugim riječima, promatrani sustav u termalnom kontaktu s okolinom će i sam biti u termalnoj ravnoteži i u ravnoteži s okolinom. No postoje i sustavi koji su u dobroj aproksimaciji izolirani od okoline te se postavlja pitanje što se događa s proizvoljnim početnim stanjem takvog sustava na dugim vremenskim skalama? Posebice, termalizira li se izolirani mnogočestični kvantni sustav vođen jedino vlastitom dinamikom?

Za početak, dinamika izoliranog mnogočestičnog kvantnog sustava je unitarna [32] pa nije isprva jasno kako uopće može doći do termalizacije. Odgovor na ovaj problem leži u tome da se unitarnom evolucijom lokalna informacija o početnom stanju ne gubi, već je skrivena u sustavu preko makroskopskog broja mikroskopskih stupnjeva slobode ako se sustav termalizira [15]. Za to je odgovoran proces dekoherencije [32], odnosno širenje kvantne prepletenosti koje rasipa lokalnu informaciju o početnom stanju sustava po cijelom sustavu. U skladu s time, izvođenjem samo lokalnih mjerenja na samo nekim stupnjevima slobode sustava ne može se povratiti potpuna informacija o početnom stanju sustava, pa se s pravom može reći da se takvi kvantni sustavi ponašaju jednako kao da su termalizirani.

U kontekstu termalizacije izoliranih mnogočestičnih kvantnih sustava uobičajeno je promatrati ponašanje makroskopskih opservabli manjih podsustava originalnog sustava. Izolirani sustav praktično je podijeliti na dva dijela,  $A$  i  $B$ , gdje je podsustav  $A$  manji u odnosu na  $B$ , u smislu da omjer broja stupnjeva slobode ova dva podsustava iščezava u termodinamičkoj granici. Kako je u tom slučaju od interesa promatrati opservable samo manjeg podsustava, ravnotežnu vrijednost operatora gustoće podsustava  $A$ , koji sadrži informaciju o svim njegovim svojstvima, dobiva se uzimanjem traga po podsustavu  $B$  operatora gustoće ukupnog sustava [32]

$$\hat{\rho}_A^{(eq)} = \lim_{t \rightarrow \infty} \hat{\rho}_A(t) = \lim_{t \rightarrow \infty} \text{Tr}_B (\hat{\rho}(t)). \quad (2.1)$$

Uz pretpostavku da je temperatura  $T$  jedini intenzivni makroskopski parametar koji opisuje svojstva cijelog sustava u termalnoj ravnoteži, u izoliranom mnogočestičnom kvantnom sustavu dolazi do termalizacije ukoliko je ova ravnotežna vrijednost operatora gustoće jednaka vrijednosti operatora gustoće koju daje ravnotežni statistički ansambl [11–14]

$$\hat{\rho}_A^{(eq)}(T) = \text{Tr}_B(\hat{\rho}^{(eq)}(T)) = \frac{1}{Z} \text{Tr}_B\left(e^{-\hat{H}/k_B T}\right), \quad (2.2)$$

gdje je  $Z$  particijska funkcija,  $\hat{H}$  hamiltonijan te  $k_B$  Boltzmannova konstanta.

Izraz (2.2) daje kriterij termalizacije izoliranog mnogočestičnog kvantnog sustava, iz kojeg jednom kada je zadovoljen, proizlazi da podsustav  $B$  služi kao vanjski rezervoar podsustavu  $A$  koji se prema tome termalizira unatoč tome što je ukupni sustav  $A \cup B$  izoliran. Dakle, termalizacija izoliranog mnogočestičnog kvantnog sustava moguća je ukoliko sustav sam sebi može služiti kao rezervoar.

### 2.3 Hipoteza o termalizaciji svojstvenih stanja

U prethodnom potpoglavlju razmatran je uvjet pod kojim u izoliranom mnogočestičnom kvantnom sustavu dolazi do termalizacije no nije argumentirano zašto bi uopće dinamika takvih sustava bila ergodična. Problematika ergodičnosti izoliranih mnogočestičnih kvantnih sustava već se nekoliko desetljeća raspravlja u okviru ETH [11–14], kojom se pokušava objasniti mehanizam termalizacije kvantnog sustava uz pretpostavku da su sva svojstvena stanja sustava koji se termalizira, termalna.

Kako bi se ilustrirala glavna ideja ETH, zgodno je pretpostaviti da se sustav nalazi u nekom svojstvenom stanju  $|n\rangle$  s pripadnim operatorom gustoće  $\hat{\rho}^{(n)} = |n\rangle\langle n|$ . Za reducirani operator gustoće podsustava  $A$  vrijedi

$$\hat{\rho}_A^{(n)} = \text{Tr}_B(|n\rangle\langle n|), \quad (2.3)$$

te je središnja ideja ETH da će podsustav  $A$  takvog sustava u termodinamičkoj granici biti u termalnoj ravnoteži (2.2)

$$\hat{\rho}_A^{(n)} = \text{Tr}_B(|n\rangle\langle n|) = \frac{1}{Z} \text{Tr}_B\left(e^{-\hat{H}/k_B T}\right). \quad (2.4)$$



Važno je naglasiti da je ETH samo hipoteza te da nema rigoroznog analitičkog dokaza o njejoj valjanosti i primjenjivosti. Međutim, mnogobrojni numerički rezultati podržavaju ETH u sustavima u kojima uistinu dolazi do termalizacije na upravo opisani način [14, 24]. S druge strane, ETH očito neće vrijediti za svojstvena stanja sustava s neergodičnom dinamikom u kojima termalizacije nema. Takvi su potencijalno MBL sustavi koji će se detaljnije proučavati u sljedećim poglavljima.

### 3 Mnogočestična lokalizacija

U ovom je poglavlju najprije opisan fenomen Andersonove lokalizacije te su navedene neke njegove ključne karakteristike. Zatim su navedeni rezultati teorije skaliranja vezani za metal-izolator prijelaz te je promatrano kako prijelaz i svojstva lokalizirane faze ovise o dimenziji sustava. Najveća pažnja posvećena je proučavanju utjecaja međudjelovanja u Andersonovom sustavu, odnosno MBL fazi. Najprije su iznijeti glavni perturbativni rezultati vezani uz stabilnost pojave lokalizacije u prisustvu međudjelovanja. Zatim su nabrojane neke ključne karakteristike MBL faze dobivene ED MBL hamiltonijana te je na kraju prikazan mogući fazni dijagram standardnog modela za MBL.

#### 3.1 Fenomen Andersonove lokalizacije

Godine 1958. P. W. Anderson objavio je jedan od svojih najpoznatijih radova [18] u kojemu je proučavan utjecaj nereda i nečistoća na transport i vodljivost kristala. Prvotna motivacija bila je objasniti eksperimentalne opservacije anomalno dugih relaksacijskih vremena elektronskih spinova u Si poluvodičima dopiranih s nečistoćama [33–35]. Ono do čega je Anderson došao je da u neinteragirajućim sustavima s nasumičnim neredom jednočestične elektronske valne funkcije mogu biti eksponencijalno lokalizirane za dovoljno jaki nered, suprotno delokaliziranoj prirodi svojstvenih stanja čistih sustava. Ovaj fenomen poznat je pod nazivom Andersonova lokalizacija. Budući da eksponencijalno lokalizirani elektroni ne mogu prenositi niti energiju niti naboj, u sustavima s neredom može doći do metal-izolator prijelaza.

Konkretno, hamiltonijan kojim se uobičajeno modelira Anderson sustav glasi

$$\hat{H}_A = -t_p \sum_{\langle i,j \rangle} (c_i^\dagger c_j + c_j^\dagger c_i) + \sum_i h_i c_i^\dagger c_i, \quad (3.1)$$

gdje je  $c_i^\dagger$  ( $c_i$ ) operator stvaranja (poništanja) fermiona na čvoru  $i$ ,  $t_p$  integral preskoka,  $h_i$  uniformo distribuiran dijagonalni nered unutar intervala  $-W < h_i < W$  te  $\langle \cdot, \cdot \rangle$  označava modeliranje preskoka samo između prvih susjeda.

Analitička analiza Andersonovog problema (3.1) obično se radi uz pretpostavku da je kinetički član preskoka slaba perturbacija neredu. U tom slučaju, svako neperurbirano jednočestično svojstveno stanje je trivijalno lokalizirano na čvoru  $i$ . Uključi-

vanjem preskoka, jednočestična svojstvena stanja se počinju miješati, odnosno dolazi do hibridizacije te je od interesa promotriti ponašanje amplitude vjerojatnosti  $c_i$  valne funkcije lokalizirane na čvoru  $i$  u granici  $t \rightarrow \infty$ . Ukoliko sustav ostaje lokaliziran i nakon uključivanja preskoka, za svojstveno stanje početno lokalizirano na nekom čvoru amplituda vjerojatnosti valne funkcije na tom čvoru ostaje konačna u granici  $t \rightarrow \infty$ , dok se u delokaliziranom, metalnom režimu raširi po svim čvorovima i skladno tome trne u nulu.

Andersonov perturbativni rezultat za amplitudu vjerojatnosti  $c_i$  valne funkcije lokaliziranog stanja na čvoru  $i$  ukazuje da na dugim vremenima i dovoljno jakom neredu njena vrijednost ostaje konačna, te da vjerojatnost zauzeća susjednih čvorova opada unutar lokalizacijske dužine kako udaljenost od čvora  $i$  raste. To vodi do rezultata o lokalizaciji jednočestičnih valnih funkcija u neuređenim sustavima čija gustoća vjerojatnosti eksponencijalno trne u realnom prostoru

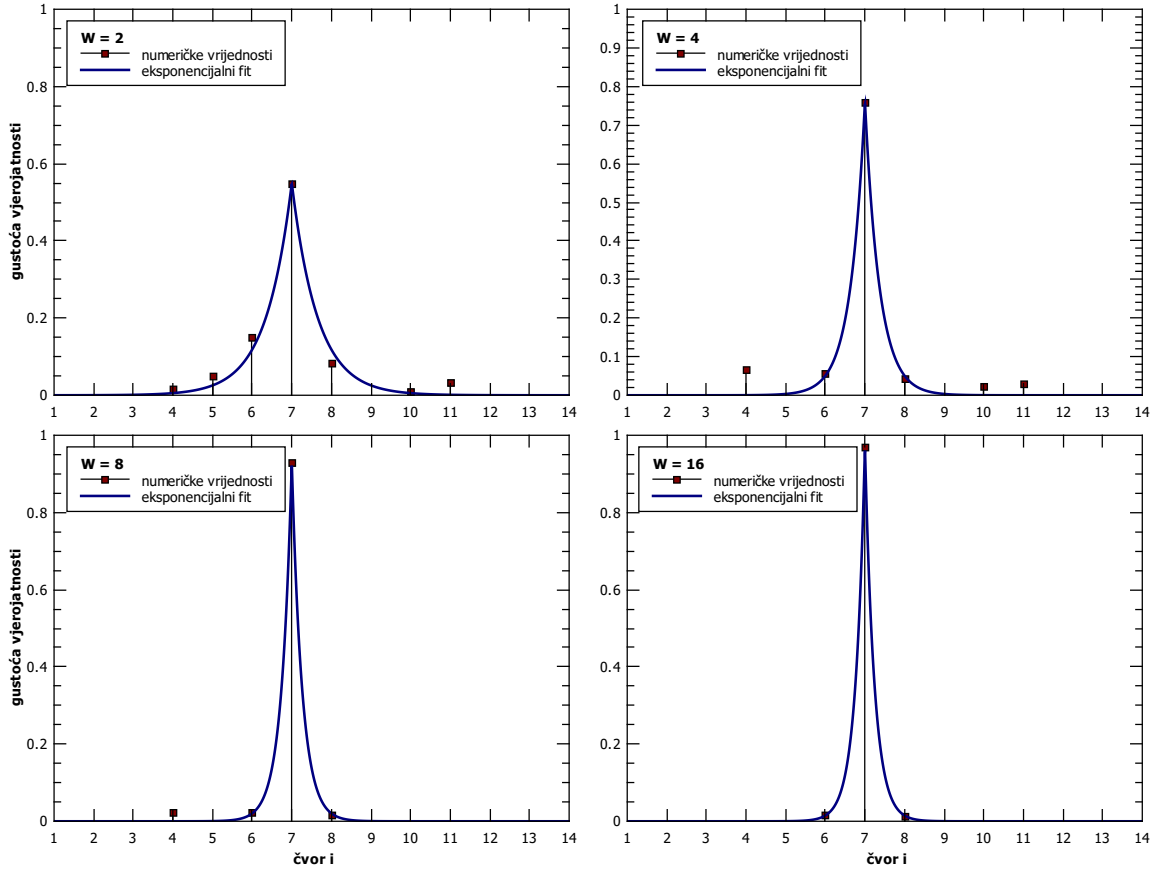
$$|\psi_i(r)|^2 \sim e^{-\frac{|r-r_i|}{\xi}}, \quad (3.2)$$

gdje je  $\xi$  lokalizacijska dužina stanja  $i$  te  $r_i$  položaj čvora s maksimalnom amplitudom valne funkcije.

Za ilustraciju, promatrajući jednodimenzionalni,  $d = 1$ , lanac linearne dimenzije  $L = 14$  s integralom preskoka uzetim kao jedinicom energije,  $t_p = 1$ , i mijenjajući jačinu nereda  $W$ , numeričkom dijagonalizacijom hamiltonijana (3.1) dobivena je gustoća vjerojatnosti valnih funkcija Andersonovih stanja na pojedinom čvoru te je zajedno s eksponencijalnim fitom (3.2) prikazana na slici 3.1. Na slici 3.1 vidi se da su Andersonove valne funkcije lokalizirane za sve vrijednosti nereda što je svojstvo koje će, kako će se pokazati, uvijek vrijediti u jednodimenzionalnim sustavima. Pojačavanjem nereda lokalizacijska dužina  $\xi$  postaje sve manja, odnosno lokalizacija se očekivano povećava kako nered raste.

## 3.2 Teorija skaliranja

Nakon Andersonovog perturbativnog pristupa lokalizaciji pojavile su se mnoge druge teorije koje su otkrile čitavo bogatstvo fenomena [36]. Teorija skaliranja uzima u obzir dimenzionalnost sustava, odnosno opisuje dimenzionalnu ovisnost metal-izolator prijelaza [19]. Ključna pretpostavka ove teorije jest da za svaku dimenziju postoji



Slika 3.1: Gustoća vjerojatnosti valnih funkcija Andersonovih stanja zajedno s eksponencijalnim fitom (3.2) dobivena numeričkom dijagonalizacijom Andersonovog hamiltonijana (3.1) sustava dimenzije  $d = 1$  za različite vrijednosti nereda  $W$ .

parametar  $g$  koji u potpunosti karakterizira metal-izolator prijelaz.

Neka je jedinična ćelija kristala povećana za faktor  $p$ . Nova konstanta rešetke iznosi  $L_1 = ap$ , gdje je  $a$  originalna konstanta rešetke, i nova jedinična ćelija sadrži  $p^d$  originalnih ćelija gdje je  $d$  dimenzija sustava. Prema pretpostavci teorije, lokalizacijska svojstva nove jedinične ćelije su u potpunosti određena s  $g(L_1)$ . Slično, nakon  $m$  takvih transformacija,  $L_m = ap^m$ , te ponovno jedino  $g(L_m)$  određuje lokalizacijska svojstva nove jedinične ćelije. To dalje povlači da su parametri  $g(L_m)$  za različiti  $m$  međusobno povezani, što znači da svojstvena stanja u bloku duljine  $L_2$  mogu biti u potpunosti određena poznavajući svojstvena stanja u bloku duljine  $L_1$ , odnosno mogu biti određena poznavajući samo jedan parametar.

Thouless je argumentirao da je traženi parametar dan omjerom  $\Delta E/\delta W$  [37], gdje je  $\Delta E$  energijski pomak svojstvenih stanja kada su periodički ili aperiodički rubni uvjeti nametnuti na sustav dimenzije  $L^d$ , gdje je  $L$  linearna dimenzija sustava, dok  $\delta W$  odgovara usrednjenom razmaku energijskih nivoa jednočestičnih sta-

nja. Promjena rubnih uvjeta neće značajno promijeniti energiju svojstvenih stanja lokaliziranih duboku u uzorku pa je sukladno tome promjena  $\Delta E$  za lokalizirana stanja zanemarivo mala. S druge strane, delokaliziranom djelu spektra promjena rubnih uvjeta u potpunosti mijenja svojstvena stanja te je  $\Delta E$  velik. Sukladno tome,  $\Delta E/\delta W$  je uistinu parametar koji omogućuje određivanje lokalizacijskih svojstva sustava.

Konkretno, za razmak nivoa vrijedi  $\delta W = (\rho L^d)^{-1}$  gdje je  $\rho$  gustoća stanja sustava, dok je energijski pomak dan s  $\Delta E = \hbar/\tau$  [38] gdje je  $\hbar$  reducirana Planckova konstanta i  $\tau$  vrijeme difuzije čestice preko cijeloga uzorka. Koristeći Einsteinovu relaciju [1] između DC<sup>3</sup> vodljivosti  $\sigma$  i konstante difuzije  $D$ ,  $\sigma = e^2\rho D$ , gdje je  $e$  jedinični naboj, može se dobiti ovisnost traženog parametra o veličini sustava

$$g(L) = \frac{\hbar}{e^2} G(L). \quad (3.3)$$

U izrazu (3.3),  $G = \sigma L^{d-2}$  je DC provodnost sustava pa slijedi da je parametar skaliranja zapravo bezdimenzionalna provodnost  $g$ .

Dalje se uvodi

$$\beta(g) = \frac{d \ln [g(L)]}{d \ln L}, \quad (3.4)$$

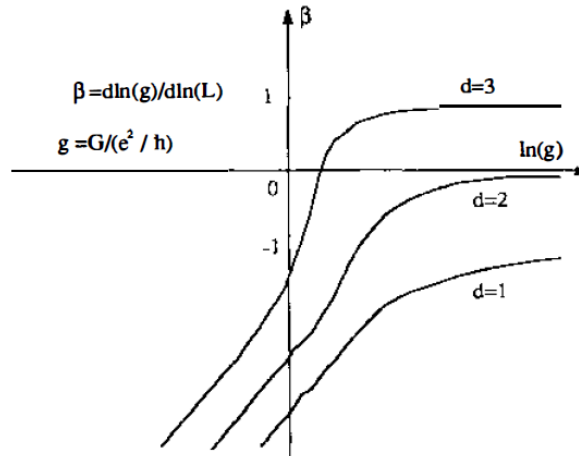
kao logaritamska derivacija od  $g(L)$ . Izvorna ideja je da veličina  $\beta(g)$  opisuje ključnu fiziku problema metal-izolator prijelaza. Naime, u granici  $L \rightarrow \infty$ ,  $\beta(g) > 0$  povlači da  $g(L)$  divergira. No ako  $\beta(g) < 0$  za  $L \rightarrow \infty$ , tada  $g(L)$  monotono iščezava što je signal pojave izolatorskog ponašanja. Očito će predznak od  $\beta(g)$  određivati razliku između metalnog i izolatorskog ponašanja.

U granici slabog nereda provodnost zadovoljava Ohmov zakon,  $G = \sigma L^{d-2}$ , pa  $\beta(g) = d - 2$  što odgovara granici kada je  $g$  velik. Međutim, u granici jakog nereda provodnost eksponencijalno pada s  $L$ ,  $g \sim e^{-L/\xi}$ , pa je  $\beta(g) = \ln g$ . Pretpostavljajući još da je  $\beta(g)$  monotona funkcija u  $g$ , logaritamska ovisnost funkcije  $\beta(g)$  se kontinuirano interpolira do asimptotske vrijednosti  $\beta(g) = d - 2$ , što je prikazano na sl. 3.2. Sa slike 3.2 vidi se da je  $\beta(g) \leq 0$  za  $d = 1, 2$  pa u niskodimenzionalnim sustavima nema metal-izolator prijelaza te su sva stanja uvijek lokalizirana, čak i za male vrijednosti nereda. Nasuprot tome, u  $d = 3$  dolazi do prijelaza iz metalnog u lokalizirano stanje na dovoljno velikoj vrijednosti nereda.

Za  $d = 3$  stvar je još nešto kompliciranija. Naime, pokazuje se da u tom slučaju

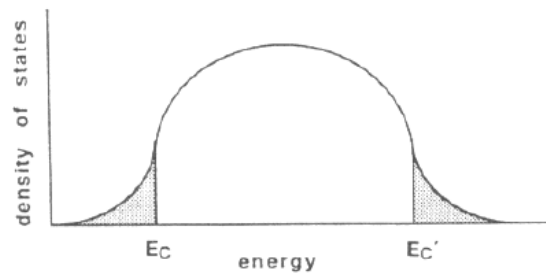
---

<sup>3</sup>eng. direct current



Slika 3.2: Dimenzionalna ovisnost funkcije  $\beta(g) = d \ln(g)/d \ln L$  kao funkcija vodnosti  $g$ . Za  $d = 1, 2$   $\beta(g)$  je strogo negativna i asimptotski teži nuli za veliki  $g$  i  $d = 2$ . To indicira da nema metal-izolator za  $d = 1, 2$  te da su u niskim dimenzijama stanja uvijek lokalizirana. U  $d = 3$ ,  $\beta(g)$  siječe os  $\beta(g) = 0$  pa sukladno tome teorija predviđa i prijelaz između izolatorskog i metalnog stanja. Preuzeto iz [39].

postoji prag mobilnosti u spektru jednočestičnih stanja koji razdvaja rubna stanja od onih u sredini spektra [40], slika 3.3. Stanja na donjem i gornjem rubnom dijelu spektra su lokalizirana, dok su ona u sredini spektra delokalizirana. Položaj praga mobilnosti u spektru jednočestičnih stanja određen je jačinom nereda. Ukoliko za Fermijev nivo vrijedi  $\mu < E_C$ , gdje je  $E_C$  položaj praga mobilnosti na slici 3.3, DC vodljivost sustava u niskotemperaturnoj granici  $T \rightarrow 0$  iščezava. Odnosno, za  $\mu < E_C$  i konačne temperature, vodljivost je temperaturno pobuđena u skladu s Arrheniusovim zakonom  $\sigma(T) \propto e^{-(E_C - \mu)/T}$  [21].



Slika 3.3: Kvalitativna slika gustoće stanja  $d = 3$  Andersonovog modela. Osjenčana rubna područja označuju lokalizirani dio spektra, dok se u sredini spektra nalaze delokalizirana stanja.  $E_C$  i  $E_{C'}$  označuju pragove mobilnosti. Preuzeto iz [36].

### 3.3 Međudjelovanje u Andersonovom problemu

Još od pojave Andersonovog rada mnogo je teorijskog istraživanja posvećeno boljem razumijevanju raznih aspekata jednočestične lokalizacije. Međutim, postoji i fundamentalni problem koji se dotiče pitanja međudjelovanja u takvom lokaliziranom sustavu. Konkretno, kako općenito dvočestično međudjelovanje utječe na stabilnost pojave Andersonove lokalizacije?

Prvi pokušaji uvođenja međudjelovanja [41] temeljili su se na perturbativnoj analizi utjecaja međudjelovanja na jednočestična Andersonova stanja u duhu Landauove teorije Fermijevih tekućina [42]. Ideja je bila gledati imaginarni dio vlastite energije  $\Im(\Sigma(\omega))$  kao veličinu koja ukazuje na stabilnost lokalizacije u prisustvu međudjelovanja. Ono što se odmah može primijetiti je da u sustavima s nasumičnim neredom nema translacijske invarijantnosti što uvelike komplicira problem. Nadalje, isprva nije ni jasno hoće li Andersonova stanja kontinuirano evoluirati sa sporim pojačavanjem međudjelovanja, odnosno uključuje li se međudjelovanje adijabatski ili djeluje singularno, pa takav pristup već u samome početku ne bi imao smisla. Unatoč tome, u radu [41] je kao polazišni, neperturbirani sustav, promatran Andersonov sustav sa spektrom potpuno lokaliziranih stanja. Pritom je od iznimne važnosti potrebno odabrati pogodnu bazu za provedbu perturbativnog razvoja gdje se prirodno nameće baza jednočestičnih Andersonovih stanja ( $|l\rangle$ ).

$\Im(\Sigma(\omega))$  definira vrijeme raspada elementarnih pobuđenja. U slučaju kada broj prijelaznih stanja preko kojih dolazi do raspada elementarnog pobuđenja teži u beskonačnost,  $\Im(\Sigma(\omega))$  je u bazi ( $|l\rangle$ ) kontinuirana funkcija u  $\omega$ , što signalizira nestabilnost elementarnih pobuđenja. S druge strane, ukoliko je broj prijelaznih stanja konačan, tada je za  $\Im(\Sigma(\omega))$  svojstvena pojava rezonantnih vrhova smještenih na energijama elementarnih pobuđenja, čija je širina znatno manja od razmaka među vrhovima (rezonantnih doprinosa). Ukupna vjerojatnost raspada je tada zanemarivo mala, odnosno elementarna pobuđenja su u tom slučaju dobro definirana.

Ponašanje imaginarnog dijela vlastite energije elementarnih pobuđenja lokaliziranog Andersonovog sustava s međudjelovanjem može se proučiti u prvom redu perturbacijske teorije. U jednočestičnom kanalu na frekvenciji  $\omega$ , ukoliko je međudjelovanje kratkodosežno, dva se stanja  $l$  i  $l'$  međusobno raspršuju jedino ako su lokalizirana na dovoljno bliskim čvorovima. Međutim, to uvodi ograničenja na njihove energije budući da je razlika energija stanja bliskih u prostoru velika [43]. Oba uvjeta zado-

voljena su za samo mali, konačan broj stanja, pa slučaj takvog raspršenja vodi na pojavu rezonantnih vrhova u  $\Im(\Sigma(\omega))$  na energijama elementarnih pobuđenja. Sličan argument vrijedi i za mnogočestični kanal kada se uzme u obzir ukupan volumen faznog prostora dostupan takvom raspršenju. Nadalje, realni dio vlastite energije  $\Re(\Sigma(\omega))$  doprinosi samo renormalizacijom početnog nereda, pa nema utjecaja na dinamiku elementarnih pobuđenja. To povlači da do prvoga reda spektar elementarnih pobuđenja lokaliziranog Andersonovog sustava ostaje diskretan i stanja spektra ostaju lokalizirana, što sugerira da je Andersonova lokalizacija sa iščezavajućom vrijednosti DC vodljivosti stabilna u prisustvu kratkodosežnog međudjelovanja.

Međutim, opisani perturbativni pristup ima nekoliko ograničenja. Kao prvo, on nije primjenjiv u slučaju jakih međudjelovanja. Isto tako, nije prikladan za analizu metal-izolator prijelaza. Također, postavlja se pitanje hoće li slični zaključci vrijediti za više redove perturbacijske teorije.

### 3.4 Granica slabog međudjelovanja

U radu [21] iz 2006. godine, Basko, Aleiner i Altshuler (BAA) detaljno su obradili problem utjecaja međudjelovanja na lokalizirana jednočestična stanja uzimajući u obzir i doprinose visokih redova perturbacijske teorije. Za slabo međudjelovanje predviđeli su postojanje lokalizirane faze sve do neke kritične vrijednosti temperature. Odnosno, predviđeli su postojanje mnogočestičnog metal-izolator prijelaza koji razdvaja lokaliziranu MBL na niskim i vodljivu fazu na visokim energijama. U nastavku je iznesen kratak sažetak njihovog rada.

BAA su promatrali općeniti hamiltonijan oblika

$$\hat{H} = \sum_l \epsilon_l \varphi_l^\dagger \varphi_l + V \sum_{jklm} \chi_{jk}^{lm} \varphi_l^\dagger \varphi_m^\dagger \varphi_k \varphi_j, \quad (3.5)$$

gdje operator  $\varphi_l^\dagger$  ( $\varphi_l$ ) stvara (poništava) fermion u jednočestičnom Andersonovom stanju  $l$  energije  $\epsilon_l$ . Matrični elementi  $\chi_{jk}^{lm}$  ograničeni su i u energiji i u realnom prostoru, odnosno zbog eksponencijalne lokalizacije Andersonovih stanja matrični elementi nezanemarivi su samo za stanja koja zadovoljavaju

$$|\vec{r}_l - \vec{r}_m| \leq \xi, \quad (3.6)$$

...



gdje je  $\xi$  lokalizacijska dužina, a  $\vec{r}_l$  označava poziciju maksimuma amplitude valne funkcije stanja  $l$  u realnom prostoru. Također, zanemareni su svi matrični elementi za stanja udaljena u energiji za više nego što je tipična vrijednost razmaka energije jednočestičnih stanja  $\delta_\xi$  unutar lokalizacijske dužine

$$|\epsilon_l - \epsilon_k|, |\epsilon_m - \epsilon_j| \leq \delta_\xi \quad \text{ili} \quad |\epsilon_l - \epsilon_j|, |\epsilon_m - \epsilon_k| \leq \delta_\xi. \quad (3.7)$$

Gledano perturbativno, međudjelovanje  $V$  vodi na procese u kojima se lokalno pobuđenje  $l$  raspada na čestična i šupljinska pobuđenja. Svakim se redom broj mogućih raspada obično brzo povećava, pa praktički već za vrlo visoke redove broj raspada teži u beskonačnost. No u ovom slučaju samo određeni dio procesa zadovoljava uvjete (3.6) i (3.7), te se postavlja pitanje ostaje li broj raspada, odnosno prijelaznih stanja, konačan u visokom redu perturbacijske teorije. BAA su u samokonzistentnoj Bornovoj aproksimaciji računali  $\Im(\Sigma(\omega))$  te u visokim redovima perturbacijske teorije pokazali da broj prijelaznih stanja ostaje konačan, što daje vrlo jaku naznaku stabilnosti pojave lokalizacije u prisustvu međudjelovanja, odnosno postojanja MBL faze.

### 3.5 Granica jakog nereda

Iako je perturbativni pristup BAA otvorio cijelo polje novih istraživanja, njihovi rezultati primjenjivi su jedino u granici slabih međudjelovanja. Ovo u faznom dijagramu odgovara tik do Andersonove lokalizacije. Nadalje, u blizini faznog prijelaza sustav postaje nestabilan na male perturbacije, pa BAA nije prikladan ni za opis samog MBL prijelaza. Konačno, BAA je aproksimativan pa sam po sebi ne može biti konačan dokaz postojanja MBL faze. Zato postoji niz numeričkih analiza koje se danas najviše bave drugom granicom, onom jakog nereda, koju je zbog male lokalizacijske dužine lakše proučavati u konačnim sustavima. Model koji se uvriježio kao prototip modela za numeričke simulacije jako lokaliziranih sustava je  $d = 1$  sustav fermiona u nasumičnom potencijalu (Andersonov problem (3.1)) s međudjelovanjem između najbližih susjeda

$$\hat{H}_{MBL} = -t_p \sum_{\langle i,j \rangle} (c_i^\dagger c_j + c_j^\dagger c_i) + \sum_i h_i c_i^\dagger c_i + V \sum_i \hat{n}_{i+1} \hat{n}_i. \quad (3.8)$$

Ovako definirani problem izravno se mapira na Heisenbergov spinski model s dijagonalnim neredom preko Jordan-Wigner transformacije [44] te je samo pitanje praktičnosti, hoće li se raditi u slici fermiona bez spina ili sa spinskim Heisenbergovim hamiltonijanom.

U dvije različite granice modela (3.8) očekuju se vrlo različita ponašanja: u granici jakog nereda  $W \gg t_p \gg V$  i u granici slabog nereda  $V, t_p \gg W$ . Prva granica ima analogija s BAA problemom uz vrlo kratku lokalizacijsku dužinu. Kako su sva jednočestična Andersonova stanja lokalizirana u jednoj dimenziji, u toj granici očekujemo kako će i mnogočestični sustav biti lokaliziran. U granici  $V, t_p \gg W$ , hibridizacija je zbog međudjelovanja toliko jaka da podjednako miješa sva produktna mnogočestična stanja te su mnogočestična svojstvena stanja modela (3.8) u toj granici potpuno delokalizirana. To povlači da bi između ove dvije ekstremne granice trebao postojati MBL prijelaz na nekoj konačnoj vrijednosti nereda  $W_c$ .

### 3.6 Svojstva MBL faze

Mnoge numeričke analize utemeljene na ED hamiltonijana (3.8) za konačne sustave ukazuju na postojanje dviju različitih faza modela, one ergodične i MBL faze, odnosno prijelaza između tih dviju faza na kritičnoj vrijednosti nereda  $W_c$  [22–26]. Obje faze karakterizirane su različitim dinamičkim svojstvima te različitom strukturom mnogočestičnih stanja. U nastavku su nabrojena neka važna svojstva MBL faze koja bi trebala odgovarati slučaju  $W > W_c$ .

- neergodična dinamika: informacija o lokalnim početnim uvjetima ostaje sačuvana u lokalnim opservablama i na vrlo dugim vremenskim skalama [30, 31, 45, 46]
- narušena ETH: kako je dinamika MBL sustava neergodična, odnosno kako je MBL sustav karakteriziran odsustvom termalizacije, tako ni svojstvena stanja takvog sustava ne pokazuju svojstva obuhvaćena ETH.
- DC vodljivost globalno sačuvanih veličina iščezava [26, 47]: ovo svojstvo posljedica je postojanja lokalno sačuvanih veličina u MBL fazi.
- statistika MBL spektra: MBL faza također pokazuje karakteristično ponašanje lokalnog energetskeg spektra. Konkretno, prosječna vrijednost  $\langle r \rangle$  bezdimenzi-

onalnog omjera  $r_n = \min(\delta_n, \delta_{n+1}) / \max(\delta_n, \delta_{n+1})$ , gdje je  $\delta_n = E_{n+1} - E_n$  razlika dviju uzastopnih svojstvenih energija teži  $\langle r \rangle \rightarrow 0.39$  kako linearna dimenzija sustava raste. Ova vrijednost ukazuje na Poissonovu distribuciju razmaka energetske nivoa, odnosno indikator je odsustva odbijanja energetske nivoa u MBL fazi. Ovakvo ponašanje energetske spektra razlikuje se od tipičnog ponašanja spektra generičkog kvantnog sustava s međudjelovanjem koje obično slijedi Wigner-Dysonovu statistiku [22, 24, 25].

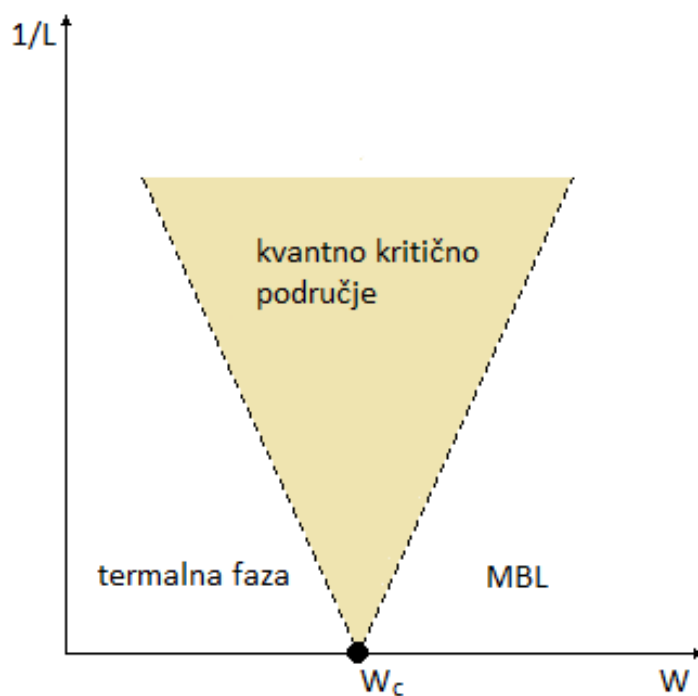
- entropija prepletenosti svojstvenih stanja skalira se s površinom sustava [25, 48]: pojam entropije prepletenosti uveden je u dodatku A, gdje je i podrobnije razmatrano njezino skaliranje s linearnom dimenzijom MBL sustava. Ugrubo, u MBL sustavima entropija prepletenosti svojstvenih stanja skalira se s površinom sustava jer su korelacije lokalnih opservabli koje u potpunosti opisuju MBL sustav eksponencijalno potisnute u prostoru [45, 46].
- logaritamski rast prepletenosti u vremenu [23, 49]: krećući od produktnog mnogočestičnog stanja numeričke simulacije ukazuju da entropija prepletenosti  $S(t)$  nakon uključivanja međudjelovanja u MBL fazi pokazuje spori, logaritamski rast u vremenu. U granici  $L \rightarrow \infty$  njezina vrijednost raste sporo, ali neograničeno, dok za konačne sustave saturira vrijednosti određenoj konkretnim početnim uvjetima koja je ekstenzivna no još uvijek manja od one očekivane u termalnoj fazi. Neograničen rast entropije  $S(t)$  posljedica je gubitka fazne koherencije svojstvenih stanja uključenih u dekompoziciju početnog produktnog mnogočestičnog stanja zbog utjecaja međudjelovanja. To indicira da unatoč nemogućnosti uspostavljanja transporta globalno sačuvanih veličina, odnosno nemogućnosti uspostavi termalizacije, međudjelovanje u MBL sustavu omogućuje sporu propagaciju kvantne dekoherencije preko cijelog sustava.

Ova svojstva sažeta su u tablici 3.1. Navedena svojstva u spomenutoj tablici mogu se koristiti kao detekcija pojave mnogočestične lokalizacije u numeričkim simulacijama raznih fizikalnih modela.

Variranjem nereda  $W$  i linearne dimenzije  $L$  u numeričkim analizama može se pokušati dobiti fazni dijagram prijelaza između ergodične i MBL faze, odnosno ponašanja modela u termodinamičkoj granici  $L \rightarrow \infty$ . Primjer mogućeg faznog dijagrama MBL prijelaza prikazan je na slici 3.4, gdje je kao kriterij pojave MBL faze promatrano

| termalna faza   | Andersonova lokalizacija  | mногоčestična lokalizacija  |
|---|---|---|
| informacija o početnom stanju na dugim vremenima skrivena u globalnim operatorima | dio informacije o početnom stanju sustava na dugim vremenima ostaje sačuvan u lokalnim opservablama | dio informacije o početnom stanju sustava na dugim vremenima ostaje sačuvan u lokalnim opservablama |
| vrijedi ETH   | ETH narušena  | ETH narušena  |
| DC vodljivost može imati konačne vrijednosti                                      | DC vodljivost iščezava  | DC vodljivost iščezava  |
| lokalni spektar kontinuiran   | lokalni spektar diskretan   | lokalni spektar diskretan   |
| prepletenost svojstvenih stanja skalira se s volumenom sustava                    | prepletenost svojstvenih stanja skalira se s površinom sustava                                      | prepletenost svojstvenih stanja skalira se s površinom sustava                                      |
| potencijski rast prepletenosti u vremenu  | nema širenja prepletenosti  | logaritamski rast prepletenosti u vremenu   |

Tablica 3.1: Lista nekih svojstava MBL faze, uspoređenih sa svojstvima termalne faze i Andersonove lokalizirane faze.



Slika 3.4: Mogući fazni dijagram prijelaza između termalne i MBL faze kao funkcija jačine nereda  $W$  i linearne dimenzije sustava  $L$ . U termodinamičkoj granici,  $L \rightarrow \infty$ , predviđa se direktni prijelaz iz termalne u MBL fazu na kritičnoj vrijednosti nereda  $W_c$ , dok se na konačnim linearnim dimenzijama sustava pojavljuje kritično prijelazno područje. Fazni dijagram rađen je prema rezultatima rada [50].

ponašanje entropije prepletenosti svojstvenih stanja modela (3.8) u različitim parametarskim režimima za različite dimenzije sustava [50]. Na slici 3.4 može se vidjeti da se u termodinamičkoj granici očekuje kao mogućnost izravan prijelaz iz ergodične u MBL fazu na kritičnoj vrijednosti nereda  $W_c$ . S druge strane, na konačnim dimenzijama sustava prvo se pojavljuje kritično prijelazno područje koje razdvaja ove dvije faze. Taj režim karakteriziran je platom u vrijednosti entropije prepletenosti svojstvenih stanja, gdje zbog konačnih dimenzija sustava ova veličina ne može poprimiti vrijednosti za beskonačne sustave. Ipak, s opisanim faznim dijagramom treba biti oprezan budući su vrijednosti entropije prepletenosti, pa tako i fazni dijagram (3.4), dobivene s ED samo do  $L = 16$ , dok su ostale vrijednosti interpolirane na temelju dobivenih egzaktnih rezultata. Stoga nije u potpunosti jasno što se zbiva u sustavima s većim linearnim dimenzijama ( $L > 16$ ) te je od vitalnog interesa razviti metodu koja bi omogućila ispitivanje svojstava sustava s linearnim dimenzijama nedostupnim poznatim numeričkim metodama, kako bi se sa što većom sigurnošću moglo reći što se zapravo zbiva u termodinamičkoj granici.

## 4 Aproksimacija reducirane baze

U ovom poglavlju uvodi se ARB pomoću koje se pokušava ispitati svojstva MBL sustava linearnih dimenzija koje inače nije moguće ispitati metodama ED ( $L > 16$ ). Konstrukcija metode počinje od Andersonovog problema kojega je moguće egzaktno numerički riješiti za velike sustave ( $L \gtrsim 10000$ ) te se zatim promatra uloga međudjelovanja na mnogočestična Andersonova stanja konstruirana kao Slaterova determinanta jednočestičnih Andersonovih stanja. Argumentirano je da su ovakva nemeđudjelujuća mnogočestična Andersonova stanja prikladan izbor za razmatranje međudjelovanja jako lokaliziranih sustava u granici jakih nereda. Uvođenjem rezonantnog uvjeta konstruira se reducirana baza relevantnih mnogočestičnih Andersonovih stanja unutar koje je moguće naći aproksimativna mnogočestična stanja punog hamiltonijana. Takva baza sadrži (znatno) manji broj stanja u odnosu na ukupni broj mnogočestičnih stanja, a istovremeno aproksimativno obuhvaća sve relevantne procese za opis MBL faze u dugovremenskoj granici. Na kraju poglavlja raspravljana je statistika rezonanci kojima se konstruira reducirana baza u ovisnosti o jakosti nereda.

### 4.1 Motivacija za uvođenje reducirane baze

Ispitivanje postojanja MBL faze obično se izvodi unutar okvira kojega pruža ED hamiltonijana mnogočestičnog sustava. No budući da broj mnogočestičnih stanja eksponencijalno brzo raste uz stalnu gustoću s linearnom dimenzijom sustava  $L$ , numeričkim simulacijama unutar razmatranog modela obično se može obuhvatiti sustave do  $L = 16$ . Fizikalnu poteškoću stvara činjenica da je dinamika MBL sustava potencijalno vrlo spora, pa relaksacije sustava na vrlo dugim vremenskim skalama za sobom nužno povlače pitanje važnosti učinaka konačnih linearnih dimenzija sustava dostupnih numeričkim simulacijama. Naime, spore vremenske skale obično se razvijaju preko dugih prostornih skala, pa ograničenje numeričkih modeliranja na razmjerno male linearne dimenzije ostavlja otvoreno pitanje o točnosti skaliranja rezultata prema termodinamičkoj granici.

Osnovna ideja ARB je na prikladan način, postavljanjem rezonantnog uvjeta, od svih mnogočestičnih stanja izdvojiti ona relevantna za dinamiku MBL sustava na dugim vremenima s obzirom na neko početno stanje u kojem se sustav nalazi. Proučavajući tako dugovremenska ponašanja moguće je onda odrediti svojstva MBL sustava

obzirom na svojstvo ergodičnosti te istražiti ulogu rezonanci u mnogočestičnom kontinuumu. Uz pretpostavku da je podskup relevantnih stanja značajno manji od skupa svih stanja, s ARB ograničenje na proučavanje razmjerno malih sustava je relaksirano, odnosno prikladnim odabirom relevantnih stanja može se proučavati i one sustave koje obično nije moguće numerički simulirati drugim metodama. U konačnici, zbog šireg dostupnog raspona linearnih dimenzija, ARB pruža veću sigurnost prilikom skaliranja promatranih veličina prema termodinamičkoj granici.

## 4.2 Model u bazi mnogočestičnih Andersonovih stanja

Hamiltonijan (3.8) se može razdvojiti na dva dijela, dio hamiltonijana  $\hat{H}_A$  (3.1) koji odgovara Andersonovom problemu, te  $\hat{H}_I$  dio koji opisuje kratkodosežno međudjelovanje fermiona na susjednim čvorovima. Kako su za  $d = 1, 2$  sva Andersonova jednočestična stanja lokalizirana, najveći učinak lokalizacije i za mnogočestične sustave očekujemo u niskim dimenzijama. Fokus je stoga stavljen na  $d = 1$  slučaj, te je na lancu linearne dimenzije  $L$  s periodičkim rubnim uvjetima promatran slučaj polupopunjenja  $N = L/2$ , s prosječnom gustoćom na pojedinom čvoru  $\bar{n} = 1/2$ . Nadalje, integral preskoka korišten je kao jedinica energije,  $t_p = 1$ . Što se tiče međudjelovanja, u numeričkim analizama razmatran je slučaj  $V = 1$ , koji za slučaj polupopunjenja u odsustvu nereda odgovara točki u faznom dijagramu između slobodnih fermiona  $V = 0$  i sustava s procijepom u spektru jednočestičnih stanja kada je  $V > 2$  [51].

Nakon što su nađena jednočestična svojstvena stanja hamiltonijana  $\hat{H}_A$ , u sljedećem koraku hamiltonijan međudjelovanja  $\hat{H}_I$  proučava se u bazi mnogočestičnih Andersonovih stanja u kojoj je  $\hat{H}_A$  dijagonalan s namjerom razlučivanja rezonantnih i perturbativno malih doprinosa. Konkretno, uz numeričku dijagonalizaciju, jednočestični dio hamiltonijana poprima oblik

$$\hat{H}_A = \sum_l \epsilon_l \varphi_l^\dagger \varphi_l, \quad \varphi_l^\dagger = \sum_i \phi_{l,i} c_i^\dagger, \quad (4.1)$$

gdje operator  $\varphi_l^\dagger$  ( $\varphi_l$ ) stvara (poništava) fermion u jednočestičnom Andersonovom stanju  $l$ ,  $\epsilon_l$  su jednočestične energije Andersonovih stanja te valne funkcije  $\phi_{l,i}$  povezuju bazu Andersonovih stanja s bazom zaposjednuća pojedinog čvora. Jednočestična Andersonova stanja sada se mogu koristiti za konstrukciju baze mnogočestičnih An-

Andersonovih stanja

$$|n\rangle = \prod_l \left(\varphi_l^\dagger\right)^{n_l} |0\rangle, \quad E_n^0 = \sum_l \epsilon_l n_l, \quad (4.2)$$

gdje sukladno fermionskoj prirodi čestica vrijedi  $n_l = 0, 1$ .

Ova stanja miješaju se pod utjecajem hamiltonijana međudjelovanja

$$\hat{H}_I = V \sum_{jklm} \chi_{jk}^{lm} \varphi_l^\dagger \varphi_m^\dagger \varphi_k \varphi_j, \quad (4.3)$$

s matricnim elementima

$$\chi_{jk}^{lm} = \sum_i \phi_{l,i}^* \phi_{m,i+1}^* \phi_{k,i+1} \phi_{j,i}, \quad (4.4)$$

gdje se za matricne elemente može pokazati da vrijedi

$$\chi_{jk}^{lm} = \left(\chi_{lm}^{jk}\right)^*. \quad (4.5)$$

Odgovarajući izvod dan je u dodatku B.

S obzirom na bazu mnogočestičnih Andersonovih stanja, mogu se razlikovati tri različita doprinosa hamiltonijana međudjelovanja  $\hat{H}_I$ . Prvi doprinos je dijagonalan te predstavlja Hartree-Fockovu korekciju [44]

$$\hat{H}_{HF} = 2V \sum_{k>j} \left(\chi_{jk}^{jk} - \chi_{jk}^{kj}\right) \hat{n}_k \hat{n}_j, \quad (4.6)$$

koja samo mijenja jednočestične neperturbirane energije  $\epsilon_l$ , pa sukladno izrazu (4.2) i energije mnogočestičnih Andersonovih stanja

$$\tilde{E}_n^{(0)} = E_n^{(0)} + \langle n | \hat{H}_{HF} | n \rangle. \quad (4.7)$$

Preostala dva doprinosa dana su s

$$\hat{H}_I^3 = V \sum_{j \neq k \neq m} \left(\chi_{jk}^{jm} + \chi_{kj}^{mj} - \chi_{jk}^{mj} - \chi_{kj}^{jm}\right) \varphi_m^\dagger \varphi_k \hat{n}_j, \quad (4.8)$$

$$\hat{H}_I^4 = V \sum_{\substack{j \neq k \neq l \neq m \\ l > m, k > j}} \left(\chi_{jk}^{lm} + \chi_{kj}^{ml} - \chi_{jk}^{ml} - \chi_{kj}^{lm}\right) \varphi_l^\dagger \varphi_m^\dagger \varphi_k \varphi_j, \quad (4.9)$$



te ih se prema djelovanju na bazu mnogočestičnih Andersonovih stanja može interpretirati kao jednostruko i dvostruko čestično-šupljinsko pobuđenje. Podrobnija analiza ova tri doprinosa napravljena je u dodatku B.

### 4.3 Konstrukcija reducirane baze

Primarni cilj ARB je promatrati svojstva sustava u granici jakog nereda koja bi trebala odgovarati MBL fazi. U tom kontekstu prirodno je krenuti od mnogočestičnog Andersonovog stanja (4.2) koje je za  $d = 1$  potpuno lokalizirano te na njemu promatrati utjecaje međudjelovanja. Međudjelovanje sustav pripremljen u takvom stanju veže za druga stanja, odnosno dolazi do miješanja stanja (4.2). No u granici jakog nereda kada je lokalizacijska dužina  $\xi$  vrlo kratka i relevantni matrični elementi mogu biti prostorno jako lokalizirani, pa bi i učinak međudjelovanja u toj granici trebao biti slab. To povlači da bi pravilnim izborom perturbativno značajnih doprinosa reducirana baza mogla dobro opisivati svojstva MBL faze.

Kako broj mnogočestičnih Andersonovih stanja vrlo brzo raste porastom  $L$ , njihov spektar praktički vrlo brzo postaje kontinuiran. Tada se svaki perturbativni razvoj u  $\hat{H}_I$  suočava s problemom rezonanci kada se promatraju stanja bliska u energiji i neiščezavajućim matričnim elementom. Središnja ideja ARB je upravo ta da se rezonantni doprinosi egzaktno uzmu u obzir, do beskonačnog reda u  $\hat{H}_I$ , a ostale, perturbativno male doprinose, u potpunosti zanemari ili eventualno uzme njihov vodeći doprinos.

Reducirana baza za dano početno mnogočestično Andersonovo stanje  $|n\rangle$  energije  $\tilde{E}_0^0$  (4.7) konstruira se iterativno kroz  $G$  generacija. Svaka generacija dobiva se djelovanjem hamiltonijana  $\hat{H}_I^3$  i  $\hat{H}_I^4$  na sva stanja prethodne generacije  $G - 1$ , pri čemu se zadržavaju samo stanja koja zadovoljavaju rezonantni uvjet

$$\left| \frac{\langle n^{G-1} | \hat{H}_I^{3,4} | m^G \rangle}{\tilde{E}_0^0 - \tilde{E}_m^G} \right| = r > R, \quad (4.10)$$

gdje se parametar  $R$  može po volji mijenjati te postavlja uvjet rezonancije i time kontrolira brzinu rasta reducirane baze po generaciji. Također, vrijedi uočiti da se u nazivniku pojavljuju zapravo jednočestične energije budući da su stanja u brojniku povezana preko najviše dva raspršenja jednočestičnih Andersonovih stanja, pa se raz-

lika  $\tilde{E}_0^0 - \tilde{E}_m^G$  uvijek svodi na neku kombinaciju jednočestičnih Andersonovih energija s uključenom Hartree-Fockovom korekcijom. Unutar tako konstruirane reducirane baze može se dijagonalizirati hamiltonijan sustava te dobiti odgovarajuća svojstvena stanja  $|\tilde{m}\rangle$  i svojstvene energije  $E_{\tilde{m}}$  kao aproksimaciju egzaktnih stanja koja su preko hamiltonijana međudjelovanja značajnije povezana s početnim stanjem  $|n\rangle$ .

Ovakav pristup konstrukciji reducirane baze ima izravne poveznice s Rayleigh-Schrödingerovom perturbacijskom teorijom [52] jer se u izrazu (4.10) pojavljuje energija  $\tilde{E}_0^0$  početnog stanja nulte generacije. Nadalje, pogledaju li se prve tri korekcije Rayleigh-Schrödingerove perturbacijske teorije za stanje  $|n^{(0)}\rangle$  [53]

$$|n^{(1)}\rangle = \frac{V_{k_1 n}}{E_{nk_1}} |k_1^{(0)}\rangle, \quad (4.11)$$

$$|n^{(2)}\rangle = \left( \frac{V_{k_1 k_2} V_{k_2 n}}{E_{nk_1} E_{nk_2}} - \frac{V_{nn} V_{k_1 n}}{E_{nk_1}^2} \right) |k_1^{(0)}\rangle - \frac{1}{2} \frac{V_{nk_1} V_{k_1 n}}{E_{k_1 n}^2} |n^{(0)}\rangle, \quad (4.12)$$

$$\begin{aligned} |n^{(3)}\rangle = & \left[ -\frac{V_{k_1 k_2} V_{k_2 k_3} V_{k_3 n}}{E_{k_1 n} E_{nk_2} E_{nk_3}} + \frac{V_{nn} V_{k_1 k_2} V_{k_2 n}}{E_{k_1 n} E_{nk_2}} \left( \frac{1}{E_{nk_1}} + \frac{1}{E_{nk_2}} \right) - \right. \\ & \left. - \frac{|V_{nn}|^2 V_{k_1 n}}{E_{k_1 n}^3} + \frac{|V_{nk_2}|^2 V_{k_1 n}}{E_{k_1 n} E_{nk_2}} \left( \frac{1}{E_{nk_1}} + \frac{1}{2E_{nk_2}} \right) \right] |k_1^{(0)}\rangle + \\ & + \left[ -\frac{V_{nk_2} V_{k_2 k_1} V_{k_1 n} + V_{k_2 n} V_{k_1 k_2} V_{nk_1}}{2E_{nk_2}^2 E_{nk_1}} + \frac{|V_{nk_1}|^2 V_{nn}}{E_{nk_1}^3} \right] |n^{(0)}\rangle, \end{aligned} \quad (4.13)$$

gdje su uvedene pokrate  $V_{nm} \equiv \langle n^{(0)} | \hat{H}_I | m^{(0)} \rangle$  i  $E_{nm} = E_n^{(0)} - E_m^{(0)}$  te se podrazumijeva sumacija po indeksima  $k_1$ ,  $k_2$  i  $k_3$ , vidljivo je da ARB do trećega reda obuhvaća sve ove popravke, s razlikom da ih ARB uzima egzaktno kada su one rezonantne dok ih Rayleigh-Schrödingerova teorija uzima samo perturbativno.

U ovome radu za konstrukciju reducirane baze koristi se dodatni rezonantni uvjet, sličan onome (4.10) gdje se u nazivniku umjesto energije  $\tilde{E}_0^0$  početnog stanja nulte generacije nalazi energija stanja  $G - 1$  generacije. Uz takav dodatni rezonantni uvjet ARB obuhvaća i većinu korekcija viših redova Rayleigh-Schrödingerove perturbacijske teorije za dano početno stanje.

Valja primijetiti da slučaj  $R = 0$  odgovara ED bez aproksimacija, što je pristup primjenjiv za sustave do  $L = 16$ . Nasuprot tome, ARB može 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 se onda ujedno mogu proučavati i sustavi s većom linearnom dimenzijom ( $L > 16$ ).

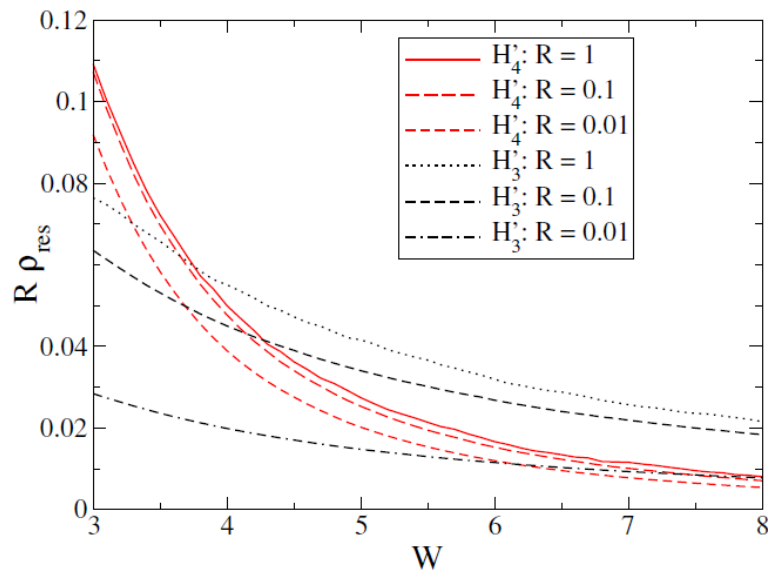
#### 4.4 Statistika rezonanci

Praktično pitanje koje se postavlja jest koji su dijelovi hamiltonijana međudjelovanja,  $\hat{H}_I^3$  ili  $\hat{H}_I^4$ , važniji prilikom konstrukcije reducirane baze? Kako je rigorozna analitička analiza matričnih elemenata u izrazima (4.8) i (4.9) vrlo zahtjevna, pogodno je osloniti se na numeričku evaluaciju njihove statistike [54].

Na slici 4.1 prikazani su numerički rezultati za prosječan broj rezonanci  $\rho_{res}$  po jednom stanju u reduciranoj bazi, reskaliran s  $R$ , kao funkcija nereda  $W$ ,

$$R\rho_{res} = \frac{R}{L} \int_R^\infty dr f(r, W), \quad (4.14)$$

gdje je  $f(r, W)$  distribucija rezonanci prema njihovoj jačini,  $r > R \sim 1$ . Može se



Slika 4.1: Gustoća rezonanci  $\rho_{res}$  po jednom stanju u reduciranoj bazi reskalirana s  $R$ , prikazana odvojeno za  $\hat{H}_I^3$  (crna boja) i  $\hat{H}_I^4$  (crvena boja) član. Preuzeto iz [54].

vidjeti da se sa smanjivanjem nereda gustoća rezonanci brzo povećava, što je odraz ergodičnog ponašanja sustava na malim neredima. U suprotnoj granici jakog nereda gustoća rezonanci postaje mala, što povlači da su jake rezonance koje zadovoljavaju uvjet (4.10) rijetke kombinacije određenih matričnih elemenata i razlika energija jednočestičnih Andersonovih stanja. Za te jake rezonance skaliranje s  $R$  na

slici 4.1 ukazuje na  $\rho_{res} \sim 1/R$ , odnosno da je gustoća rezonanci dana dugim repom distribucijske funkcije  $f(r, W)$  koja se asimptotski ponaša kao  $f(r, W) \sim r^{-\zeta}$ ,  $\zeta \approx 2$ . Konačno, slika 4.1 ukazuje da u granici slabe lokalizacije, mali  $W$ , najrelevantniji doprinosi rezonancama dolaze od  $\hat{H}_I^4$  dijela hamiltonijana, odnosno dvostrukog čestično-šupljinskog pobuđenja. S druge strane, u granici jakog nereda gustoća rezonanci je uvijek veća za  $\hat{H}_I^3$  član. Zanimljivo, statistika rezonanci ne mijenja se niti na kvalitativan niti na kvantitativan način isključi li se Hartree-Fockova korekcija energija mnogočestičnih Andersonovih stanja (4.7).

Naposljetku, valja naglasiti da je dominantan oblik rezonanci oblik u kojemu su stanja u izrazu (4.10) daleko (blizu) u realnom prostoru, s malom (velikom) razlikom energija. Ovo je zapravo rezultat koji slijedi Mottov argument [43]. Analogija je jednostavna budući da se svakom lokaliziranom stanju može jednoznačno pridružiti čvor s maksimalnom gustoćom valne funkcije, slika 3.1. Sukladno tome, i vrijednost matričnog elementa raste kako su stanja bliže u prostoru, pa se može reći da su tipične rezonance one s malim (velikim) matričnim elementom i malom (velikom) razlikom energija.

## 5 Korelacijska funkcija gustoće

U ovom poglavlju detaljno je razmatrana korelacijska funkcija gustoće te je uvedena krutost kao dugovremenski limit odgovarajuće vremenske korelacijske funkcije. Opisana je veza između krutosti i ergodičnosti sustava te je krutost gustoće naboja raspravljana u kontekstu MBL faze. U raspravi rezultata prvo su prikazani rezultati za krutost gustoće naboja na pojedinom čvoru rešetke u formalnoj granici beskonačne temperature te su na temelju tih rezultata iznijeti neki zaključci o svojstvima lokalizirane faze. Zatim su krutosti gustoće naboja proučavane u ARB za različite vrijednosti jačine nereda  $W$  te je pomoću dobivenih vrijednosti dugovremenskih korelacijskih funkcija ispitana konvergentnost ARB i njezini različiti aspekti ponašanja u različitim parametarskim režimima. Dalje je uveden aproksimativni model hamiltonijana čiji se fazni dijagram kvalitativno ne razlikuje od faznog dijagrama punog MBL hamiltonijana, te su u ARB na aproksimativnom modelu hamiltonijana računane srednje krutosti gustoće naboja sustava velikih linearnih dimenzija,  $L \leq 40$ , što je omogućilo sigurniju raspravu o skaliranju rezultata na termodinamičku granicu.

### 5.1 Korelacijske funkcije i krutosti

Sasvim općenito, korelacijske funkcije opisuju međusobnu prostornu i vremensku povezanost mikroskopskih varijabli [55]. Uobičajeno ih je definirati kao termodinamički prosjek produkta dvaju operatora  $\hat{A}$  i  $\hat{B}$  na pozicijama  $\mathbf{r}'$  i  $\mathbf{r}' + \mathbf{r}$  te vremenima  $t'$  i  $t' + t$

$$\langle \hat{A}(\mathbf{r}', t') \hat{B}(\mathbf{r}' + \mathbf{r}, t' + t) \rangle = \frac{1}{Z} \text{Tr} \left[ \hat{A}(\mathbf{r}', t') \hat{B}(\mathbf{r}' + \mathbf{r}, t' + t) \right], \quad (5.1)$$

gdje je  $Z$  particijska funkcija te  $\langle \cdot \rangle$  označava spomenuto termodinamičko usrednjavanje. Ukoliko još operatori  $\hat{A}$  i  $\hat{B}$  predstavljaju jednu te istu mikroskopsku varijablu, takva korelacijska funkcija naziva se autokorelacijska funkcija.

U ovom radu detaljnije će se proučavati vremenski ovisne korelacije, formalno u granici beskonačne temperature,  $T \rightarrow \infty$ . Tada termodinamički prosjek obuhvaća sva stanja sustava s jednakom vjerojatnošću pa se izraz (5.1) svodi na usrednjavanje

po svim stanjima

$$\langle \hat{A}(t') \hat{B}(t' + t) \rangle = \frac{1}{N_{tot}} \sum_{n=1}^{N_{tot}} \langle n | \hat{A}(t') \hat{B}(t' + t) | n \rangle, \quad (5.2)$$

gdje je  $N_{tot}$  ukupni broj stanja  $|n\rangle$ . Valja primijetiti da se u izrazu (5.2) pojavljuju  $t$  i  $t'$ . No u konačnici će biti od interesa promatrati samo korelacije na dugim vremenskim skalama kako bi se razlikovala ergodična ponašanja od onih neergodičnih, svojstvenih MBL fazi kada se pojedine veličine ne relaksiraju niti na dugim vremenima. Promatrati će se zato vremenska usrednjenja bez eksplicitne ovisnosti o početnom trenutku. Odnosno, promatrati će se vremenski ovisna korelacijska funkcija dana formalno s

$$C_{AB}(t) = \lim_{\tau' \rightarrow \infty} \frac{1}{\tau'} \int_0^{\tau'} dt' \frac{1}{N_{tot}} \sum_{n=1}^{N_{tot}} \langle n | \hat{A}(t') \hat{B}(t' + t) | n \rangle, \quad (5.3)$$

gdje vremensko usrednjenje podrazumijeva duge vremenske skale  $\tau'$  za koje konkretno početno vrijeme  $t'$  ne igra nikakvu ulogu.

Uz pretpostavku da su stanja sustava bez degeneracije, za vremenski ovisni operator može se pisati

$$\hat{A}(t) = \sum_{n,m} |n\rangle A_{nm} \langle m| e^{i(E_m - E_n)t}, \quad (5.4)$$

gdje je  $E_n$  energija stanja  $|n\rangle$  i  $A_{nm}$  matrični element  $\langle n | \hat{A} | m \rangle$ , pa se za korelacijsku funkciju (5.3), kao što je pokazano u dodatku C, dobiva

$$C_{AB}(t) = \frac{1}{N_{tot}} \sum_{n,m=1}^{N_{tot}} A_{nm} B_{mn} e^{i(E_n - E_m)t}. \quad (5.5)$$

Posebice, zanimati će nas takozvana krutost  $D_{AB}$ , koja odgovara granici vremenskog usrednjenja korelacijske funkcije  $C_{AB}(t)$

$$\begin{aligned} D_{AB} &= \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{\tau} \int_0^{\tau} dt C_{AB}(t) \\ &= \frac{1}{N_{tot}} \sum_{n=1}^{N_{tot}} A_{nn} B_{nn}, \end{aligned} \quad (5.6)$$

gdje se podrazumijeva  $\tau \gg \tau' \gg 1/t_p$ , odnosno da se u odnosu na početni trenutak korelacije mjere na jako dugim vremenskim skalama.

Ovakvo uvedena krutost može poslužiti kao indikator neergodičnosti sustava. Naime, ukoliko su operatori  $\hat{A}$  i  $\hat{B}$  lokalni i vrijedi  $\langle \hat{A} \rangle = 0$  ili  $\langle \hat{B} \rangle = 0$ , te  $\langle \hat{A}\hat{H} \rangle = 0$  ili  $\langle \hat{B}\hat{H} \rangle = 0$ , neiščezavajuća vrijednost krutosti,  $D_{AB} \neq 0$ , ukazuje na postojanje kvazilokalne sačuvane veličine u dinamici sustava koja se ne relaksira. Drugim riječima, informacija o početnom stanju sustava ostaje sačuvana čak i na jako dugim vremenskim skalama, odnosno sustav se ponaša neergodično.

## 5.2 Krutost gustoće naboja i MBL faza

Izborom  $\hat{A} = \hat{B} = \delta\hat{n}_i = \hat{n}_i/\bar{n} - 1$  gdje je  $\hat{n}_i$  operator gustoće naboja na čvoru  $i$  te  $\bar{n}$  srednja gustoća naboja sustava, dobiva se korelacijska funkcija krutosti nabojnih stupnjeva slobode. Dugovremenska autokorelacija naboja na pojedinom čvoru dana je s

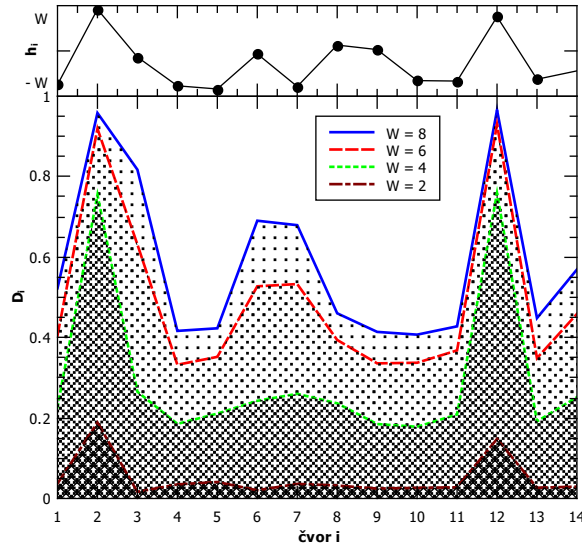
$$D_i = \frac{1}{N_{tot}} \sum_{n=1}^{N_{tot}} [(\delta n_i)_{nn}]^2, \quad 0 \leq D_i \leq 1. \quad (5.7)$$

Valja primijetiti da je ovakva krutost  $D_i$  analogna Edwards-Andersonovom parametru uređenja [56]. Ovaj parametar uređenja obično se analizira u kontekstu staklastih faznih prijelaza.

Općenito se očekuje da će u ergodičnoj fazi nakon dovoljno dugog vremena zbog međudjelovanja između čestica doći do relaksacije i zaboravljanja početnih rubnih uvjeta, te će kao rezultat toga na svim čvorovima rešetke vjerojatnost preko dugih vremenskih skala da su čvorovi zauzeti ili prazni biti jednaka i neovisna o zauzetosti u početnom vremenskom trenutku,  $\langle \hat{n}_i \rangle = \bar{n}$ . Drugim riječima, za ergodične sustave krutost (5.7) iščezava. S druge strane, konačnost krutosti gustoće naboja,  $0 < D_i \leq 1$ , signalizira da nabojni stupnjevi slobode i nakon dugog vremena ostaju korelirani s početnom konfiguracijom raspodjele naboja na pojedinim čvorovima. Ovakvo neergodično ponašanje odgovara MBL fazi [30, 31].

Kako bi proučili svojstva dugovremenskih korelacija naboja (5.7) modela (3.8) za različite vrijednosti nereda, na slici 5.1 prikazan je rezultat vezan uz termalni prosjek krutosti gustoće naboja na beskonačnoj temperaturi  $D_i$  za nered  $W = 2 - 8$  jednakih prostornih konfiguracija  $h_i/W$  dobiven ED. Sa slike 5.1 vidi se da usrednjeni  $D_i$  po svim stanjima i u granici beskonačne temperature pokazuje znatnu ovisnost o čvoru rešetke, čak štoviše, da postoji jasna prostorno ovisna veza između konfiguracije nereda  $h_i$  i vrijednosti krutosti gustoće naboja  $D_i$ , što je ponašanje koje susrećemo i

kod staklastih stanja [56]. Konkretno, čvorovi  $i = 2, 12$  s izraženim maksimumima krutosti gustoće naboja odvojeni su velikom energetskom barijerom  $\Delta h \sim 2W$  od susjednih čvorova ( $i \pm 1$ ). Ukupno, izgleda kao da se krutost gustoće naboja  $D_i$  monotonno skalira s jačinom nereda  $W$ . Ovakvo ponašanje očituje se na svim vrijednostima nereda i sugerira kontinuirani prijelaz iz ergodične u neergodičnu MBL 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. Posebice, od interesa je proučiti što se događa u sustavima velikih linearnih dimenzija ( $L > 16$ ) pa je potrebno pogledati izraze za korelacijske funkcije i krutosti u ARB.



Slika 5.1: Krutost gustoće naboja na pojedinom čvoru u granici beskonačne temperature (5.7) izračunata egzaktno za različite vrijednosti nereda  $W = 2 - 8$  uz fiksnu prostornu konfiguraciju nereda  $h_i/W$ .

### 5.3 Korelacijske funkcije i krutosti u ARB

U kontekstu ARB termodinamički prosjek u izrazu za vremenski ovisnu korelacijsku funkciju (5.2) uključuje uprosječivanje po (znatno) manjem broju stanja reducirane baze

$$\langle \hat{A}(t') \hat{B}(t' + t) \rangle \simeq \frac{1}{N_{st}} \sum_{n=1}^{N_{st}} \langle n | \hat{A}(t') \hat{B}(t' + t) | n \rangle, \quad (5.8)$$

gdje sada za razliku od stanja  $|\tilde{m}\rangle$ , mnogočestična Andersonova stanja  $|n\rangle$  nisu svojstvena stanja punog MBL hamiltonijana (3.8). Međutim, stanja  $|n\rangle$  još uvijek mogu poslužiti kao prikladna stanja za izvrijednjavanje termodinamičkog prosjeka.



Pretpostavljajući i dalje da je spektar mnogočestičnih stanja bez degeneracija za vremenski usrednjenu korelacijsku funkciju u ARB se dobiva

$$C_{AB}(t) = \frac{1}{N_{st}} \sum_{\substack{n=1 \\ \tilde{m}}}^{N_{st}} |\langle n|\tilde{m}\rangle|^2 A_{\tilde{m}\tilde{l}} B_{\tilde{l}\tilde{m}} e^{i(E_{\tilde{m}}-E_{\tilde{l}})t}, \quad (5.9)$$

odnosno za krutost

$$D_{AB} = \frac{1}{N_{st}} \sum_{\substack{n=1 \\ \tilde{m}}}^{N_{st}} |\langle n|\tilde{m}\rangle|^2 A_{\tilde{m}\tilde{m}} B_{\tilde{m}\tilde{m}}, \quad (5.10)$$

što se u slučaju uprosječivanja po svim stanjima  $|n\rangle$  zbog svojstva potpunosti baze svodi na izraz (5.6) Podrobnosti izvoda nalaze se u dodatku C. Konkretno, dugovremenska autokorelacija naboja na pojedinom čvoru (5.7) u ARB dana je s

$$D_i = \frac{1}{N_{st}} \sum_{\substack{n=1 \\ \tilde{m}}}^{N_{st}} |\langle n|\tilde{m}\rangle|^2 [(\delta n_i)_{nn}]^2. \quad (5.11)$$

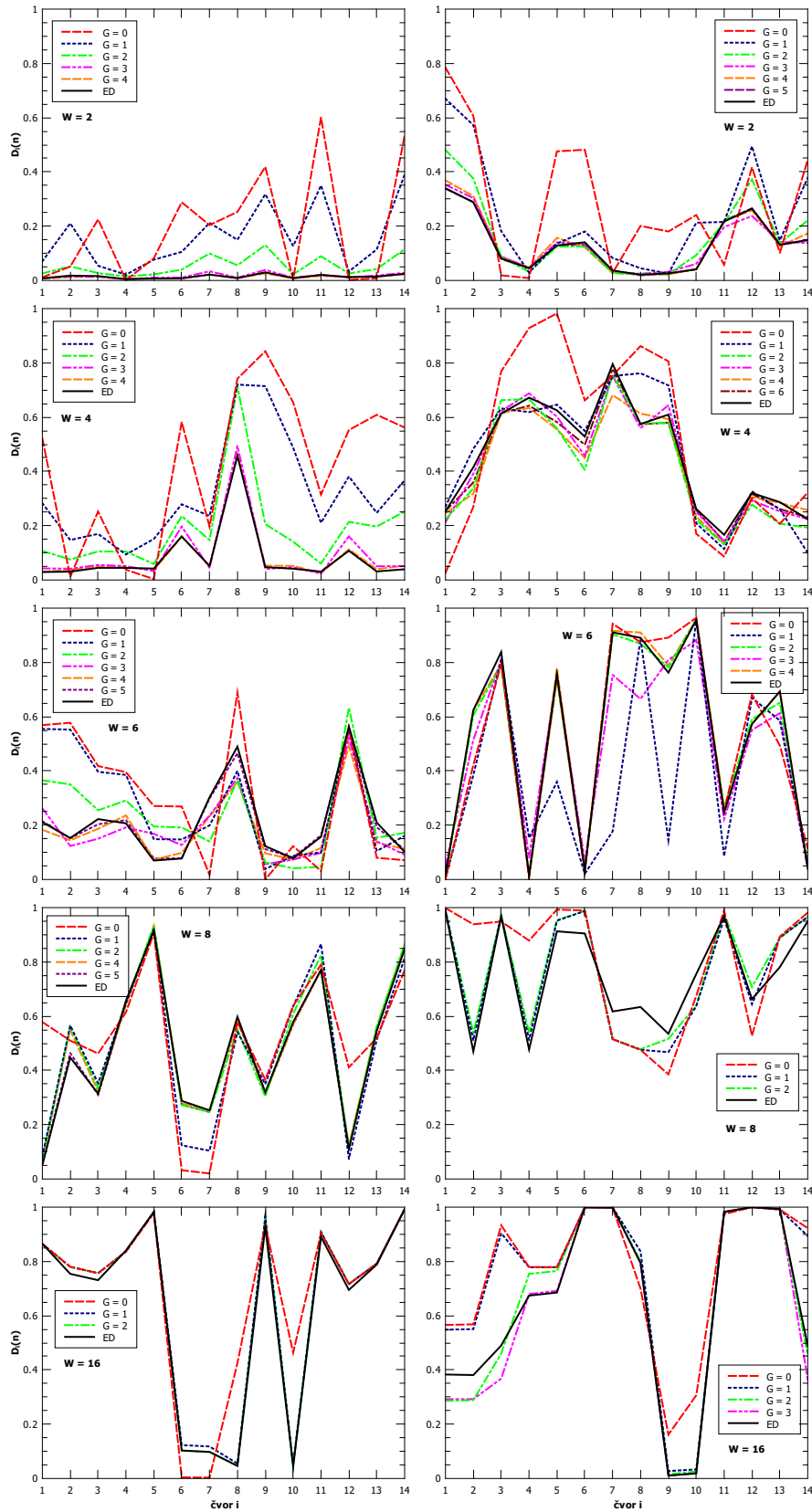
Treba primijetiti da doprinosi za dugovremensko ponašanje ovise izravno o preklapu s početnim stanjem  $|n\rangle$ , odnosno samo svojstvena stanja sustava s velikim preklapom na to početno stanje  $|n\rangle$  će znatnije doprinositi u izrazu (5.10). To je upravo u duhu izbora relevantnih stanja unutar opisane metode reducirane baze jer se u nultoj generaciji kreće od nekog danog stanja  $|n\rangle$ . Drugim riječima, ARB bi trebala dati vrlo dobru aproksimaciju dugovremenskog ponašanja pojedinih korelacijskih funkcija, odnosno za ponašanje krutosti dane izrazom (5.10), a nakon uprosječivanja po svim mnogočestičnim Andersonovim stanjima i za egzaktnu krutost (5.6).

#### 5.4 Krutost gustoće naboja i konvergencija ARB

Konvergentnost ARB ispitana je promatranjem krutosti gustoće naboja na pojedinom čvoru bez usrednjavanja po neredu, odnosno stanjima  $|n\rangle$

$$D_i(n) = \sum_{\tilde{m}} |\langle n|\tilde{m}\rangle|^2 [(\delta n_i)_{\tilde{m}\tilde{m}}]^2. \quad (5.12)$$

Na slici 5.2 prikazane su krutosti gustoće naboja (5.12) dobivene u ARB uz vrijednost parametra  $R^2 = 0.01$  u izrazu (4.10). Ova vrijednost parametra  $R$  korištena je u svim daljnjim rezultatima ovoga rada. Slika 5.2 daje jasan uvid u konvergentnost ARB. U



Slika 5.2: Krutosti gustoće naboja na pojedinom čvoru (5.12) izračunata unutar ARB za različite vrijednosti i konfiguracije nereda  $W = 2 - 16$ . Uvjet rezonancije je postavljen na  $R^2 = 0.01$  te  $G$  označava broj generacije. Dobiveni rezultati uspoređeni su s egzaktним vrijednostima (crna linija).

lijevom stupcu prikazani su primjeri s tipičnim ponašanjem krutosti gustoće naboja kroz generacije. Već se u četvrtoj generaciji,  $G = 4$ , aproksimativni rezultati vrlo dobro slažu s egzaktnima. Ono što također treba primijetiti za male neredne je kako je konvergencija ARB monotona, svaki puta podrazumijevajući sve 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 vrlo jake neredne,  $W = 16$ , vrlo dobro slaganje s egzaktnim rezultatima može se dobiti već s malim brojem stanja i u niskim generacijama, što samo po sebi ukazuje na neergodičnu dinamiku sustava na dugim vremenskim skalama.

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. Primjeri takvih slučajeva posebno su izdvojeni i mogu se vidjeti u drugom stupcu slike 5.2, pri čemu se mogu razlikovati dva tipa netipičnog ponašanja. Prvi tip karakterizira veliko odstupanje od monotone konvergencije u jednoj generaciji, kao primjerice na slici 5.2 treća generacija za nered  $W = 6$  i četvrta generacija za nered  $W = 4$ , dok je za drugi tip specifično da korelacijska funkcija na pojedinim čvorovima iskazuje odstupanja i za veće  $G$ , kao na slici 5.2 za slučajeve  $W = 8, 16$ . No istovremeno ovdje treba posebno naglasiti kako pojava netipičnih ponašanja nije vezana za neko kvalitativno fizikalno odstupanje. Naime, pažljiviji uvid pokazuje da odstupanja nastaju kada ARB ne uspijeva obuhvatiti ili krivo određuje vrlo osjetljivi (rezonantni) međuodnos između jednog do dva stanja posebno relevantna za dugovremensku dinamiku sustava. Posebice, kao što ćemo vidjeti u nastavku, odstupanja ne utječu bitno na usrednjenu vrijednost srednje krutosti gustoće naboja po velikom broju konfiguracija nereda kao osnovnog parametra koji karakterizira globalnu ergodičnost sustava. Štoviše, ovakva odstupanja u pojedinim generacijama mogu se pojaviti i u slučajevima kada je rezonantni parametar postavljen na  $R = 0$ .

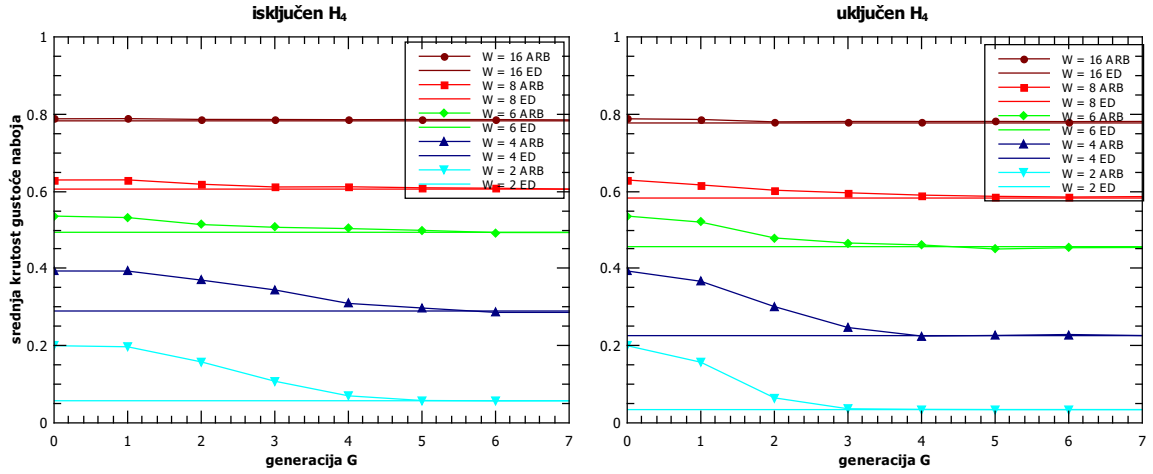
## 5.5 *Aproksimativni model hamiltonijana međudjelovanja*

U potpoglavlju 4.4 proučavana je gustoća rezonanci te je ustanovljeno da na jakim neredima dominantan doprinos raspršenjima dolazi od  $\hat{H}_I^3$  dijela hamiltonijana. Nadalje, djelovanje  $\hat{H}_I^3$  člana pruža jednostavni uvid u praćenje fizikalnih procesa koji

se odvijaju prilikom konstrukcije reducirane baze budući da  $\hat{H}_I^3$  u svakoj generaciji doprinosi samo jednim čestično-šupljinskim pobuđenjem. Korisno je stoga usporediti ponašanje srednje krutosti gustoće naboja

$$\bar{D}(n) = \frac{1}{L} \sum_{i=1}^L D_i(n), \quad (5.13)$$

usrednjene preko mnogo konfiguracija nereda budući da krutost gustoće naboja na pojedinom čvoru može ovisiti o konkretnoj realizaciji nereda, koja karakterizira globalnu ergodičnost sustava s i bez  $\hat{H}_I^4$  člana gdje u drugom slučaju postoji izravna veza između generacija i najvećeg broj stvorenih čestica-šupljina parova.



Slika 5.3: Srednja krutost gustoće naboja (5.13) sustava linearne dimenzije  $L = 14$  za različite vrijednosti nereda  $W$  usrednjena preko 128 konfiguracija nereda. Srednja krutost gustoće naboja računata je u dva modela, s i bez  $\hat{H}_I^4$  dijela hamiltonijana, gdje se vidi da oba modela vode na isto kvalitativno ponašanje srednje krutosti gustoće naboja. Unutar ta dva modela također su uspoređivane aproksimativne s  $R^2 = 0.01$  i egzaktne vrijednosti srednje krutosti gustoće naboja.

Na slici 5.3 prikazana je srednja krutost gustoće naboja (5.13) usrednjena preko 128 konfiguracija nereda u dva različita modela, s i bez  $\hat{H}_I^4$  dijela hamiltonijana, te su unutar ta dva modela uspoređivane egzaktne vrijednosti krutosti gustoće naboja i aproksimativne vrijednosti u ARB. Sa slike 5.3 je jasno da srednja krutost gustoće naboja pokazuje kvalitativno, a na višim neredima i kvantitativno isto ponašanje u slučajevima kada je  $\hat{H}_I^4$  dio hamiltonijana isključen i uključen, s razlikom da na manjim neredima kada očekujemo ergodično ponašanje sustava, aproksimacija nešto brže konvergira s uključenim  $\hat{H}_I^4$  članom, budući da se tada po generaciji generira više stanja. Stoga je za istraživanje lokalizirane faze na jakim neredima i prijelaza

u nju dovoljno raditi s  $\hat{H}_I^3$  doprinosima, odnosno fazni dijagram s takvim modelom se kvalitativno neće razlikovati od modela u kojemu su oba člana,  $\hat{H}_I^3$  i  $\hat{H}_I^4$ , uzeta u obzir. Iz tog razloga je u daljnjoj raspravi rezultata korišten model u kojemu su raspršenja u potpunosti opisana s  $\hat{H}_I^3$  dijelom hamiltonijana gdje onda broj  $G$  jednoznačno definira maksimalni broj pobuđenih elektron-šupljina parova u odnosu na početno stanje.

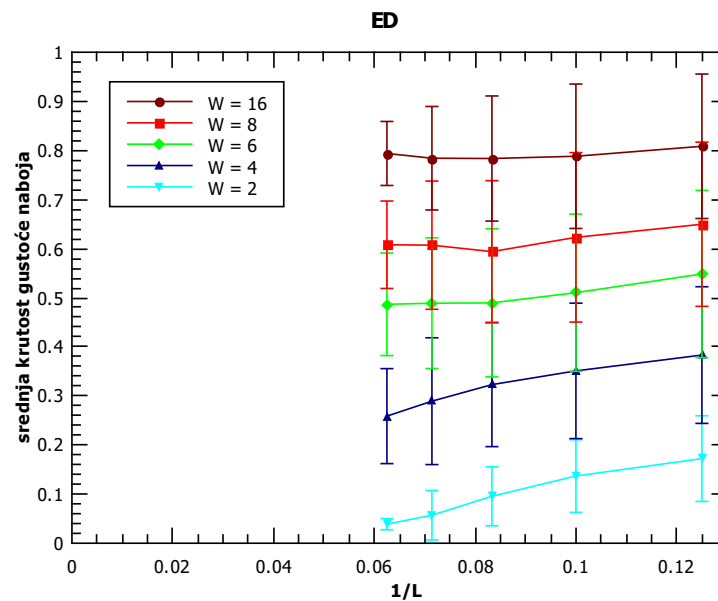
Rezultati na slici 5.3 također mogu poslužiti za ocjenu konvergentnosti aproksimacije. Iako za pojedinu konfiguraciju nereda, odnosno bez uprosječivanja po početnim stanjima, slika 5.2, u pojedinim generacijama može doći do odstupanja vrijednosti krutosti gustoće naboja, odnosno ARB ne konvergira monotono, uprosječena vrijednost srednje krutosti gustoće naboja na slici 5.3 monotono konvergira egzaktnim vrijednostima. To sugerira da su ranije spomenuta odstupanja zapravo slučajna i rijetka, pa njihov učinak nakon uprosječivanja rezultata po velikom broju uzoraka nestaje. Nadalje, na jakim neredima egzaktne vrijednosti srednje krutosti gustoće naboja mogu se dobiti već u vrlo niskoj generaciji. Kako je upravo uprosječena vrijednost srednje krutosti gustoće naboja osnovni parametar koji karakterizira ergodičnost sustava, može se reći da ARB najčešće, zbog malog srednjeg broja rezonanci, već u niskom redu može obuhvatiti sve relevantne procese za opis MBL faze.

## 5.6 Skaliranje s linearnom dimenzijom sustava

Krajnji je cilj ovoga rada ispitati svojstva sustava velikih linearnih dimenzija ( $L > 16$ ) s obzirom na svojstvo ergodičnosti, što bi omogućilo bolje razumijevanje i predviđanje ponašanja rezultata u termodinamičkoj granici. Za početak je korisno pogledati ponašanje srednje krutosti gustoće naboja usrednjene preko velikog broja konfiguracija nereda u ovisnosti o inverzu linearne dimenzije sustava dobiveno ED do  $L = 16$ , slika 5.4. Prikazane pogreške odgovaraju standardnoj devijaciji.

Za slabi nered,  $W = 2$ , na slici 5.4 izgleda da se vrijednost srednje krutosti gustoće naboja sve više smanjuje kako se linearna dimenzija sustava povećava. Slično ponašanje očituje se i za nered  $W = 4$ , no nedostatak informacije o ponašanju srednje krutosti gustoće naboja u sustavima većih linearnih dimenzija onemogućuje donošenje zaključka o konačnom skaliranju rezultata za manje neredne. Konkretno,

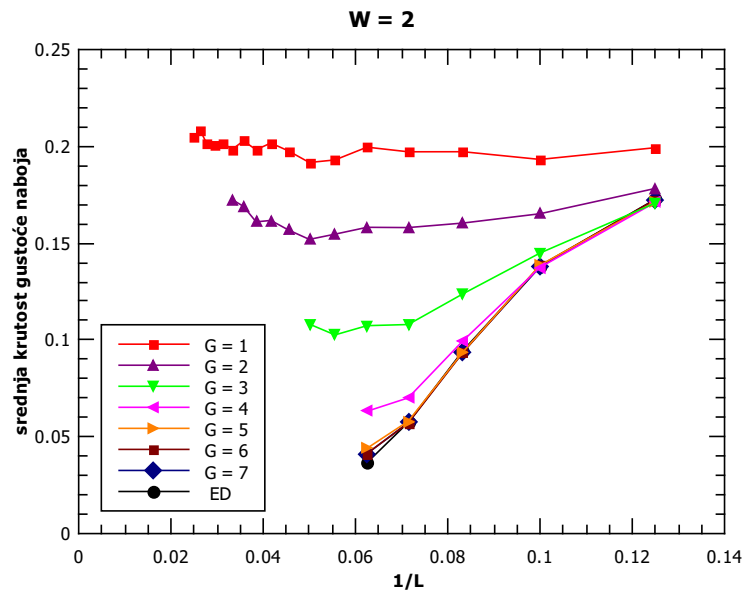
iščezava li srednja krutost gustoće naboja za manje nereda u termodinamičkoj granici ili ostaje mala, ali ipak konačna. S druge strane, ponašanje srednje krutosti gustoće naboja na većim neredima,  $W = 6 - 16$ , sugerira da njena vrijednost ostaje konačna i za sustave velikih linearnih dimenzija. Tome ide u prilog i ponašanje standardne devijacije na slici 5.4, gdje je vidljivo da se njena vrijednost unatoč velikoj fluktuaciji srednje krutosti gustoće naboja od uzorka do uzorka sve više smanjuje kako linearna dimenzija sustava raste, što sugerira da je njena srednja vrijednost sve točnije određena kako  $L$  raste. Međutim, ovi rezultati dobiveni su ipak na sustavima manjih linearnih dimenzija kada su i standardne devijacije razmjerno velike zbog čega je posebno zanimljivo razmotriti sustave većih linearnih dimenzija. Stoga je u nastavku korištena ARB u svrhu ispitivanja ponašanja srednje krutosti gustoće naboja i sustava većih linearnih dimenzija.



Slika 5.4: Srednja krutost gustoće naboja usrednjena preko 128 konfiguracija nereda dobivena ED do  $L = 16$  za različite vrijednosti nereda  $W$  u ovisnosti o inverzu linearne dimenzije sustava. Prikazane pogreške odgovaraju standardnoj devijaciji.

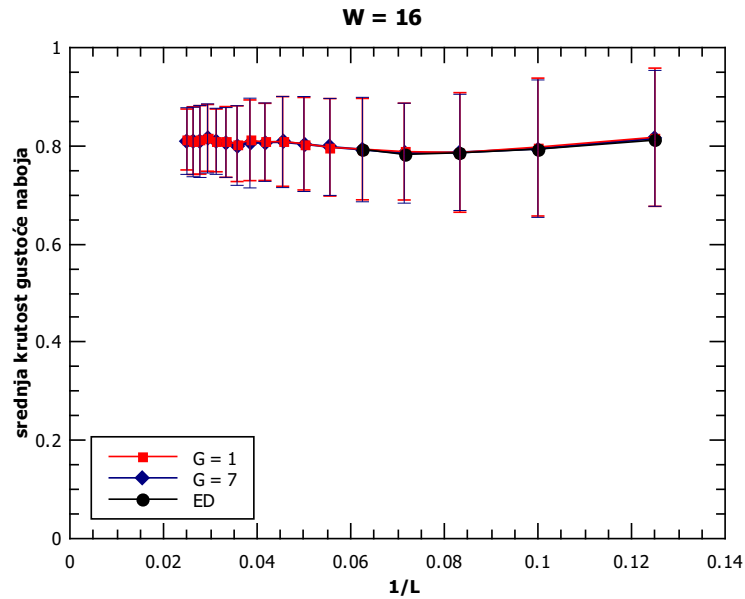
Srednja krutost gustoće naboja na slici 5.4 pokazuje kvalitativno različito ponašanje na malim i velikim neredima. Iz tog razloga, promatrani su rezultati koje ARB daje za dva ekstremna nereda,  $W = 2$  i  $W = 16$ . Slučaj  $W = 2$  prikazan je na slici 5.5 gdje se može pratiti ponašanje srednje krutosti gustoće naboja usrednjene preko 128 konfiguracija nereda u ovisnosti o inverzu linearne dimenzije sustava kroz sedam generacija. Za fiksnu generaciju  $G$  maksimalni  $L$  određen je maksimalnim brojem stanja reducirane baze dostupnim numeričkim simulacijama.

Sa slike 5.5 vidimo da se trend egzaktnih rezultata reproducira nakon četvrte generacije. Međutim, za sustave velikih linearnih dimenzija s malim neredom broj stanja u petoj generaciji postaje toliko velik da je reducirana baza usporediva s potpunim skupom stanja. Ovo ima jednostavnu fizikalnu interpretaciju. Krećući od baze lokaliziranih mnogočestičnih Andersonovih stanja, za opis ergodičnih svojstvenih stanja na manjim neredima potrebna je reducirana baza čiji je broj lokaliziranih mnogočestičnih Andersonovih stanja sumjerljiv s ukupnim brojem stanja. Stoga u slučaju malih nereda ARB ne pokazuje prednosti u ispitivanju dugovremenskih korelacija u sustavima velikih linearnih dimenzija. To je potpuno u skladu s očekivanjima, budući da je ARB predviđena za računanje dugovremenskih korelacija u jako lokaliziranim sustavima, odnosno u sustavima s velikim neredom.



Slika 5.5: Srednja krutost gustoće naboja usrednjena preko 128 konfiguracija nereda dobivena unutar ARB s  $R^2 = 0.01$  kroz sedam generacija za nered  $W = 2$ . Za fiksnu generaciju  $G$  maksimalni  $L$  određen je maksimalnim brojem stanja reducirane baze dostupnim numeričkim simulacijama.

Prednosti ARB dolaze do izražaja za veće neredne. Na slici 5.6 prikazana je srednja krutost gustoće naboja usrednjena preko 128 konfiguracija nereda u prvoj i sedmoj generaciji do  $L = 40$ , zajedno sa standardnim devijacijama te egzaktnim vrijednostima srednje krutosti gustoće naboja do  $L = 16$ . Dobiveni rezultati sugeriraju da se na velikom neredu vrijednost srednje krutosti gustoće naboja znatnije ne mijenja kako linearna dimenzija sustava raste, odnosno da ostaje konačna u termodinamičkoj granici. Također se može primijetiti da na velikom neredu obično već prva genera-

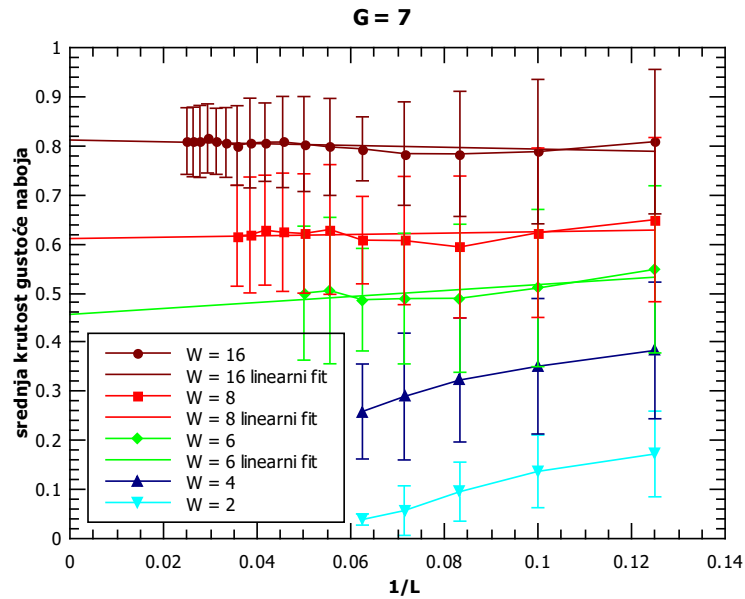


Slika 5.6: Srednja krutost gustoće naboja usrednjena preko 128 konfiguracija nereda dobivena unutar ARB s  $R^2 = 0.01$  u prvoj i sedmoj generaciji za nered  $W = 16$  do  $L = 40$ , zajedno s egzaktnim vrijednostima do  $L = 16$ . Prikazane pogreške odgovaraju standardnoj devijaciji.

cija daje vrlo dobro slaganje s egzaktnim rezultatima. Za usporedbu, na slici 5.6 su također nacrtane vrijednosti srednje krutosti gustoće naboja dobivene u sedmoj generaciji. Vidljivo je da su gotovo identične onima u prvoj generaciji, odnosno egzaktnim vrijednostima krutosti gustoće naboja do  $L = 16$ . To sugerira da bi se na višim neredima s ARB moglo računati srednju krutost gustoće naboja u vrlo niskom redu što bi omogućilo ispitivanje svojstava sustava još većih linearnih dimenzija. Ipak, treba imati na umu da ponekad dolazi i do odstupanja rezultata dobivenih u ARB, naprimjer netipična ponašanja na slici (5.2), gdje se pojavljuju rezonance koje krivo određuju fini međudnos stanja posebno relevantnih za dugovremensku dinamiku sustava pa se u tom slučaju nije dovoljno zadržati na prvoj generaciji, već se moraju uzeti u obzir i popravke višeg reda kako bi se na kraju njihov fini međudnos ispravno odredio.

Koristeći prednosti koje ARB pruža za proračun dugovremenskih korelacija u sustavima s velikim neredom, slika 5.4 može se nadopuniti vrijednostima srednje krutosti gustoće naboja sustava većih linearnih dimenzija ( $L > 16$ ). Skaliranje s nadopunjenim rezultatima prikazano je na slici 5.7. Vrijednosti srednje krutosti gustoće naboja do  $L = 16$  preuzete su sa slike 5.4, odnosno dobivene su ED, dok su vrijednosti za sustave većih linearnih dimenzija računane u sedmoj generaciji. Izuzev





Slika 5.7: Srednja krutost gustoće naboja usrednjena preko 128 konfiguracije nereda za različite vrijednosti nereda  $W$  u ovisnosti o inverzu linearne dimenzije sustava. Rezultati do  $L = 16$  dobiveni su ED, dok su srednje krutosti gustoće naboja za veće linearne dimenzije računane u sedmoj generaciji s  $R^2 = 0.01$ . Za fiksni nered  $W$  maksimalni mogući  $L$  određen je maksimalnim brojem stanja sedme generacije dostupan numeričkim simulacijama, izuzev slučaja  $W = 16$ , gdje su promatrani rezultati do  $L = 40$ . Rezultati na velikim neredima,  $W = 6 - 16$  skalirani su linearno na termodinamičku granicu. Prikazane pogreške odgovaraju standardnoj devijaciji.

nereda  $W = 16$  gdje su proučavani sustavi do  $L = 40$ , za ostale neredne maksimalni mogući  $L$  određen je maksimalnim brojem stanja sedme generacije koji je dostupan numeričkim simulacijama.

Na manjim neredima broj stanja očekivano vrlo brzo raste kroz generacije pa već za male linearne dimenzije broj stanja reducirane baze postaje sumjerljiv s ukupnim brojem stanja. Sukladno tome, za manje neredne ni ARB ne može proširiti egzaktne rezultate na veće linearne dimenzije. Međutim, kako nered raste tako se za fiksnu generaciju i fiksni  $L$  broj stanja reducirane baze smanjuje. Stoga se za veće neredne egzaktne rezultati mogu proširiti na nešto veće linearne dimenzije. Posebno, za nered  $W = 16$  egzaktne rezultati protegnuti su sve do  $L = 40$  gdje je vidljivo da vrijednost srednje krutosti gustoće naboja ostaje gotovo nepromijenjena kako linearna dimenzija sustava raste. Također i standardna devijacija sve više pada kako  $L$  raste, što sugerira da su usrednjene vrijednosti srednje krutosti gustoće naboja sve točnije određene. To omogućuje da se za sustave s velikim neredom može sigurnije raspravljati o skaliranju rezultata na termodinamičku granicu pa su rezultati za  $W = 6 - 16$

na slici 5.7 linearno skalirani prema  $L \rightarrow \infty$ . Rezultati linearnog skaliranja pokazuju da se vrijednost srednje krutosti gustoće naboja s neredom očekivano povećava, ali i da ostaje konačna kako  $L$  raste. S druge strane, na malom neredu,  $W = 2$ , izgleda da krutost gustoće naboja iščezava u granici  $L \rightarrow \infty$ . To sugerira na važan rezultat da između ova dva slučajeve postoji kritična vrijednost nereda  $W_c$  na kojoj i u termodinamičkoj granici dolazi do MBL prijelaza.

## 6 Zaključak

U ovom radu opisana je ARB u kontekstu računanja dugovremenskih korelacijskih funkcija u modelu mnogočestične lokalizacije. Prvi dio rezultata posvećen je numeričkom računu ispitivanja karakteristika ergodične i neergodične MBL faze. Konkretno, za mali nered u ergodičnoj fazi prosječna vrijednost dugovremenske korelacijske funkcije gustoće naboja, takozvana krutost gustoće naboja, nakon potpunog uprosječivanja na beskonačnoj temperaturi, odnosno po svim stanjima iščezava, dok u slučaju jakih nereda krutost gustoće naboja pokazuje jaku prostornu ovisnost koreliranu s konkretnom konfiguracijom nereda, što je ponašanje koje susrećemo i kod staklastih stanja.

Pažnja je također posvećena i svojstvima same ARB te je uočeno da u većini slučajeva dolazi do brze konvergencije rezultata po generacijama egzaktnim vrijednostima. To povlači da se već s malim brojem generacija ( $s$  procesima koji su u niskom redu u međudjelovanju  $V$ ), odnosno za jače neredove već s razmjerno malim brojem stanja, može 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 linearnih dimenzija. Stoga su egzaktni rezultati do  $L = 16$  za vrijednost srednje krutosti gustoće naboja nadopunjeni rezultatima ARB do većih linearnih dimenzija, te su za velike neredove rezultati linearnim fitom skalirani prema termodinamičkoj granici  $L \rightarrow \infty$ . Na manjim neredima izgleda da srednja krutost gustoće naboja iščezava u termodinamičkoj granici, dok rezultati linearnog skaliranja sugeriraju da vrijednost srednje krutosti gustoće naboja na velikim neredima ostaje konačna u granici  $L \rightarrow \infty$ , što signalizira pojavu MBL faze, odnosno MBL prijelaza na kritičnoj vrijednosti nereda  $W_c$  i u termodinamičkoj granici. Vrijedi spomenuti da su numeričke simulacije unutar ovoga rada za sustave s jakim neredom  $W = 16$  izvedene do linearne dimenzije  $L = 40$ , ali da na jakim neredima ARB aproksimacija može obuhvatiti čak i sustave s većom linearnom dimenzijom radi što sigurnije rasprave o skaliranju rezultata na termodinamičku granicu. Posebice, ovaj pristup može biti vrlo koristan i u kompliciranijim modelima, ponajprije u visokodimenzionalnim modelima.

# Dodaci

## Dodatak A Entropija prepletenosti

Sasvim općenito, rješavanje mnogočestičnog kvantnog problema svodi se na rješavanje hamiltonijana koji djeluje na nekom Hilbertovom prostoru stanja [32]. Često je od interesa početni kvantni sustav podijeliti na manje podsustave gdje je ukupni Hilbertov prostor stanja tenzorski produkt Hilbertovih prostora stanja manjih podsustava. Konkretno, ukoliko se sustav podijeli na samo dva dijela,  $A$  i  $B$ , ukupni Hilbertov prostor dekomponira se kao  $\mathcal{H} = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$ . Ukoliko se s druge strane vektor stanja ukupnog sustava ne može napisati kao produkt vektora stanja svakog od podsustava, kaže se da su podsustavi prepleteni.

Čisto kvantno stanje, uz pretpostavku da je normalizirano, u Hilbertovom prostoru  $\mathcal{H} = \mathcal{H}_A \otimes \mathcal{H}_B$  može se napisati u obliku

$$|\psi\rangle = \sum_{\alpha\beta} c_{\alpha\beta} |\alpha\rangle_A \otimes |\beta\rangle_B, \quad (\text{A.1})$$

gdje stanja  $|\alpha\rangle_A$  tvore ortonormiranu bazu u Hilbertovom prostoru  $\mathcal{H}_A$ , te stanja  $|\beta\rangle_B$  ortonormiranu bazu u Hilbertovom prostoru  $\mathcal{H}_B$ . Suma po indeksima  $\alpha$  i  $\beta$  obuhvaća sva stanja u oba Hilbertova prostora.

Schmidtovom dekompozicijom [32] stanje  $|\psi\rangle$  se može transformirati u formu oblika

$$|\psi\rangle = \sum_{\sigma=1}^{\mathcal{N}} \lambda_{\sigma} |\sigma\rangle_A \otimes |\sigma\rangle_B, \quad (\text{A.2})$$

gdje  $\mathcal{N}$  označuje dimenziju dimenzionalno manjeg Hilbertovog prostora  $\mathcal{H}_A$  ili  $\mathcal{H}_B$ . Stanja  $|\sigma\rangle_{A/B}$  tvore novi ortonormirani, ali ne nužno potpun skup stanja u  $\mathcal{H}_{A/B}$  povezan unitarnom transformacijom sa stanjima  $|\alpha\rangle_A, |\beta\rangle_B$ .  $\lambda_{\sigma}$  su nenegativni realni brojevi sa svojstvom  $\sum_{\sigma=1}^{\mathcal{N}} \lambda_{\sigma}^2 = 1$ . To omogućuje da se slično entropiji statističkog ansambla

$$S_B = -k_B \sum_i p_i \ln p_i, \quad (\text{A.3})$$

gdje je  $p_i$  vjerojatnost realizacije kvantnog stanja  $i$  [1], može uvesti entropija preple-

tenosti  $S$

$$S(|\psi\rangle) = - \sum_{\sigma=1}^{\mathcal{N}} \lambda_{\sigma}^2 \ln \lambda_{\sigma}^2, \quad (\text{A.4})$$

gdje je  $\lambda_{\sigma}^2$  vjerojatnost da se sustav nalazi u produktnom stanju  $|\sigma\rangle_A \otimes |\sigma\rangle_B$ , pa entropija prepletenosti daje mjeru prepletenosti dvaju podsustava  $A$  i  $B$  u stanju  $|\psi\rangle$ . Alternativno, entropija prepletenosti može se računati preko reducirane matrice gustoće [32]

$$S(|\psi\rangle) = - \text{Tr}_A (\rho_A \ln \rho_A), \quad \rho_A = \text{Tr}_B \rho, \quad \rho = |\psi\rangle \langle \psi|. \quad (\text{A.5})$$

Najmanja moguća vrijednost entropije prepletenosti jednaka je nuli, što odgovara slučaju kada je  $|\psi\rangle$  produktno stanje stanja podsustava  $A$  i  $B$ , odnosno kada podsustavi nisu prepleteni. S druge strane, maksimalna vrijednost entropije prepletenosti iznosi  $S = \ln \mathcal{N}$ , što odgovara slučaju kada se sustav s jednakom vjerojatnošću nalazi u bilo kojem produktnom stanju.

Umjesto samog računanja entropije prepletenosti nekog kvantnog stanja za fiksnu podjelu početnog sustava na manje podsustave, često je korisnije gledati kako se entropija prepletenosti mijenja kako se veličina jednog od podsustava smanjuje ili povećava. Konkretno, jednodimenzionalni sustav s  $L$  čvorova može se podijeliti na sljedeći način,  $A = 1, 2, \dots, l$  i  $B = l + 1, \dots, L$ , te se može računati entropija prepletenosti za  $l = 1, 2, \dots, L/2$ . Na taj način može se ispitati prepletenost podsustava  $A$  različitih dimenzija sa ostatkom sustava.

Uz pretpostavku da za kvantne sustave koji se termaliziraju vrijedi ETH za reduciranu matricu gustoće podsustava  $A$  vrijedi (2.4) što se aproksimativno svodi na

$$\rho_A \approx \frac{1}{Z'} e^{-\beta \hat{H}_A} \equiv e^{-\beta(\hat{H}_A - c)}, \quad (\text{A.6})$$

gdje je  $\hat{H}_A$  restrikcija punog hamiltonijana na podsustav  $A$ . U tom slučaju za entropiju prepletenosti vrijedi

$$S(|\psi\rangle) = - \text{Tr}_A (\rho_A \log \rho_A) \approx \beta \text{Tr}_A \left( \rho_A \left( \hat{H}_A - c \right) \right), \quad (\text{A.7})$$

što približno odgovara energiji podsustava  $A$ . Kako je energija ekstenzivna veličina ( $E \propto l^d$ , gdje je  $l$  linearna dimenzija podsustava  $A$ ), entropija prepletenosti svojstve-

nih stanja sustava u kojima dolazi do termalizacije skalira se s volumenom sustava

$$S(l) \propto l^d. \quad (\text{A.8})$$

S druge strane, MBL sustave karakterizira postojanje lokaliziranih stupnjeva slobode čije korelacije eksponencijalno trnu u prostoru, pa različiti stupnjevi slobode dvaju podsustava mogu biti prepleteni jedino ako su blizu u prostoru [45, 46]. Posljedica toga je da se entropija prepletenosti svojstvenih stanja MBL sustava skalira s površinom sustava

$$S(l) \propto l^{d-1}, \quad (\text{A.9})$$

što je tipično svojstvo osnovnog stanja hamiltonijana s procijepom [57], a koje se u MBL sustavu proteže na cijeli spektar.

## Dodatak B Struktura hamiltonijana međudjelovanja

Za hamiltonijan međudjelovanja gustoća naboja susjednih čvorova vrijedi

$$\hat{H}_I = V \sum_i \hat{n}_{i+1} \hat{n}_i = V \sum_i c_{i+1}^\dagger c_{i+1} c_i^\dagger c_i = V \sum_i c_i^\dagger c_{i+1}^\dagger c_{i+1} c_i, \quad (\text{B.1})$$

gdje su kod zadnje jednakosti za dovođenje operatora u ovaj redosljed korištene fermionske antikomutacijske relacije

$$\{c_i, c_j\} = 0, \quad \{c_i^\dagger, c_j^\dagger\} = 0, \quad \{c_i, c_j^\dagger\} = \delta_{ij}. \quad (\text{B.2})$$

Koristeći izraz (4.1) koji povezuje Andersonovu bazu i bazu zaposjednuća pojedinog čvora, za hamiltonijan međudjelovanja se može pisati

$$\hat{H}_I = V \sum_{ijklm} \left[ \sum_i \phi_{l,i}^* \phi_{m,i+1}^* \phi_{k,i+1} \phi_{j,i} \right] \varphi_l^\dagger \varphi_m^\dagger \varphi_k \varphi_j, \quad (\text{B.3})$$

a kako se općenito bilo koji dvočestični operator u nekoj bazi može prikazati kao

$$\hat{H}_I = V \sum_{ijklm} \chi_{jkl}^{lm} \varphi_l^\dagger \varphi_m^\dagger \varphi_k \varphi_j, \quad (\text{B.4})$$

za matrični element se može prepoznati

$$\chi_{jkl}^{lm} = \sum_i \phi_{l,i}^* \phi_{m,i+1}^* \phi_{k,i+1} \phi_{j,i}. \quad (\text{B.5})$$

### B.1 Svojstva matričnih elemenata

Svojstvo (4.5) matričnog elementa može se dobiti jednostavnom manipulacijom izraza (B.5)

$$\begin{aligned} \chi_{jkl}^{lm} &= \sum_i \phi_{l,i}^* \phi_{m,i+1}^* \phi_{k,i+1} \phi_{j,i} \\ &= \left[ \sum_i \phi_{l,i} \phi_{m,i+1} \phi_{k,i+1}^* \phi_{j,i}^* \right]^* \\ &= \left[ \sum_i \phi_{j,i}^* \phi_{k,i+1}^* \phi_{m,i+1} \phi_{l,i} \right]^* = \left( \chi_{lm}^{jk} \right)^*. \end{aligned} \quad (\text{B.6})$$

## B.2 Dijelovi hamiltonijana međudjelovanja

Hamiltonijan međudjelovanja (B.4) može se podijeliti na različite dijelove s obzirom na broj jednakih indeksa  $j, k, l$  i  $m$ , što je analogno podijeli hamiltonijana na članove  $\hat{H}_{HF}$ ,  $\hat{H}_I^3$  i  $\hat{H}_I^4$ . Time se zapravo potvrđuje da ova tri člana u potpunosti opisuju problem međudjelovanja u sustavu.

1. sva četiri indeksa su jednaka:

Ovaj slučaj trivijalno propada jer uvijek mora vrijediti  $j \neq k$  i  $l \neq m$ , što je izravna posljedica fermionskih antikomutacijskih relacija.

2. dva od četiri indeksa su različita:

Postoje dva doprinosa, ( $m = k, l = j$ ) te ( $m = j, l = k$ )

$$\begin{aligned}
 \hat{H}_{HF} &= V \sum_{j \neq k} \chi_{jk}^{jk} \varphi_j^\dagger \varphi_k^\dagger \varphi_k \varphi_j + V \sum_{j \neq k} \chi_{jk}^{kj} \varphi_k^\dagger \varphi_j^\dagger \varphi_k \varphi_j \\
 &= V \sum_{j \neq k} \chi_{jk}^{jk} \hat{n}_k \hat{n}_j - V \sum_{j \neq k} \chi_{jk}^{kj} \varphi_k^\dagger \varphi_k \varphi_j^\dagger \varphi_j \\
 &= V \sum_{j \neq k} \chi_{jk}^{jk} \hat{n}_k \hat{n}_j - V \sum_{j \neq k} \chi_{jk}^{kj} \hat{n}_k \hat{n}_j \\
 &= V \sum_{j \neq k} \left( \chi_{jk}^{jk} - \chi_{jk}^{kj} \right) \hat{n}_k \hat{n}_j \\
 &= 2V \sum_{j > k} \left( \chi_{jk}^{jk} - \chi_{jk}^{kj} \right) \hat{n}_k \hat{n}_j.
 \end{aligned} \tag{B.7}$$

3. tri od četiri indeksa su različita:

Postoje četiri doprinosa, ( $j = m$ ), ( $j = l$ ), ( $k = m$ ) i ( $k = l$ )

$$\begin{aligned}
 \hat{H}_I^3 &= V \sum_{j \neq k \neq l} \chi_{jk}^{lj} \varphi_l^\dagger \varphi_j^\dagger \varphi_k \varphi_j + V \sum_{j \neq k \neq m} \chi_{jk}^{jm} \varphi_j^\dagger \varphi_m^\dagger \varphi_k \varphi_j + \\
 &+ V \sum_{j \neq k \neq l} \chi_{jk}^{lk} \varphi_l^\dagger \varphi_k^\dagger \varphi_k \varphi_j + V \sum_{j \neq k \neq m} \chi_{jk}^{km} \varphi_k^\dagger \varphi_m^\dagger \varphi_k \varphi_j,
 \end{aligned} \tag{B.8}$$



pa se pažljivim mijenjanjem indeksa  $j, k, l$  i  $m$  dobiva

$$\begin{aligned}
\hat{H}_I^3 &= -V \sum_{j \neq k \neq l} \chi_{jk}^{lj} \varphi_l^\dagger \varphi_k \hat{n}_j + V \sum_{j \neq k \neq m} \chi_{jk}^{jm} \varphi_m^\dagger \varphi_k \hat{n}_j + \\
&+ V \sum_{j \neq k \neq l} \chi_{jk}^{lk} \varphi_l^\dagger \varphi_j \hat{n}_k - V \sum_{j \neq k \neq m} \chi_{jk}^{km} \varphi_m^\dagger \varphi_j \hat{n}_k \\
&= -V \sum_{j \neq k \neq m} \chi_{jk}^{mj} \varphi_m^\dagger \varphi_k \hat{n}_j + V \sum_{j \neq k \neq m} \chi_{jk}^{jm} \varphi_m^\dagger \varphi_k \hat{n}_j + \\
&+ V \sum_{j \neq k \neq m} \chi_{kj}^{mj} \varphi_m^\dagger \varphi_k \hat{n}_j - V \sum_{j \neq k \neq m} \chi_{kj}^{jm} \varphi_m^\dagger \varphi_k \hat{n}_j \\
&= V \sum_{j \neq k \neq m} (\chi_{jk}^{jm} + \chi_{kj}^{mj} - \chi_{jk}^{mj} - \chi_{kj}^{jm}) \varphi_m^\dagger \varphi_k \hat{n}_j.
\end{aligned} \tag{B.9}$$

4. sva četiri indeksa različita:

Vrijedi

$$\begin{aligned}
\hat{H}_I^4 &= V \sum_{\substack{j \neq k \neq l \neq m \\ l > m, k > j}} \chi_{jk}^{lm} \varphi_l^\dagger \varphi_m^\dagger \varphi_k \varphi_j + V \sum_{\substack{j \neq k \neq l \neq m \\ l < m, k < j}} \chi_{jk}^{lm} \varphi_l^\dagger \varphi_m^\dagger \varphi_k \varphi_j \\
&+ V \sum_{\substack{j \neq k \neq l \neq m \\ l > m, k < j}} \chi_{jk}^{lm} \varphi_l^\dagger \varphi_m^\dagger \varphi_k \varphi_j + V \sum_{\substack{j \neq k \neq l \neq m \\ l < m, k > j}} \chi_{jk}^{lm} \varphi_l^\dagger \varphi_m^\dagger \varphi_k \varphi_j.
\end{aligned} \tag{B.10}$$

Ideja je da se u svakoj sumi pojavljuje uvjet ( $l > m, k > j$ ) pa je potrebno operatore dovesti na valjanu poziciju i raditi resumacije

$$\begin{aligned}
\hat{H}_I^4 &= \sum_{\substack{j \neq k \neq l \neq m \\ l > m, k > j}} \chi_{jk}^{lm} \varphi_l^\dagger \varphi_m^\dagger \varphi_k \varphi_j + \sum_{\substack{j \neq k \neq l \neq m \\ l < m, k < j}} \chi_{jk}^{lm} \varphi_m^\dagger \varphi_l^\dagger \varphi_j \varphi_k \\
&- \sum_{\substack{j \neq k \neq l \neq m \\ l > m, k < j}} \chi_{jk}^{lm} \varphi_l^\dagger \varphi_m^\dagger \varphi_j \varphi_k - \sum_{\substack{j \neq k \neq l \neq m \\ l < m, k > j}} \chi_{jk}^{lm} \varphi_m^\dagger \varphi_l^\dagger \varphi_k \varphi_j \\
&= \sum_{\substack{j \neq k \neq l \neq m \\ l > m, k > j}} \chi_{jk}^{lm} \varphi_l^\dagger \varphi_m^\dagger \varphi_k \varphi_j + \sum_{\substack{j \neq k \neq l \neq m \\ l > m, k > j}} \chi_{kj}^{ml} \varphi_l^\dagger \varphi_m^\dagger \varphi_k \varphi_j \\
&- \sum_{\substack{j \neq k \neq l \neq m \\ l > m, k > j}} \chi_{kj}^{lm} \varphi_l^\dagger \varphi_m^\dagger \varphi_k \varphi_j - \sum_{\substack{j \neq k \neq l \neq m \\ l > m, k > j}} \chi_{jk}^{ml} \varphi_l^\dagger \varphi_m^\dagger \varphi_k \varphi_j \\
&= V \sum_{\substack{j \neq k \neq l \neq m \\ l > m, k > j}} (\chi_{jk}^{lm} + \chi_{kj}^{ml} - \chi_{kj}^{lm} - \chi_{jk}^{ml}) \varphi_l^\dagger \varphi_m^\dagger \varphi_k \varphi_j.
\end{aligned} \tag{B.11}$$

## Dodatak C Izvod vremenski usrednjene korelacijske funkcije i krutosti

Uvrštavanjem izraza (5.4) za vremenski ovisne operatore  $\hat{A}$  i  $\hat{B}$  u izraz za korelacijsku funkciju (5.3) dobiva se

$$\begin{aligned}
C_{AB}(t) &= \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{\tau} \int_0^\tau dt' \frac{1}{N_{tot}} \sum_{n=1}^{N_{tot}} \langle n | \left[ \sum_{n_A, m_A} |n_A\rangle \langle m_A| A_{n_A m_A} e^{i(E_{m_A} - E_{n_A})t'} \times \right. \\
&\quad \left. \times \sum_{n_B, m_B} |n_B\rangle \langle m_B| B_{n_B m_B} e^{i(E_{m_B} - E_{n_B})(t'+t)} \right] |n\rangle \\
&= \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{\tau} \int_0^\tau dt' \frac{1}{N_{tot}} \sum_{n=1}^{N_{tot}} \sum_{\substack{n_A, m_A \\ n_B, m_B}} [\langle n | n_A\rangle \langle m_A | n_B\rangle \langle m_B | n\rangle \times \\
&\quad \times A_{n_A m_A} e^{i(E_{m_A} - E_{n_A})t'} B_{n_B m_B} e^{i(E_{m_B} - E_{n_B})(t'+t)}] \\
&= \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{\tau} \int_0^\tau dt' \frac{1}{N_{tot}} \sum_{n=1}^{N_{tot}} \sum_{\substack{n_A, m_A \\ n_B, m_B}} [\delta_{n, n_A} \delta_{m_A, n_B} \delta_{m_B, n} \times \\
&\quad \times A_{n_A m_A} e^{i(E_{m_A} - E_{n_A})t'} B_{n_B m_B} e^{i(E_{m_B} - E_{n_B})(t'+t)}] \\
&= \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{\tau} \int_0^\tau dt' \frac{1}{N_{tot}} \sum_{n, m=1}^{N_{tot}} A_{nm} B_{mn} e^{i(E_m - E_n)t'} e^{i(E_n - E_m)(t'+t)} \\
&= \frac{1}{N_{tot}} \sum_{n, m=1}^{N_{tot}} A_{nm} B_{mn} e^{i(E_n - E_m)t} \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{\tau} \int_0^\tau dt' \\
&= \frac{1}{N_{tot}} \sum_{n, m=1}^{N_{tot}} A_{nm} B_{mn} e^{i(E_n - E_m)t}.
\end{aligned} \tag{C.1}$$

Nadalje, za krutost  $D_{AB}$  vrijedi

$$\begin{aligned}
D_{AB} &= \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{\tau} \int_0^\tau dt C_{AB}(t) \\
&= \frac{1}{N_{tot}} \sum_{n=1}^{N_{tot}} A_{nm} B_{mn} \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{\tau} \int_0^\tau dt e^{i(E_n - E_m)t} \\
&= \frac{1}{N_{tot}} \sum_{n=1}^{N_{tot}} A_{nn} B_{nn},
\end{aligned} \tag{C.2}$$

gdje je iskorištena relacija

$$\lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{\tau} \int_0^\tau dt e^{i(E_n - E_m)t} = \delta(E_n - E_m), \tag{C.3}$$

odnosno vrijedi  $n = m$  budući po pretpostavci u spektru nema degeneracija.

### C.1 Izvod korelacijske funkcije i krutosti u ARB

Izraz za vremenski ovisni operator u ARB glasi

$$\hat{A}(t) = \sum_{\tilde{n}, \tilde{m}} |\tilde{n}\rangle A_{\tilde{n}\tilde{m}} \langle \tilde{m}| e^{i(E_{\tilde{m}} - E_{\tilde{n}})t}, \quad (\text{C.4})$$

gdje su  $|\tilde{m}\rangle$  i  $E_{\tilde{m}}$  svojstvena stanja i svojstvene energije punog MBL hamiltonijana (3.8).

Za vremenski usrednjenu korelacijsku funkciju (5.8) tada vrijedi

$$\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| \left[ \sum_{\tilde{n}_A, \tilde{m}_A} |\tilde{n}_A\rangle \langle \tilde{m}_A| A_{\tilde{n}_A \tilde{m}_A} e^{i(E_{\tilde{m}_A} - E_{\tilde{n}_A})t'} \times \right. \\ &\quad \left. \times \sum_{\tilde{n}_B, \tilde{m}_B} |\tilde{n}_B\rangle \langle \tilde{m}_B| B_{\tilde{n}_B \tilde{m}_B} e^{i(E_{\tilde{m}_B} - E_{\tilde{n}_B})(t'+t)} \right] |n\rangle \\ &= \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{\tau} \int_0^\tau dt' \frac{1}{N_{st}} \sum_{n=1}^{N_{st}} \sum_{\substack{\tilde{n}_A, \tilde{m}_A \\ \tilde{n}_B, \tilde{m}_B}} [\langle n|\tilde{n}_A\rangle \langle \tilde{m}_A|\tilde{n}_B\rangle \langle \tilde{m}_B|n\rangle \times \\ &\quad \times A_{\tilde{n}_A \tilde{m}_A} e^{i(E_{\tilde{m}_A} - E_{\tilde{n}_A})t'} B_{\tilde{n}_B \tilde{m}_B} e^{i(E_{\tilde{m}_B} - E_{\tilde{n}_B})(t'+t)}] \\ &= \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{\tau} \int_0^\tau dt' \frac{1}{N_{st}} \sum_{n=1}^{N_{st}} \sum_{\substack{\tilde{n}_A, \tilde{m}_A \\ \tilde{n}_B, \tilde{m}_B}} [\langle n|\tilde{n}_A\rangle \langle \tilde{m}_B|n\rangle \delta_{\tilde{m}_A, \tilde{n}_B} \times \\ &\quad \times A_{\tilde{n}_A \tilde{m}_A} e^{i(E_{\tilde{m}_A} - E_{\tilde{n}_A})t'} B_{\tilde{n}_B \tilde{m}_B} e^{i(E_{\tilde{m}_B} - E_{\tilde{n}_B})(t'+t)}] \\ &= \frac{1}{N_{st}} \sum_{n=1}^{N_{st}} \sum_{\substack{\tilde{n}_A, \tilde{m}_B \\ \tilde{n}_A, \tilde{m}_B}} [\langle n|\tilde{n}_A\rangle \langle \tilde{m}_B|n\rangle A_{\tilde{n}_A \tilde{m}_A} B_{\tilde{n}_B \tilde{m}_B} e^{i(E_{\tilde{m}_B} - E_{\tilde{n}_A})t}] \times \\ &\quad \times \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{\tau} \int_0^\tau dt' e^{i(E_{\tilde{m}_B} - E_{\tilde{n}_A})t'} \\ &= \frac{1}{N_{st}} \sum_{n=1}^{N_{st}} \sum_{\substack{\tilde{m}_i \\ \tilde{m}_i}} |\langle n|\tilde{m}_i\rangle|^2 A_{\tilde{m}_i \tilde{m}_i} B_{\tilde{m}_i \tilde{m}_i} e^{i(E_{\tilde{m}_i} - E_{\tilde{n}_i})t}, \end{aligned} \quad (\text{C.5})$$

gdje je slično kao ranije prepoznata relacija

$$\lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{\tau} \int_0^\tau dt' e^{i(E_{\tilde{m}_B} - E_{\tilde{n}_A})t'} = \delta(E_{\tilde{m}_B} - E_{\tilde{n}_A}). \quad (\text{C.6})$$

Konačno, za krutost  $D_{AB}$  u ARB se analogno dobiva

$$\begin{aligned}
D_{AB} &= \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{\tau} \int_0^\tau dt C_{AB}(t) \\
&= \frac{1}{N_{st}} \sum_{\substack{n=1 \\ \tilde{m}l}}^{N_{st}} |\langle n | \tilde{m} \rangle|^2 A_{\tilde{m}l} B_{l\tilde{m}} \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{\tau} \int_0^\tau dt e^{i(E_{\tilde{m}} - E_l)t} \\
&= \frac{1}{N_{st}} \sum_{\substack{n=1 \\ \tilde{m}}}^{N_{st}} |\langle n | \tilde{m} \rangle|^2 A_{\tilde{m}\tilde{m}} B_{\tilde{m}\tilde{m}},
\end{aligned} \tag{C.7}$$

što se u slučaju prosjeka po svim stanjima svodi na egzaktnu krutost (C.2).

## Literatura

- [1] Kubo, R. Statistical mechanics: an advanced course with problems and solutions. 1st ed. Amsterdam : North - Holland, 1965.
- [2] Trabesinger, A. Quantum simulation. // *Nature Physics* **8**, 263 (2012).
- [3] Cirac, J. I.; Zoller. P. Goals and opportunities in quantum simulation. // *Nature Physics* **8**, 264 - 266 (2012).
- [4] Bloch, I.; Dalibard, J.; Nascimbene, S. Quantum simulations with ultracold quantum gases. // *Nature Physics* **8**, 267–276 (2012).
- [5] Blatt, R.; Roos, C. F. Quantum simulations with trapped ions. // *Nature Physics* **8**, 277–284 (2012).
- [6] Aspuru-Guzik, A.; Walther, P. Photonic quantum simulators. // *Nature Physics* **8**, 285–291 (2012).
- [7] Houck, A. A.; Türeci, H. E.; Koch, J. On-chip quantum simulation with superconducting circuits. // *Nature Physics* **8**, 292–299 (2012).
- [8] Kubo, R. Thermodynamics: an advanced course with problems and solutions. Amsterdam : North - Holland, 1968.
- [9] Chaikin P. M.; Lubensky T.C.; Principles of condensed matter physics. Cambridge : Cambridge University Press, 1995.
- [10] Polkovnikov A.; Sengupta K.; Silva A.; Vengalattore M. *Colloquium: Nonequilibrium dynamics of closed interacting quantum systems.* // *Rev. Mod. Phys.* **83**, 863 (2011).
- [11] Deutsch, J. M. Quantum statistical mechanics in a closed system. // *Phys. Rev. A* **43**, 2046 (1991).
- [12] Srednicki M. Chaos and quantum thermalization. // *Phys. Rev. E* **50**, 888 (1994).
- [13] Tasaki H. From quantum dynamics to the canonical distribution: general picture and a rigorous example. // *Phys. Rev. Lett.* **80**, 1373 (1998).

- [14] Rigol M.; Dunjko V.; Olshanii M. Thermalization and its mechanism for generic isolated quantum systems. // *Nature* **452**, 854–858 (2008).
- [15] Nandkishore R.; Huse D. A. Many-body localization and thermalization in quantum statistical mechanics. // *Annual Review of Condensed Matter Physics* **6**, 15 - 38 (2015).
- [16] Schreiber M.; *et al.* Observation of many-body localization of interacting fermions in a quasirandom optical lattice. // *Science* **349**, 6250 (2015) 842 - 845.
- [17] Naldesi P.; Ercolessi E.; Roscilde T. Detecting a many-body mobility edge with quantum quenches. // *ScyPost Physics* **1**, 010 (2016).
- [18] Anderson P. W. Absence of diffusion in certain random lattices. // *Phys. Rev.* **109**, 1492 (1958).
- [19] Abrahams L.; Anderson P. W.; Licciardello D. C.; Ramakrishnan T. V. Scaling theory of localization: absence of quantum diffusion in two dimensions. // *Phys. Rev. Lett.* **42**, 673 (1979).
- [20] Gornyi I. V.; Mirlin A. D.; Polyakov D. G. Interacting electrons in disordered wires: Anderson localization and low- $T$  transport. // *Phys. Rev. Lett.* **95**, 206603 (2005).
- [21] Basko D. M.; Aleiner I. L.; Altshuler B. L. Metal–insulator transition in a weakly interacting many-electron system with localized single-particle states. // *Annals of Physics* **321**, 5 (2006) 1126 - 1205.
- [22] Oganesyan V.; Huse D. A. Localization of interacting fermions at high temperature. // *Phys. Rev. B* **75**, 155111 (2007).
- [23] Žnidarič M.; Prosen T.; Prelovšek P. Many-body localization in the Heisenberg XXZ magnet in a random field. // *Phys. Rev. B* **77**, 064426 (2008).
- [24] Pal A.; Huse D. A. Many-body localization phase transition. // *Phys. Rev. B* **82**, 174411 (2010).
- [25] Luitz D. J.; Laflorencie N.; Alet F. Many-body localization edge in the random-field Heisenberg chain. // *Phys. Rev. B* **91**, 081103(R) (2015).

- [26] Barišić O. S.; Kokalj J.; Balog I.; Prelovšek P. Dynamical conductivity and its fluctuations along the crossover to many-body localization. // *Phys. Rev. B* **94**, 045126 (2016).
- [27] Aubry S.; André G. Analyticity breaking and Anderson localization in incommensurate lattices. // *Ann. Israel Phys. Soc.* **3**, 133 (1980).
- [28] Iyer S.; Oganessian V.; Refael G.; Huse D. A. Many-body localization in a quasi-periodic system. // *Phys. Rev. B* **87**, 134202 (2013).
- [29] Grüner G. The dynamics of charge-density waves. // *Rev. Mod. Phys.* **60**, 1129 (1988).
- [30] Mierzejewski M.; Herbrych J.; Prelovšek P. Universal dynamics of density correlations at the transition to the many-body localized state. // *Phys. Rev. B* **94**, 224207 (2016).
- [31] Prelovšek P.; Barišić O. S.; Žnidarič M. Absence of full many-body localization in the disordered Hubbard chain. // *Phys. Rev. B* **94**, 241104(R) (2016).
- [32] Auletta G.; Fortunato M.; Parisi G. Quantum mechanics. Cambridge : Cambridge University Press, 2009.
- [33] Feher G.; Fletcher R. C.; Gere E. A. Exchange effects in spin resonance of impurity atoms in silicon. // *Phys. Rev.* **100**, 1784 (1955).
- [34] Feher G. Electron Spin Resonance Experiments on Donors in Silicon. I. Electronic Structure of Donors by the Electron Nuclear Double Resonance Technique. // *Phys. Rev.* **114**, **1219** (1959).
- [35] Feher G.; Gere E. A. Electron Spin Resonance Experiments on Donors in Silicon. II. Electron Spin Relaxation Effects. // *Phys. Rev.* **114**, **1245** (1959).
- [36] Kramer B.; MacKinnon A. Localization: theory and experiment. // *Rep. Prog. Phys.* **56** (1993), 1469 - 1564.
- [37] Thouless D. J. Maximum Metallic Resistance in Thin Wires. // *Phys. Rev. Lett.* **39**, 1167 (1977).

- [38] Licciardello D. C.; Thouless D. J. Conductivity and mobility edges for two-dimensional disordered systems. // *J. Phys. C: Solid State Phys.* **8**, 4157 (1975).
- [39] Phillips P. Anderson localization and the Exceptions. // *Annu. Rev. Phys. Chem.* **44**, (1993) 115 - 144.
- [40] Mott N. The mobility edge since 1967. // *J. Phys. C: Solid State Phys.* **20**, 3075 (1987).
- [41] Fleishman L.; Anderson P. W. Interactions and the Anderson transition. // *Phys. Rev. B* **21**, 2366 (1980).
- [42] Annett J. F. Superconductivity, Superfluids and Condensates. New York : Oxford University Press, 2004.
- [43] Mott N. F. Conduction in non-crystalline systems. // *Phil. Mag.* **17**, 1259 (1968).
- [44] Coleman P. Introduction to Many-Body Physics. Cambridge : Cambridge University Press, 2015.
- [45] Serbyn M.; Papić Z.; Abanin D. A. Local Conservation Laws and the Structure of the Many-Body Localized States. // *Phys. Rev. Lett.* **111**, 127201 (2013).
- [46] Huse D. A.; Nandkishore R.; Oganesyan V. Phenomenology of fully many-body-localized systems. // *Phys. Rev. B* **90**, 174202 (2014).
- [47] Berkelbach T.C.; Reichman D. R. Conductivity of disordered quantum lattice models at infinite temperature: Many-body localization. // *Phys. Rev. B* **81**, 224429 (2010).
- [48] Bauer B.; Nayak C. Area laws in a many-body localized state and its implications for topological order. // *J. Stat. Mech.* **2013**, P09005 (2013).
- [49] Bardarson J. H.; Pollmann F.; Moore J. E. Unbounded Growth of Entanglement in Models of Many-Body Localization. // *Phys. Rev. Lett.* **109**, 017202 (2012).
- [50] Khemani V.; Lim S. P.; Sheng D. N.; Huse D. A. Critical Properties of the Many-Body Localization Transition. // *Phys. Rev. X* **7**, 021013 (2017).



- [51] Baeriswyl D.; Degiorgi L. *Strong Interactions in Low Dimensions*. Dordrecht : Kluwer Academic Publishers, 2004.
- [52] Sakurai J. J. *Modern Quantum Mechanics*. Revised ed. : Addison - Wesley Publishing Company, 1994.
- [53] Time-independent perturbation theory, Wikipedia, [https://en.wikipedia.org/wiki/Perturbation\\_theory\\_\(quantum\\_mechanics\)](https://en.wikipedia.org/wiki/Perturbation_theory_(quantum_mechanics)), 22.6.2018.
- [54] Prelovšek P.; Barišić O. S.; Mierzejewski M. Reduced-basis approach to many-body localization. // *Phys. Rev. B* **97**, 035104 (2018).
- [55] Sethna J. P. *Statistical Mechanics: Entropy, Order Parameters and Complexity*. New York : Oxford University Press, 2006.
- [56] Edwards S. F.; Anderson P. W. Theory of spin glasses. // *J.Phys. F: Met. Phys.* **5**, 965 (1975).
- [57] Hastings M. B. An area law for one-dimensional quantum systems. // *J. Stat. Mech.* P08024 (2007).