

Mnogočestična lokalizacija u bazi mnogočestičnih Andersonovih lokaliziranih stanja

Juraj Krsnik

PMF, Fizički odsjek, Zagreb, Republika Hrvatska

Mentor: dr. sc. Osor Slaven Barišić

Institut za fiziku, Zagreb, Republika Hrvatska

Samostalni seminar iz istraživanja u fizici, 24. siječnja 2018.

- Andersonova lokalizacija
- Mnogočestična lokalizacija
- Aproksimacija reducirane baze
 - Baza mnogočestičnih Andersonovih lokaliziranih stanja
 - Struktura interakcije \hat{H}_I ; razdvajanje nabojnih i spinskih stupnjeva slobode
 - Konstrukcija reducirane baze
- Korelacijska funkcija gustoće
- Rezultati
- Zaključak

Promatramo Andersonov model hamiltonijana:

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

Prvi član predstavlja preskoke fermiona na susjedna čvorišta u aproksimaciji čvrste veze, odnosno kinetičku energiju sistema. Drugi član modelira nered u sustavu te svojstva sustava očito ovise o omjeru parametara W/t .

Promatramo Andersonov model hamiltonijana:

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

Prvi član predstavlja preskoke fermiona na susjedna čvorišta u aproksimaciji čvrste veze, odnosno kinetičku energiju sistema. Drugi član modelira nered u sustavu te svojstva sustava očito ovise o omjeru parametara W/t .

- $W/t \ll 1$: prevladava kinetički član \rightarrow metalno ponašanje, valne funkcije delokalizirane.

Promatramo Andersonov model hamiltonijana:

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

Prvi član predstavlja preskoke fermiona na susjedna čvorišta u aproksimaciji čvrste veze, odnosno kinetičku energiju sistema. Drugi član modelira nered u sustavu te svojstva sustava očito ovise o omjeru parametara W/t .

- $W/t \ll 1$: prevladava kinetički član \rightarrow metalno ponašanje, valne funkcije delokalizirane.
- $W/t \gg 1$: prevladava nered \rightarrow izolatorsko ponašanje, lokalizirane valne funkcije.

Promatramo Andersonov model hamiltonijana:

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

Prvi član predstavlja preskoke fermiona na susjedna čvorišta u aproksimaciji čvrste veze, odnosno kinetičku energiju sistema. Drugi član modelira nered u sustavu te svojstva sustava očito ovise o omjeru parametara W/t .

- $W/t \ll 1$: prevladava kinetički član \rightarrow metalno ponašanje, valne funkcije delokalizirane.
- $W/t \gg 1$: prevladava nered \rightarrow izolatorsko ponašanje, lokalizirane valne funkcije.

\implies Na kritičnoj vrijednosti omjera $(W/t)_c$ dolazi do metal-izolator prijelaza?

Stvarno ponašanje puno je složenije i ovisno o dimenziji sustava.

Stvarno ponašanje puno je složenije i ovisno o dimenziji sustava.

- $D = 1$: sva jednočestična stanja lokalizirana i za najmanju vrijednost nereda, lokalizacijska dužina određena omjerom W/t .

Stvarno ponašanje puno je složenije i ovisno o dimenziji sustava.

- $D = 1$: sva jednočestična stanja lokalizirana i za najmanju vrijednost nereda, lokalizacijska dužina određena omjerom W/t .
- $D = 2$: donja kritična dimenzija za pojavu Andersonove lokalizacije, stanja lokalizirana s velikom lokalizacijskom dužinom.

Stvarno ponašanje puno je složenije i ovisno o dimenziji sustava.

- $D = 1$: sva jednočestična stanja lokalizirana i za najmanju vrijednost nereda, lokalizacijska dužina određena omjerom W/t .
- $D = 2$: donja kritična dimenzija za pojavu Andersonove lokalizacije, stanja lokalizirana s velikom lokalizacijskom dužinom.
- $D = 3$: pojava praga mobilnosti u spektru jednočestinih stanja koji razdvaja rubna, lokalizirana stanja, od delokaliziranih stanja na sredini spektra. Položaj praga mobilnosti određen omjerom W/t .

Stvarno ponašanje puno je složenije i ovisno o dimenziji sustava.

- $D = 1$: sva jednočestična stanja lokalizirana i za najmanju vrijednost nereda, lokalizacijska dužina određena omjerom W/t .
- $D = 2$: donja kritična dimenzija za pojavu Andersonove lokalizacije, stanja lokalizirana s velikom lokalizacijskom dužinom.
- $D = 3$: pojava praga mobilnosti u spektru jednočestinih stanja koji razdvaja rubna, lokalizirana stanja, od delokaliziranih stanja na sredini spektra. Položaj praga mobilnosti određen omjerom W/t .

Što se događa nakon uključivanja interakcije (korelacija) među fermionima?

Stvarno ponašanje puno je složenije i ovisno o dimenziji sustava.

- $D = 1$: sva jednočestična stanja lokalizirana i za najmanju vrijednost nereda, lokalizacijska dužina određena omjerom W/t .
- $D = 2$: donja kritična dimenzija za pojavu Andersonove lokalizacije, stanja lokalizirana s velikom lokalizacijskom dužinom.
- $D = 3$: pojava praga mobilnosti u spektru jednočestinih stanja koji razdvaja rubna, lokalizirana stanja, od delokaliziranih stanja na sredini spektra. Položaj praga mobilnosti određen omjerom W/t .

Što se događa nakon uključivanja interakcije (korelacija) među fermionima?

Najveći efekt lokalizacije očekujemo u sustavima reducirane dimenzije pa u nastavku radimo s 1D sustavima.

Proširujemo Andersonov model uključivanjem Hubbardove interakcije:

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

Proširujemo Andersonov model uključivanjem Hubbardove interakcije:

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

Hamiltonijan (2) modelira spinski neovisan nered u naboju \Rightarrow razlika u ponašanju nabojnih i spinskih stupnjeva slobode?

Proširujemo Andersonov model uključivanjem Hubbardove interakcije:

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

Hamiltonijan (2) modelira spinski neovisan nered u naboju \Rightarrow razlika u ponašanju nabojnih i spinskih stupnjeva slobode?

Numeričke simulacije na sustavu s $L = 16$ čvorova rešetke doista ukazuju na različito ponašanje naboja i spina.

Proširujemo Andersonov model uključivanjem Hubbardove interakcije:

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

Hamiltonijan (2) modelira spinski neovisan nered u naboju \Rightarrow razlika u ponašanju nabojnih i spinskih stupnjeva slobode?

Numeričke simulacije na sustavu s $L = 16$ čvorova rešetke doista ukazuju na različito ponašanje naboja i spina.

- $W < W_c$: korelacijske funkcije gustoće naboja i spina iščezavaju na dugim vremenskim skalama.

Proširujemo Andersonov model uključivanjem Hubbardove interakcije:

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

Hamiltonijan (2) modelira spinski neovisan nered u naboju \Rightarrow razlika u ponašanju nabojnih i spinskih stupnjeva slobode?

Numeričke simulacije na sustavu s $L = 16$ čvorova rešetke doista ukazuju na različito ponašanje naboja i spina.

- $W < W_c$: korelacijske funkcije gustoće naboja i spina iščezavaju na dugim vremenskim skalama.
- $W > W_c$: spinske korelacije trnu u vremenu znatno brže od nabojnih, te se čini kako one nabojne ostaju sačuvane čak i na vrlo dugim vremenskim skalama.

Proširujemo Andersonov model uključivanjem Hubbardove interakcije:

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

Hamiltonijan (2) modelira spinski neovisan nered u naboju \Rightarrow razlika u ponašanju nabojnih i spinskih stupnjeva slobode?

Numeričke simulacije na sustavu s $L = 16$ čvorova rešetke doista ukazuju na različito ponašanje naboja i spina.

- $W < W_c$: korelacijske funkcije gustoće naboja i spina iščezavaju na dugim vremenskim skalama.
- $W > W_c$: spinske korelacije trnu u vremenu znatno brže od nabojnih, te se čini kako one nabojne ostaju sačuvane čak i na vrlo dugim vremenskim skalama.

\Rightarrow Izgleda da dolazi do lokalizacije naboja za $W > W_c$!

Uvođenjem spinski ovisnih nabojnih nečistoća u hamiltonijan (2) za dovoljno jaki nered ($W > W_{cr}$) dolazi do lokalizacije i u spinskom sektoru
 \Rightarrow potpuna mnogočestična lokalizacija!

Uvođenjem spinski ovisnih nabojnih nečistoća u hamiltonijan (2) za dovoljno jaki nered ($W > W_{cr}$) dolazi do lokalizacije i u spinskom sektoru \Rightarrow potpuna mnogočestična lokalizacija!

Potpuna lokalizacija rezultira odsustvom transporta naboja i spina, odnosno energije \Rightarrow sustav se ne može termalizirati suprotno ergotskoj hipotezi?

Uvođenjem spinski ovisnih nabojnih nečistoća u hamiltonijan (2) za dovoljno jaki nered ($W > W_{cr}$) dolazi do lokalizacije i u spinskom sektoru \Rightarrow potpuna mnogočestična lokalizacija!

Potpuna lokalizacija rezultira odsustvom transporta naboja i spina, odnosno energije \Rightarrow sustav se ne može termalizirati suprotno ergotskoj hipotezi?

Koja je narav prijelaza iz ergodične u neergodičnu, lokaliziranu fazu?

Uvođenjem spinski ovisnih nabojnih nečistoća u hamiltonijan (2) za dovoljno jaki nered ($W > W_{cr}$) dolazi do lokalizacije i u spinskom sektoru \Rightarrow potpuna mnogočestična lokalizacija!

Potpuna lokalizacija rezultira odsustvom transporta naboja i spina, odnosno energije \Rightarrow sustav se ne može termalizirati suprotno ergotskoj hipotezi?

Koja je narav prijelaza iz ergodične u neergodičnu, lokaliziranu fazu?

Da li je djelomična lokalizacija, npr. u naboju, dovoljna zapreka termalizaciji sustava?

Spora dinamika lokaliziranih sustava \Rightarrow potrebno gledati relaksaciju sustava na dugim vremenskim skalama \Rightarrow važnost učinaka rubnih uvjeta zbog konačnosti sustava.

Spora dinamika lokaliziranih sustava \Rightarrow potrebno gledati relaksaciju sustava na dugim vremenskim skalama \Rightarrow važnost učinaka rubnih uvjeta zbog konačnosti sustava.

S druge strane, broj mnogočestičnih stanja eksponencijalno brzo raste s dimenzijom sustava $L \Rightarrow$ numerički simulirati možemo samo male sustave.

Spora dinamika lokaliziranih sustava \Rightarrow potrebno gledati relaksaciju sustava na dugim vremenskim skalama \Rightarrow važnost učinaka rubnih uvjeta zbog konačnosti sustava.

S druge strane, broj mnogočestičnih stanja eksponencijalno brzo raste s dimenzijom sustava $L \Rightarrow$ numerički simulirati možemo samo male sustave.

\Rightarrow Problem skaliranja rezultata na termodinamičku granicu $L \rightarrow \infty!$

Spora dinamika lokaliziranih sustava \Rightarrow potrebno gledati relaksaciju sustava na dugim vremenskim skalama \Rightarrow važnost učinaka rubnih uvjeta zbog konačnosti sustava.

S druge strane, broj mnogočestičnih stanja eksponencijalno brzo raste s dimenzijom sustava $L \Rightarrow$ numerički simulirati možemo samo male sustave.

\Rightarrow Problem skaliranja rezultata na termodinamičku granicu $L \rightarrow \infty!$

Izdvojimo na prikladan način samo stanja relevantna za dinamiku sustava na dugim vremenima \rightarrow aproksimacija reducirane baze!

Baza mnogočestičnih Andersonovih lokaliziranih stanja

Hamiltonijan (2) razdvajamo na Andersonov dio \hat{H}_A kojeg možemo egzaktno dijagonalizirati

$$\hat{H}_A = \sum_{l,s} \epsilon_l \varphi_{l,s}^\dagger \varphi_{l,s}, \quad (3)$$

gdje indeks l označava jednočestično Andersonovo lokalizirano stanje, te interakciju \hat{H}_l promatramo kao smetnju.

Baza mnogočestičnih Andersonovih lokaliziranih stanja

Hamiltonijan (2) razdvajamo na Andersonov dio \hat{H}_A kojeg možemo egzaktno dijagonalizirati

$$\hat{H}_A = \sum_{l,s} \epsilon_l \varphi_{l,s}^\dagger \varphi_{l,s}, \quad (3)$$

gdje indeks l označava jednočestično Andersonovo lokalizirano stanje, te interakciju \hat{H}_l promatramo kao smetnju.

Bazu mnogočestičnih Andersonovih lokaliziranih stanja dobivamo popunjavanjem jednočestičnih Andersonovih lokaliziranih stanja pa se dobiva

$$|n\rangle = \prod_{l,s} \varphi_{l,s}^\dagger |0\rangle, \quad E_n^0 = \sum_{l,s} \epsilon_l n_{l,s}. \quad (4)$$

Baza mnogočestičnih Andersonovih lokaliziranih stanja

Hamiltonijan (2) razdvajamo na Andersonov dio \hat{H}_A kojeg možemo egzaktno dijagonalizirati

$$\hat{H}_A = \sum_{l,s} \epsilon_l \varphi_{l,s}^\dagger \varphi_{l,s}, \quad (3)$$

gdje indeks l označava jednočestično Andersonovo lokalizirano stanje, te interakciju \hat{H}_l promatramo kao smetnju.

Bazu mnogočestičnih Andersonovih lokaliziranih stanja dobivamo popunjavanjem jednočestičnih Andersonovih lokaliziranih stanja pa se dobiva

$$|n\rangle = \prod_{l,s} \varphi_{l,s}^\dagger |0\rangle, \quad E_n^0 = \sum_{l,s} \epsilon_l n_{l,s}. \quad (4)$$

Stanje $|n\rangle$ opisuje lokalizirani sustav u kojem se svaki fermion nalazi u nekom jednočestičnom Andersonovom lokaliziranom stanju.

Uključivanjem interakcije \hat{H}_I mnogočestična Andersonova lokalizirana stanja (4) više nisu svojstvena stanja hamiltonijana. Interakcija ih delokalizira, te je za opis sustava potrebno uzeti u obzir sva mnogočestična Andersonova lokalizirana stanja.

Uključivanjem interakcije \hat{H}_I mnogočestična Andersonova lokalizirana stanja (4) više nisu svojstvena stanja hamiltonijana. Interakcija ih delokalizira, te je za opis sustava potrebno uzeti u obzir sva mnogočestična Andersonova lokalizirana stanja.

Međutim, u granici jakog nereda očekujemo kako će relevantni matrični elementi koji opisuju interakciju (raspršenje između jednočestičnih Andersonovih lokaliziranih stanja) biti prostorno jako lokalizirani \Rightarrow baza (4) prikladna za razdvajanje rezonantnih (relevantnih) doprinosa za konstrukciju reducirane baze.

Uključivanjem interakcije \hat{H}_I mnogočestična Andersonova lokalizirana stanja (4) više nisu svojstvena stanja hamiltonijana. Interakcija ih delokalizira, te je za opis sustava potrebno uzeti u obzir sva mnogočestična Andersonova lokalizirana stanja.

Međutim, u granici jakog nereda očekujemo kako će relevantni matrični elementi koji opisuju interakciju (raspršenje između jednočestičnih Andersonovih lokaliziranih stanja) biti prostorno jako lokalizirani \Rightarrow baza (4) prikladna za razdvajanje rezonantnih (relevantnih) doprinosa za konstrukciju reducirane baze.

\Rightarrow Potrebno detaljnije pogledati strukturu hamiltonijana interakcije \hat{H}_I .

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

U bazi jednočestičnih Andersonovih lokaliziranih stanja Hubbardova interakcija $\hat{H}_I = U \sum_i \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow}$ glasi

$$\hat{H}_I = U \sum_{jklm,ss'} \chi_{jk}^{lm} \varphi_{l,s}^\dagger \varphi_{m,s'}^\dagger \varphi_{k,s'} \varphi_{j,s}, \quad (5)$$

te za matricele elemente vrijedi

$$\chi_{jk}^{lm} = (1 - \delta_{ss'}) \sum_i \phi_{l,i}^* \phi_{m,i}^* \phi_{k,i} \phi_{j,i}, \quad (6)$$

gdje $\phi_{l,i}$ povezuju Andersonovu bazu i bazu zaposjednuća pojedinog čvora. Nadalje, koristeći fermionske antikomutacijske korelacije može se pokazati kako vrijedi

$$\chi_{jk}^{lm} = \chi_{kj}^{ml} = \left(\chi_{lm}^{jk} \right)^*, \quad \chi_{jk}^{lm} = 0 \quad \text{za} \quad s = s'. \quad (7)$$

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

Hubbardov hamiltonijan (5) razdvajamo na četiri doprinosa koji se međusobno razlikuju po broju jednakih indeksa j, k, l i m .

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

Hubbardov hamiltonijan (5) razdvajamo na četiri doprinosa koji se međusobno razlikuju po broju jednakih indeksa j, k, l i m .

- sva četiri indeksa jednaka:

$$\hat{H}_I^1 = 2U \sum_j \chi_{jj}^{jj} \hat{n}_{j,\uparrow} \hat{n}_{j,\downarrow} \quad (8)$$

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

Hubbardov hamiltonijan (5) razdvajamo na četiri doprinosa koji se međusobno razlikuju po broju jednakih indeksa j, k, l i m .

- sva četiri indeksa jednaka:

$$\hat{H}_I^1 = 2U \sum_j \chi_{jj}^{jj} \hat{n}_{j,\uparrow} \hat{n}_{j,\downarrow} \quad (8)$$

- dva indeksa različita:

$$\hat{H}_I^2 = 2U \sum_{j \neq k} \left[\chi_{jk}^{jk} \hat{n}_{j,\uparrow} \hat{n}_{k,\downarrow} + \chi_{jk}^{kj} \varphi_{k,\uparrow}^\dagger \varphi_{j,\downarrow}^\dagger \varphi_{k,\downarrow} \varphi_{j,\uparrow} \right] \quad (9)$$

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

- tri indeksa različita:

$$\begin{aligned} \hat{H}_I^3 = 2U \sum_{j \neq k \neq m} & \left[\chi_{jk}^{jm} \left(\varphi_{m,\downarrow}^\dagger \varphi_{k,\downarrow} \hat{n}_{j,\uparrow} + \varphi_{m,\uparrow}^\dagger \varphi_{k,\uparrow} \hat{n}_{j,\downarrow} \right) + \right. \\ & \left. + \chi_{jk}^{mj} \left(\varphi_{m,\downarrow}^\dagger \varphi_{j,\uparrow}^\dagger \varphi_{k,\uparrow} \varphi_{j,\downarrow} + \varphi_{m,\uparrow}^\dagger \varphi_{j,\downarrow}^\dagger \varphi_{k,\downarrow} \varphi_{j,\uparrow} \right) \right] \end{aligned} \quad (10)$$

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

- tri indeksa različita:

$$\hat{H}_I^3 = 2U \sum_{j \neq k \neq m} \left[\chi_{jk}^{jm} \left(\varphi_{m,\downarrow}^\dagger \varphi_{k,\downarrow} \hat{n}_{j,\uparrow} + \varphi_{m,\uparrow}^\dagger \varphi_{k,\uparrow} \hat{n}_{j,\downarrow} \right) + \chi_{jk}^{mj} \left(\varphi_{m,\downarrow}^\dagger \varphi_{j,\uparrow}^\dagger \varphi_{k,\uparrow} \varphi_{j,\downarrow} + \varphi_{m,\uparrow}^\dagger \varphi_{j,\downarrow}^\dagger \varphi_{k,\downarrow} \varphi_{j,\uparrow} \right) \right] \quad (10)$$

- sva četiri indeksa različita:

$$H_I^4 = 2U \sum_{\substack{j \neq k \neq l \neq m \\ l > m, k > j}} \left[\chi_{jk}^{lm} \left(\varphi_{l,\uparrow}^\dagger \varphi_{m,\downarrow}^\dagger \varphi_{k,\downarrow} \varphi_{j,\uparrow} + \varphi_{l,\downarrow}^\dagger \varphi_{m,\uparrow}^\dagger \varphi_{k,\uparrow} \varphi_{j,\downarrow} \right) - \chi_{kj}^{lm} \left(\varphi_{l,\uparrow}^\dagger \varphi_{m,\downarrow}^\dagger \varphi_{k,\uparrow} \varphi_{j,\downarrow} + \varphi_{l,\downarrow}^\dagger \varphi_{m,\uparrow}^\dagger \varphi_{k,\downarrow} \varphi_{j,\uparrow} \right) \right] \quad (11)$$

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

- tri indeksa različita:

$$\hat{H}_I^3 = 2U \sum_{j \neq k \neq m} \left[\chi_{jk}^{jm} \left(\varphi_{m,\downarrow}^\dagger \varphi_{k,\downarrow} \hat{n}_{j,\uparrow} + \varphi_{m,\uparrow}^\dagger \varphi_{k,\uparrow} \hat{n}_{j,\downarrow} \right) + \chi_{jk}^{mj} \left(\varphi_{m,\downarrow}^\dagger \varphi_{j,\uparrow}^\dagger \varphi_{k,\uparrow} \varphi_{j,\downarrow} + \varphi_{m,\uparrow}^\dagger \varphi_{j,\downarrow}^\dagger \varphi_{k,\downarrow} \varphi_{j,\uparrow} \right) \right] \quad (10)$$

- sva četiri indeksa različita:

$$H_I^4 = 2U \sum_{\substack{j \neq k \neq l \neq m \\ l > m, k > j}} \left[\chi_{jk}^{lm} \left(\varphi_{l,\uparrow}^\dagger \varphi_{m,\downarrow}^\dagger \varphi_{k,\downarrow} \varphi_{j,\uparrow} + \varphi_{l,\downarrow}^\dagger \varphi_{m,\uparrow}^\dagger \varphi_{k,\uparrow} \varphi_{j,\downarrow} \right) - \chi_{kj}^{lm} \left(\varphi_{l,\uparrow}^\dagger \varphi_{m,\downarrow}^\dagger \varphi_{k,\uparrow} \varphi_{j,\downarrow} + \varphi_{l,\downarrow}^\dagger \varphi_{m,\uparrow}^\dagger \varphi_{k,\downarrow} \varphi_{j,\uparrow} \right) \right] \quad (11)$$

Ovako postavljen problem izuzetno je složen te ćemo se prebaciti na model u kojem fermioni nose samo naboj, a ne i spin.

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

Hubbardovu interakciju zamjenjujemo interakcijom naboja susjednih čvorova $\hat{H}_I = V \sum_i \hat{n}_i \hat{n}_{i+1}$ pa za dijelove hamiltonijana interakcije imamo:

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

Hubbardovu interakciju zamjenjujemo interakcijom naboja susjednih čvorova $\hat{H}_I = V \sum_i \hat{n}_i \hat{n}_{i+1}$ pa za dijelove hamiltonijana interakcije imamo:



$$\hat{H}_I^2 = 2V \sum_{k>j} \left(\chi_{jk}^{jk} - \chi_{jk}^{kj} \right) \hat{n}_j \hat{n}_k, \quad (12)$$

te ovaj član predstavlja Hartree-Fock korekciju energije mnogočestičnog Andersonovog lokaliziranog stanja $|n\rangle$,

$$\tilde{E}_n^0 = E_n^0 + \langle n | \hat{H}_I^2 | n \rangle, \quad (13)$$

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

Hubbardovu interakciju zamjenjujemo interakcijom naboja susjednih čvorova $\hat{H}_I = V \sum_i \hat{n}_i \hat{n}_{i+1}$ pa za dijelove hamiltonijana interakcije imamo:



$$\hat{H}_I^2 = 2V \sum_{k>j} \left(\chi_{jk}^{jk} - \chi_{jk}^{kj} \right) \hat{n}_j \hat{n}_k, \quad (12)$$

te ovaj član predstavlja Hartree-Fock korekciju energije mnogočestičnog Andersonovog lokaliziranog stanja $|n\rangle$,

$$\tilde{E}_n^0 = E_n^0 + \langle n | \hat{H}_I^2 | n \rangle, \quad (13)$$



$$\hat{H}_I^3 = 2V \sum_{j \neq k \neq m} \left(\chi_{jk}^{jm} - \chi_{jk}^{mj} \right) \hat{n}_j \varphi_m^\dagger \varphi_k, \quad (14)$$

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

Hubbardovu interakciju zamjenjujemo interakcijom naboja susjednih čvorova $\hat{H}_I = V \sum_i \hat{n}_i \hat{n}_{i+1}$ pa za dijelove hamiltonijana interakcije imamo:

- $$\hat{H}_I^2 = 2V \sum_{k>j} \left(\chi_{jk}^{jk} - \chi_{jk}^{kj} \right) \hat{n}_j \hat{n}_k, \quad (12)$$

te ovaj član predstavlja Hartree-Fock korekciju energije mnogočestičnog Andersonovog lokaliziranog stanja $|n\rangle$,

$$\tilde{E}_n^0 = E_n^0 + \langle n | \hat{H}_I^2 | n \rangle, \quad (13)$$

- $$\hat{H}_I^3 = 2V \sum_{j \neq k \neq m} \left(\chi_{jk}^{jm} - \chi_{jk}^{mj} \right) \hat{n}_j \varphi_m^\dagger \varphi_k, \quad (14)$$

- $$\hat{H}_I^4 = 2V \sum_{\substack{j>k \\ m>l \\ j \neq m \neq k \neq l}} \left(\chi_{jk}^{lm} - \chi_{jk}^{ml} \right) \varphi_l^\dagger \varphi_m^\dagger \varphi_k \varphi_j. \quad (15)$$

Konstrukcija reducirane baze

Reduciranu bazu konstruiramo iterativno kroz G generacija počevši od stanja $|n\rangle$ kao jedinog stanja u nultoj, početnoj generaciji. Svaku generaciju dobivamo djelovanjem Hamiltonijana \hat{H}_i^3 i \hat{H}_i^4 na sva stanja prethodne generacije $G - 1$, te zadržavamo samo stanja koja zadovoljavaju rezonantni uvjet $\left| \frac{\langle n^{G-1} | \hat{H}_i^{3,4} | m^G \rangle}{\tilde{E}_0^0 - \tilde{E}_m^G} \right| > R$.

Konstrukcija reducirane baze

Reduciranu bazu konstruiramo iterativno kroz G generacija počevši od stanja $|n\rangle$ kao jedinog stanja u nultoj, početnoj generaciji. Svaku generaciju dobivamo djelovanjem Hamiltonijana \hat{H}_i^3 i \hat{H}_i^4 na sva stanja prethodne generacije $G - 1$, te zadržavamo samo stanja koja zadovoljavaju rezonantni uvjet $\left| \frac{\langle n^{G-1} | \hat{H}_i^{3,4} | m^G \rangle}{\tilde{E}_0^0 - \tilde{E}_m^G} \right| > R$.

Kompletna reducirana baza je stoga $|\bar{n}\rangle = \{|n\rangle, |n^1\rangle, \dots, |n^G\rangle\}$ te unutar tako konstruirane baze možemo egzaktno dijagonalizirati hamiltonijan sustava te dobiti odgovarajuća svojstvena stanja $|\tilde{m}\rangle$ i svojstvene energije $E_{\tilde{m}}$ kao aproksimaciju egzaktnih.

Konstrukcija reducirane baze

Reduciranu bazu konstruiramo iterativno kroz G generacija počevši od stanja $|n\rangle$ kao jedinog stanja u nultoj, početnoj generaciji. Svaku generaciju dobivamo djelovanjem Hamiltonijana \hat{H}_I^3 i \hat{H}_I^4 na sva stanja prethodne generacije $G - 1$, te zadržavamo samo stanja koja zadovoljavaju rezonantni uvjet $\left| \frac{\langle n^{G-1} | \hat{H}_I^{3,4} | m^G \rangle}{\tilde{E}_0^0 - \tilde{E}_m^G} \right| > R$.

Kompletna reducirana baza je stoga $|\bar{n}\rangle = \{|n\rangle, |n^1\rangle, \dots, |n^G\rangle\}$ te unutar tako konstruirane baze možemo egzaktno dijagonalizirati hamiltonijan sustava te dobiti odgovarajuća svojstvena stanja $|\tilde{m}\rangle$ i svojstvene energije $E_{\tilde{m}}$ kao aproksimaciju egzaktnih.

Mijenjanjem parametra R možemo kontrolirati broj stanja po generaciji \Rightarrow izdvajanjem relevantnih stanja N_{st} za dinamiku sustava na drugim vremenima mogli bismo proučavati sustave s većim ($L > 16$) brojem čvorova!

Mnogočestična lokalizacija karakterizirana je neiščezavanjem korelacijskih funkcija na dugim vremenima \Rightarrow od interesa je promatrati relacije

$$\langle \hat{A}(t' + t) \hat{B}(t') \rangle = \frac{1}{N_{tot}} \text{Tr} \left[\hat{A}(t' + t) \hat{B}(t') \right]. \quad (16)$$

Mnogočestična lokalizacija karakterizirana je neišchezavanjem korelacijskih funkcija na dugim vremenima \Rightarrow od interesa je promatrati relacije

$$\langle \hat{A}(t' + t) \hat{B}(t') \rangle = \frac{1}{N_{tot}} \text{Tr} \left[\hat{A}(t' + t) \hat{B}(t') \right]. \quad (16)$$

U granici beskonačne temperature i aproksimaciji reducirane baze prethodna relacija se svodi na

$$\langle \hat{A}(t' + t) \hat{B}(t') \rangle \simeq \frac{1}{N_{st}} \sum_{n=1}^{N_{st}} \langle n | \hat{A}(t' + t) \hat{B}(t') | n \rangle. \quad (17)$$

Zapravo nas zanima dugovremensko ponašanje $t \rightarrow \infty$ pa se mogu promatrati vremenska usrednjenja bez eksplicitne ovisnosti o početnom trenutku

$$\begin{aligned} C_{AB}(t) &= \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{\tau} \int_0^\tau dt' \frac{1}{N_{st}} \sum_{n=1}^{N_{st}} \langle n | \hat{A}(t' + t) \hat{B}(t') | n \rangle \\ &= \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{\tau} \int_0^\tau dt' \frac{1}{N_{st}} \sum_{\substack{n=1 \\ \tilde{m} \tilde{l} \tilde{p}}}^{N_{st}} \langle n | \tilde{m} \rangle A_{\tilde{m} \tilde{l}} B_{\tilde{l} \tilde{p}} \langle \tilde{p} | n \rangle e^{i[E_{\tilde{m}}(t+t') - E_{\tilde{l}}t - E_{\tilde{p}}t']} \\ &= \frac{1}{N_{st}} \sum_{\substack{n=1 \\ \tilde{m} \tilde{l}}}^{N_{st}} |\langle n | \tilde{m} \rangle|^2 A_{\tilde{m} \tilde{l}} B_{\tilde{l} \tilde{m}} e^{i(E_{\tilde{m}} - E_{\tilde{l}})t}. \end{aligned} \quad (18)$$

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

$$\begin{aligned} D_{AB} &= \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{\tau} \int_0^{\tau} dt C_{AB}(t) \\ &= \frac{1}{N_{st}} \sum_{n, \tilde{m}} |\langle n | \tilde{m} \rangle|^2 A_{\tilde{m}\tilde{m}} B_{\tilde{m}\tilde{m}}, \end{aligned} \quad (19)$$

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

$$D_{AB} = \frac{1}{N_{tot}} \sum_{\tilde{m}} A_{\tilde{m}\tilde{m}} B_{\tilde{m}\tilde{m}}. \quad (20)$$

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

$$\begin{aligned} D_{AB} &= \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{\tau} \int_0^{\tau} dt C_{AB}(t) \\ &= \frac{1}{N_{st}} \sum_{n, \tilde{m}} |\langle n | \tilde{m} \rangle|^2 A_{\tilde{m}\tilde{m}} B_{\tilde{m}\tilde{m}}, \end{aligned} \quad (19)$$

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

$$D_{AB} = \frac{1}{N_{tot}} \sum_{\tilde{m}} A_{\tilde{m}\tilde{m}} B_{\tilde{m}\tilde{m}}. \quad (20)$$

Doprinosi za dugovremensko ponašanje ovise izravno o preklopu s početnim stanjem $|n\rangle \Rightarrow$ aproksimacija reducirane baze trebala bi davati dobru aproksimaciju dugovremenskog ponašanja korelacijskih funkcija!

Konkretno, promatrati ćemo dugovremensku korelacijsku funkciju nabojne gustoće na pojedinom čvoru rešetke i

$$D_i = \frac{1}{N_{st}} \sum_{n, \tilde{m}} |\langle n | \tilde{m} \rangle|^2 [(\delta \hat{n}_i)_{\tilde{m}\tilde{m}}]^2, \quad (21)$$

gdje je $\delta \hat{n}_i = \hat{n}_i / \bar{n} - 1$ operator fluktuacije gustoće.

Konkretno, promatrati ćemo dugovremensku korelacijsku funkciju nabojne gustoće na pojedinom čvoru rešetke i

$$D_i = \frac{1}{N_{st}} \sum_{n, \tilde{m}} |\langle n | \tilde{m} \rangle|^2 [(\delta \hat{n}_i)_{\tilde{m}\tilde{m}}]^2, \quad (21)$$

gdje je $\delta \hat{n}_i = \hat{n}_i / \bar{n} - 1$ operator fluktuacije gustoće.

- ergodična faza: za duga vremena jednaka gustoća naboja na svim čvorovima $n_i = \bar{n} \Rightarrow$ korelacijska funkcija D_i iščezava

Konkretno, promatrati ćemo dugovremensku korelacijsku funkciju nabojne gustoće na pojedinom čvoru rešetke i

$$D_i = \frac{1}{N_{st}} \sum_{n, \tilde{m}} |\langle n | \tilde{m} \rangle|^2 [(\delta \hat{n}_i)_{\tilde{m}\tilde{m}}]^2, \quad (21)$$

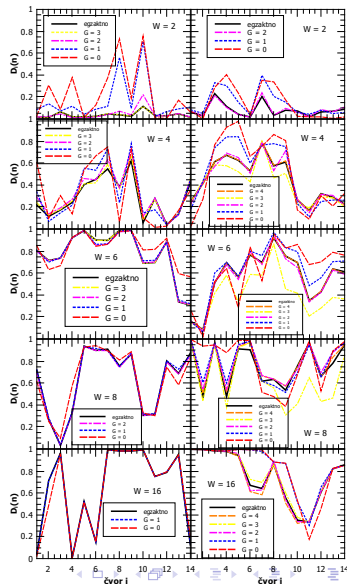
gdje je $\delta \hat{n}_i = \hat{n}_i / \bar{n} - 1$ operator fluktuacije gustoće.

- ergodična faza: za duga vremena jednaka gustoća naboja na svim čvorovima $n_i = \bar{n} \Rightarrow$ korelacijska funkcija D_i iščezava
- lokalizirana faza: za duga vremena naboj lokaliziran na pojedinim čvorovima $n_i = 0, 1 \Rightarrow$ korelacijska funkcija D_i poprima konačnu vrijednost

- računate su korelacijske funkcije gustoće bez usrednjavanja po početnim stanjima

$$D_i(n) = \sum_{\tilde{m}} |\langle n | \tilde{m} \rangle|^2 [(\delta n_i)_{\tilde{m}\tilde{m}}]^2, \quad (22)$$

za sustave s $L = 14$ čvorova i $t = V = 1$

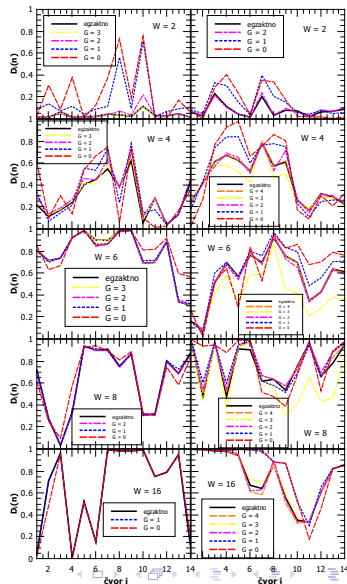


- računate su korelacijske funkcije gustoće bez usrednjavanja po početnim stanjima

$$D_i(n) = \sum_{\tilde{m}} |\langle n | \tilde{m} \rangle|^2 [(\delta n_i)_{\tilde{m}\tilde{m}}]^2, \quad (22)$$

za sustave s $L = 14$ čvorova i $t = V = 1$

- za $W = 2$ prosječna vrijednost korelacijske funkcije iščezava \Rightarrow ergodično ponašanje

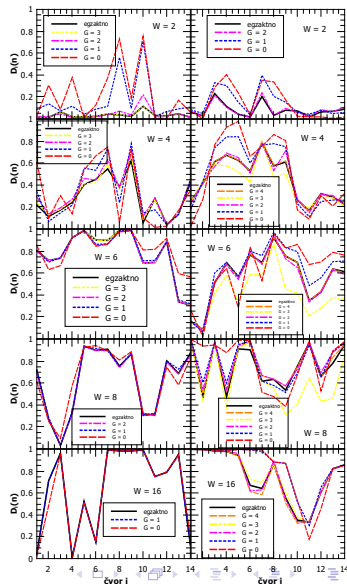


- računate su korelacijske funkcije gustoće bez usrednjavanja po početnim stanjima

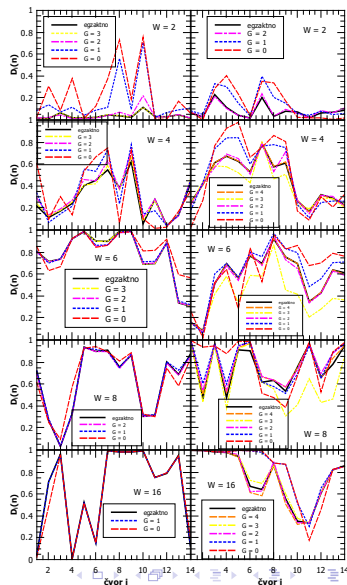
$$D_i(n) = \sum_{\tilde{m}} |\langle n | \tilde{m} \rangle|^2 [(\delta n_i)_{\tilde{m}\tilde{m}}]^2, \quad (22)$$

za sustave s $L = 14$ čvorova i $t = V = 1$

- za $W = 2$ prosječna vrijednost korelacijske funkcije iščezava \Rightarrow ergodično ponašanje
- za $W \geq 6$ postoje dijeli sustava s ergodičnim $D_i(n) \approx 0$ i dijelovi sustava s neergodičnim ponašanjem $D_i(n) \approx 1$

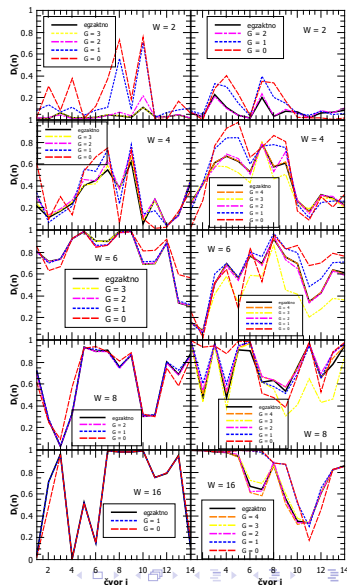


Lijevi stupac prikazuje primjere tipičnog ponašanja korelacijske funkcije kroz generacije.



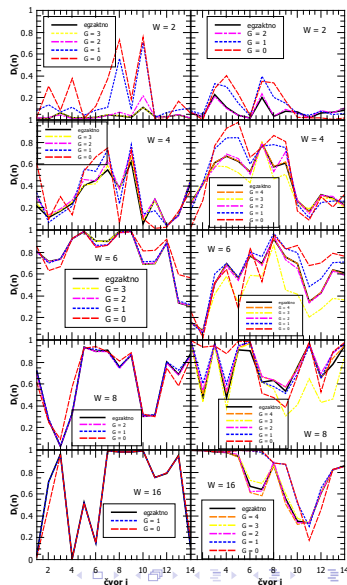
Lijevi stupac prikazuje primjere tipičnog ponašanja korelacijske funkcije kroz generacije.

- u trećoj generaciji izvršno slaganje s egzaktnim rezultatima

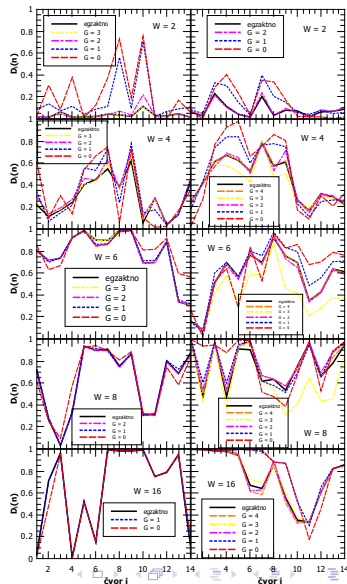


Lijevi stupac prikazuje primjere tipičnog ponašanja korelacijske funkcije kroz generacije.

- u trećoj generaciji izvrsno slaganje s egzaktnim rezultatima
- za jake neredne ($W \geq 8$) već nulta generacija daje jako dobre rezultate \Rightarrow jako mali broj stanja potreban za opis sustava \Rightarrow neergodična dinamika

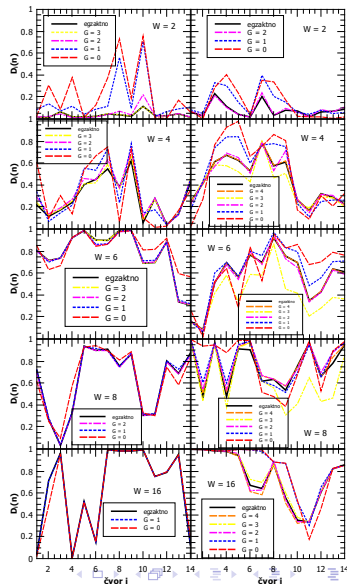


Desni stupac (za neredne $W > 2$) prikazuje dva tipa netipičnog ponašanja korelacijske funkcije kroz generacije.



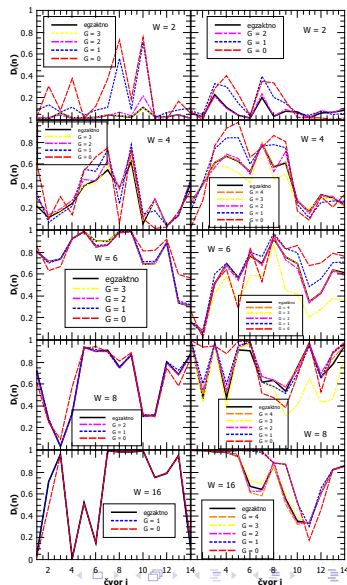
Desni stupac (za neredne $W > 2$) prikazuje dva tipa netipičnog ponašanja korelacijske funkcije kroz generacije.

- prvi tip karakterizira veliko odstupanje u jednoj generaciji, na slici treća generacija za neredne $W = 4 - 8$

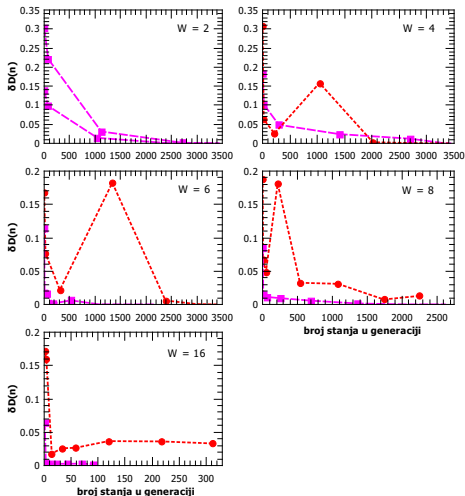


Desni stupac (za neredu $W > 2$) prikazuje dva tipa netipičnog ponašanja korelacijske funkcije kroz generacije.

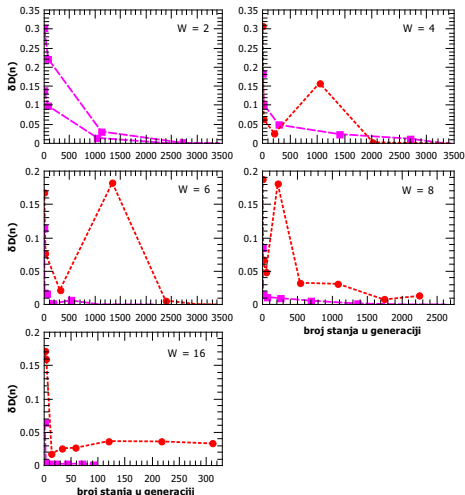
- prvi tip karakterizira veliko odstupanje u jednoj generaciji, na slici treća generacija za neredu $W = 4 - 8$
- za drugi tip je specifično da korelacijska funkcija na pojedinim čvorovima iskazuje odstupanja i za veće G , na slici slučaj $W = 16$



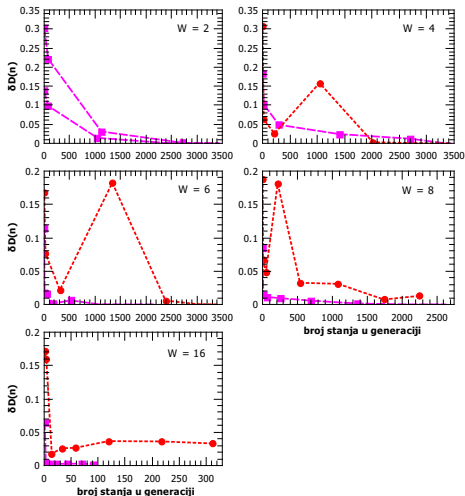
- za male neredne brojeve stanja raste razmjerno brzo s generacijama
⇒ ergodično ponašanje sustava



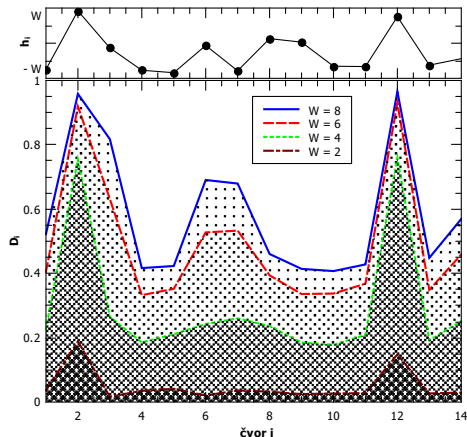
- za male neredne broje stanja raste razmjerno brzo s generacijama \Rightarrow ergodično ponašanje sustava
- za velike neredne broje relevantnih stanja relativno mali \Rightarrow neergodično ponašanje sustava



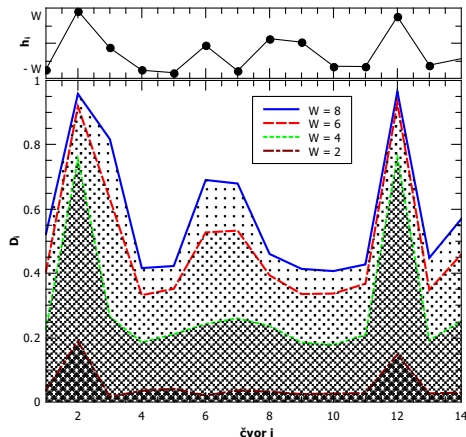
- za male neredne broje stanja raste razmjerno brzo s generacijama \Rightarrow ergodično ponašanje sustava
- za velike neredne broje relevantnih stanja relativno mali \Rightarrow neergodično ponašanje sustava
- netipična ponašanja nisu vezana za nikakva kvalitativna odstupanja, aproksimacija jednostavno ne uspijeva odrediti fini međuođnos između jednog do dva relevantna stanja



- postoji jasna prostorno ovisna veza između konfiguracije nereda h_i i vrijednosti korelacijske funkcije nakon potpunog uprosječavanja D_i (20) \Rightarrow ponašanje kao kod staklastih stanja



- postoji jasna prostorno ovisna veza između konfiguracije nereda h_i i vrijednosti korelacijske funkcije nakon potpunog uprosječavanja D_i (20) \Rightarrow ponašanje kao kod staklastih stanja
- izgleda kao da se korelacijska funkcija D_i skalira s jačinom nereda $W \Rightarrow$ kontinuirani prijelaz iz neergodične u lokaliziranu fazu



- opisana je aproksimacija reducirane baze u kontekstu računanja dugovremenskih korelacijskih funkcija u modelu mnogočestične lokalizacije te su numeričkim računom dobivene neke karakteristike ergodične i neergodične faze

- opisana je aproksimacija reducirane baze u kontekstu računanja dugovremenskih korelacijskih funkcija u modelu mnogočestične lokalizacije te su numeričkim računom dobivene neke karakteristike ergodične i neergodične faze
 - za mali nered u ergodičnoj fazi prosječna vrijednost korelacijske funkcije gustoće iščezava

- opisana je aproksimacija reducirane baze u kontekstu računanja dugovremenskih korelacijskih funkcija u modelu mnogočestične lokalizacije te su numeričkim računom dobivene neke karakteristike ergodične i neergodične faze
 - za mali nered u ergodičnoj fazi prosječna vrijednost korelacijske funkcije gustoće iščezava
 - u slučaju jakih nereda korelacijska funkcija pokazuje jaku prostornu ovisnost koreliranu s konkretnom konfiguracijom nereda \Rightarrow postoje dijelovi sustava s ergodičnim i neergodičnim ponašanjem korelacija

- opisana je aproksimacija reducirane baze u kontekstu računanja dugovremenskih korelacijskih funkcija u modelu mnogočestične lokalizacije te su numeričkim računom dobivene neke karakteristike ergodične i neergodične faze
 - za mali nered u ergodičnoj fazi prosječna vrijednost korelacijske funkcije gustoće iščezava
 - u slučaju jakih nereda korelacijska funkcija pokazuje jaku prostornu ovisnost koreliranu s konkretnom konfiguracijom nereda \Rightarrow postoje dijelovi sustava s ergodičnim i neergodičnim ponašanjem korelacija
 - korelacijska funkcija izravno prati svojstva prostorne raspodjele nereda \Rightarrow konzistentno sa staklastim stanje

- opisana je aproksimacija reducirane baze u kontekstu računanja dugovremenskih korelacijskih funkcija u modelu mnogočestične lokalizacije te su numeričkim računom dobivene neke karakteristike ergodične i neergodične faze
 - za mali nered u ergodičnoj fazi prosječna vrijednost korelacijske funkcije gustoće iščezava
 - u slučaju jakih nereda korelacijska funkcija pokazuje jaku prostornu ovisnost koreliranu s konkretnom konfiguracijom nereda \Rightarrow postoje dijelovi sustava s ergodičnim i neergodičnim ponašanjem korelacija
 - korelacijska funkcija izravno prati svojstva prostorne raspodjele nereda \Rightarrow konzistentno sa staklastim stanje
 - prijelaz između ergodične i lokalizirane faze kontinuiran

- u većini slučajeva dolazi do brze konvergencije rezultata po generacijama egzaktnim vrijednostima \Rightarrow već s malim brojem generacija možemo obuhvatiti svu relevantnu fiziku za proučavanje dinamike sustava na dugim vremenskim skalama

- u većini slučajeva dolazi do brze konvergencije rezultata po generacijama egzaktnim vrijednostima \Rightarrow već s malim brojem generacija možemo obuhvatiti svu relevantnu fiziku za proučavanje dinamike sustava na dugim vremenskim skalama
- aproksimacija izrazito efikasna u lokaliziranoj fazi \Rightarrow mogućnost proučavanja lokalizirane faze na sustavima velikih dimenzija i sigurniju raspravu o ponašanju sustava s jakim neredom u termodinamičkoj granici $L \rightarrow \infty$