

Московский физико-технический институт  
(государственный университет)  
Институт теоретической и экспериментальной физики

выпускная работа магистра

«Термализация собственного состояния в  
квантовой спиновой цепочке»

студента 121 группы  
Бекетова М.Е.  
Научный руководитель:  
Дымарский А., Ph.D.

Москва 2017

# Содержание

Введение: термализация и ETH	2
Модель спиновой цепочки	5
Численный метод, пакет PRIMME	6
Статистика матричных элементов	9
Состояние подсистемы	12
Дополнение: точная диагонализация TFIM	17
Заключение	20
Список литературы	22

## Условные обозначения и соглашения

В приведенном тексте везде негласно принимается  $\hbar = 1$ . Там, где таким образом можно избежать путаницы, операторы над Гильбертовым пространством состояний обозначаются крышкой  $\hat{\mathcal{O}}$ , как и их матричное представление в нашем случае пространства конечной размерности. Эрмитово сопряжение обозначается  $A^\dagger$ . Матрицы Паули, в наборе с единичной  $2 \times 2$  матрицей задающие базис в соответствующем пространстве унитарных матриц, стандартно приняты

$$\sigma^x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma^y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (0.1)$$

Фробениусова норма матрицы  $n \times n$  стандартно определена согласованно с нормой вектора

$$\|\Psi\|^2 = \sum_{i=1}^n \Psi_i^* \Psi_i = \langle \Psi | \Psi \rangle, \quad \|A\|_F^2 = \sum_{i,j=1}^n |A_{ij}|^2 = \text{Tr}(A^\dagger A) \quad (0.2)$$

# Введение: термализация и ЕТН

Термализации в квантовых системах – процесс установления термодинамического равновесия – фундаментальный вопрос оснований квантовой статистики, механизм его остается сегодня вопросом интенсивной научной дискуссии – появляются все новые теоретические результаты и результаты численных симуляций. Особое внимание в последние два десятилетия этот вопрос получил в связи с успехами в области экспериментов над холодными атомами. Перед тем, как говорить об Eigenstate Thermalization Hypothesis (ЕТН) – гипотезе, претендующей на прояснение вопроса, следует обсудить термализацию вообще. Изложение здесь следует [7].

Термализация – явление, происходящее в изолированных многочастичных сильно взаимодействующих системах в возбужденных состояниях. Примерами таких систем могут выступать системы из холодных атомов, ионов, молекул, фотонов, электронов, спиновых частиц, кубитов, и т.д. Такие примеры многочисленны, и для некоторого класса из них характерно другое явление – многочастичная локализация (MBL) – обобщение Андерсоновской локализации на многочастичный случай с взаимодействием. Считается, что локализация и термализация – явления взаимоисключающие, потому далее мы всегда будем говорить о системах, в которых локализация не наблюдается. Это различие в последнее время активно изучается в связи с ЕТН.

Термализация не ожидается для состояний, близких к основному. Остановимся на динамике чистого состояния системы  $\rho(t) = |\Psi(t)\rangle\langle\Psi(t)|$  (хотя реальную многочастичную систему на практике невозможно приготовить в таком – в чистых состояниях у системы нулевая энтропия). Динамика определяется гамильтонианом  $H$ , который мы будем считать не зависящим от времени  $H(t) = H$  (дальнейшие заключения можно обобщить и на периодический случай  $H(t) = H(t + T)$  – т.н. системы Флоке – но тогда сохранения энергии нет, и нужно потребовать, чтобы источник такого периодического изменения вел себя классически – не было запутанности с системой).

Итак, если рассматриваемое чистое состояние  $|\Psi\rangle\langle\Psi|$  – собственное для Гамильтониана  $H|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle$ , динамика его тривиальна – в базисе собственных векторов  $H$  на диагонали  $\rho$  динамики нет, вся динамика происходит вне диагонали.

$$\rho_{nn}(t) = \rho_{nn}(0), \quad \rho_{nm}(t) = e^{i(\phi_n(t) - \phi_m(t))} \rho_{nm}(0) \quad (0.3)$$

Для макроскопической сильно-взаимодействующей системы обычным предположение статистической физики было бы достижение системой равновесия на бесконечном времени  $t \rightarrow \infty$ . Особенность равновесного состояния в том, что динамика в нем останавливается. Правильная постановка вопроса – не в справедливости этого предположения в общем случае, но в том, что представляет собой этот процесс (его и называют термализацией) достижения равновесия на  $t \rightarrow \infty$ . Эволюция изолированной же системы  $\rho(t) = U(t)\rho(0)U^\dagger(t)$  унитарна и обратима, и потому информация во всей системе сохраняется. Ясно, что в общем случае этой информации много больше, чем содержит в себе равновесное состояние  $\rho_\beta = \mathcal{Z}^{-1} e^{-\beta H}$ . Потому говорить о равновесии для всей системы нельзя – можно только для подсистем.

Итак, мы разбиваем нашу систему на две подсистемы:  $A$  и ее дополнение  $\bar{A}$ . Есть разные определения термодинамического предела, о котором мы будем говорить далее – мы будем иметь в виду  $\dim \bar{A} \rightarrow \infty$  удерживая  $\dim A$  конечным. Мы *не будем ограничиваться слабым взаимодействием* между  $A$  и  $\bar{A}$ , допускающим рассмотрение

$$H = H_A + H_{\bar{A}} + H_{\text{int}} \quad (0.4)$$

как двух не взаимодействующих подсистем с малым возмущением  $H_{\text{int}}$  и последующим пертурбативным описанием, как это обычно делается в такого рода задачах. Мы выбираем подсистемы  $A$  с конечным числом степеней свободы (только такие условия доступны эксперименту). Необязательно, однако, рассматривать сильно ограниченные в пространстве (локальные) подсистемы – речь может идти о конечной подсистеме из каких-то нелокальных возмущений-квазичастиц. Нас интересуют только подсистемы, доступные некоторому набору измеримых операторов (наблюдаемых). Состояние системы  $\rho$  всей системы задает состояние подсистемы

$$\rho_A = \text{Tr}_{\bar{A}} \rho \quad (0.5)$$

через частичный след (сумму по всем состояниям дополнения  $\bar{A}$ ). Состояние  $\rho_A$  содержит в себе всю информацию о наблюдаемых в  $A$ .

Симметрия по отношению к трансляции по времени (для стационарного Гамильтониана), отвечающая сохранению энергии, и сохранение нормировки состояния приводят (поворотом Вика) к соответствующим этим величинам множителям Лагранжа – температуре и хим. потенциалу. Множителями Лагранжа последние являются в задаче нахождения максимума энтропии при фиксированных средних, решение которой – равновесное состояние

$$\rho_{\beta, \mu} = \mathcal{Z}^{-1} e^{-\beta H - \mu N}. \quad (0.6)$$

Некоторые многочастичные системы интегрируемы, то есть богаты иными симметриями – для них решение такой задачи содержит и другие генераторы таких симметрий – интегралы движения  $I_i$ . Считается, что равновесие для них

$$\rho_{GGE} = \mathcal{Z}^{-1} e^{-\sum_i \beta_i I_i} \quad (0.7)$$

дается обобщенным распределением Гиббса (Generalized Gibbs Ensemble). Интегрируемость требует точной настройки (fine tuning) параметров модели, и в этом смысле класс не интегрируемых моделей шире и, как считается, доступнее для наблюдения или эксперимента. Если интегрируемая система находится в момент  $t = 0$  в собственном состоянии Гамильтониана (состояние с нулевой дисперсией энергии), коммутирующие с Гамильтонианом интегралы движения  $I_i$  тоже в собственном состоянии, и в процессе эволюции их значение потому фиксировано – потому подпространство всего пространства состояний  $\mathcal{H}$ , доступное системе, сильно ограничено.

Теперь, для подсистемы, термализацию следует определить как сходимость ее состояния к равновесию

$$\rho_A(t) \rightarrow \rho_A^{(\text{equil})}(\beta, \mu, \dots) \quad (0.8)$$

в пределе  $\dim \bar{A} \rightarrow \infty$ ,  $t \rightarrow \infty$ , где равновесие

$$\rho_A^{(\text{equil})} \equiv \text{Tr}_{\bar{A}} \left( \frac{e^{-\beta H - \mu N - \dots}}{\mathcal{Z}} \right). \quad (0.9)$$

Этот предел нужно правильно понимать – к примеру, если сначала рассмотреть  $\dim \bar{A} \rightarrow \infty$ , то интуитивно: если ‘температура’ в разных точках системы различна, равновесие не достигается за конечное время.

Физической возможности проверить это требование на уровне состояния нет – есть возможность только работать с наблюдаемыми в  $A$ . Более того, чрезвычайно мало конкретных моделей, для которых факт термализации можно аналитически продемонстрировать.

Удается только продемонстрировать, что не-термализующаяся система с введением возмущения, выбранного из унитарного ансамбля случайных матриц, термализуется – как сделано в классической работе [1], положившей начало обсуждению данной темы. (Ожидается, что упомянутые выше системы с  $H(t) = H(t + T)$  если и термализуются в таком смысле, то к равномерному распределению  $\rho_A \propto \hat{1}$ .)

Ясно, что если взаимодействие слабое, то  $H_A \approx \text{Tr}_A H$ , и потому локальное равновесие есть просто

$$\rho_A^{(\text{equil})} = \mathcal{Z}^{-1} e^{-\beta H_A}. \quad (0.10)$$

Если говорить о классических системах – термализация не возникает в детерминированной динамике – в том смысле, что определение термализации требует каких-то усреднений по времени. Другой подход – допустить неопределенность в начальных условиях уравнений движения (coarse graining) – хаос в классике возникает, когда динамика неустойчива по отношению к такому возмущению начальных условий. Все это обсуждение призвано подчеркнуть, что термализация в квантовых системах, если ЕТН справедлива, не требует привлечения таких дополнительных предположений.

Попыткой ответа на вопрос – как термализация появляется на уровне подсистемы в изолированной квантовой системе, если ее эволюция унитарна и обратима – является Eigenstate Thermalization Hypothesis. Она гласит, что *равновесное распределение на уровне подсистемы заложено в структуре собственных векторов Гамильтониана*. Эволюция собственного состояния – это просто изменение его общей фазы, а значит, *если собственное состояние термализуется – динамика его не играет в этом никакой роли*, и локальное равновесие предопределено в нем уже в  $t = 0$ . То есть если ЕТН справедлива, на уровне подсистемы *нет* разницы между тем, что предписывает ей канонический (или большой канонический) ансамбль, и собственным состоянием  $H$ . Равновесие для микроканонического ансамбля определяется плотностью состояний в промежутке значений энергии  $\Delta E$ . Если ЕТН справедлива, можно устремить  $\Delta E \rightarrow 0$ , рассматривая как бы ансамбли из единичных собственных состояний, потому что равновесие определяется не усреднением, но структурой состояний.

Как было отмечено, все знание о состоянии подсистемы ограничено наблюдаемыми на ней, потому автор ЕТН формулирует эту гипотезу через свойства наблюдаемых. Здесь изложение следует [8].

Рассмотрим одну из таких наблюдаемых,  $\hat{\mathcal{O}}$ , и сфокусируемся на поведении ее среднего

$$\langle \hat{\mathcal{O}}(t) \rangle = \langle \Psi(t) | \hat{\mathcal{O}} | \Psi(t) \rangle. \quad (0.11)$$

Термализация означает, что с течением времени эта величина стремится к своему равновесному значению

$$\mathcal{O}_{\text{th}} = \mathcal{Z}^{-1} \text{Tr} \left( \hat{\mathcal{O}} e^{-\beta \hat{H}} \right) \quad (0.12)$$

– даже если изначально система приготовлена в состоянии с сильно отличным от равновесного средним. Определение температуры – сложный вопрос. Если равновесное значение наблюдаемой определить таким образом – тогда  $\beta$  должна согласовывать среднее значение энергии

$$\beta : H_{\text{th}} = \bar{E}. \quad (0.13)$$

Локально, на уровне наблюдаемых, можно *определить* систему как находящуюся в термодинамическом равновесии в некоторый момент времени  $t$ , если для некоторого достаточного набора наблюдаемых верно

$$\left| \langle \hat{\mathcal{O}}(t) \rangle - \mathcal{O}_{\text{th}} \right| < \varepsilon, \quad (0.14)$$

где под  $\varepsilon$  следует понимать точность измерения – она может, разумеется, зависеть от самой наблюдаемой  $\mathcal{O} - \varepsilon_{\mathcal{O}}$ .

Тогда в базисе собственных состояний Гамильтониана  $\mathcal{O}_{\alpha\beta} = \langle \alpha | \mathcal{O} | \beta \rangle$ , где диагональные матричные элементы наблюдаемых постоянны, это возможно только если

$$|\mathcal{O}_{\alpha\alpha} - \mathcal{O}_{\text{th}}| < \varepsilon. \quad (0.15)$$

Потребовать (0.14) в некоторых моментах времени  $t$  недостаточно – в полном равновесии мы не ожидаем динамики значения наблюдаемой – значения наблюдаемых должны быть близки к равновесным большую часть времени. Тогда требование можно переформулировать как усреднение на  $(0, t)$  с последующим пределом  $t \rightarrow \infty$

$$\overline{(\langle \hat{\mathcal{O}}(t) \rangle - \bar{\mathcal{O}})^2} = \sum_{\alpha \neq \beta} |C_{\alpha}|^2 |C_{\beta}|^2 |\mathcal{O}_{\alpha\beta}|^2 < \varepsilon^2, \quad \text{где } \bar{\mathcal{O}} \equiv \sum_{\alpha} |C_{\alpha}| \mathcal{O}_{\alpha\alpha}. \quad (0.16)$$

Внедиагональные матричные элементы  $\mathcal{O}$  могут быть не малы, но в усреднении (0.16) осциллирующие экспоненты дают нулевой вклад.

Теперь для некоторого набора наблюдаемых справедливость ЕТН означает определенные свойства их матричных элементов. Автор ЕТН *предполагает*, что достаточно потребовать

$$\mathcal{O}_{\alpha\beta} = o(E_{\alpha}) \delta_{\alpha\beta} + e^{-S(\bar{E})/2} f(\bar{E}, \omega) R_{\alpha\beta}, \quad (0.17)$$

где  $a(E_{\alpha})$  – функция, от которой ожидается гладкость,  $S(\bar{E})$  – энтропия системы (то есть внедиагональные матричные элементы подавлены числом уровней),  $\bar{E} = 1/2(E_{\alpha} + E_{\beta})$ ,  $\omega = E_{\alpha} - E_{\beta}$ , а  $R_{\alpha\beta}$  – случайная величина с нулевым средним и единичным среднеквадратичным отклонением.

Ключевой *задачей* данной работы являлась проверка (0.17) изменения статистики внедиагональных элементов локальных наблюдаемых в спиновой цепочке Изинга в магнитном поле с ростом ее размера.

## Модель спиновой цепочки

Нас интересует антиферромагнитная цепочка Изинга из  $L$  спинов в однородном магнитном магнитном поле с продольной и поперечной компонентами (для удобства обозначенных  $\lambda$  – от longitudinal и  $\tau$  – от transverse соответственно)

$$H = - \sum_{n=1}^{L-1} \sigma_n^z \sigma_{n+1}^z + \tau \sum_{n=1}^L \sigma_n^x + \lambda \sum_{n=1}^L \sigma_n^z, \quad (0.18)$$

где с точностью до опущенного всюду  $\hbar = 1$  коэффициенты имеют размерность энергии и коэффициент при попарном взаимодействии принят за единицу отсчета (при необходимости это легко восстановимо соответствующим масштабированием всего спектра). Эмпирически, в случае отличия от нуля обоих параметров  $\lambda, \tau$  эта модель не решается аналитически (то есть известные способы не позволяют получить спектр такого Гамильтониана).

Случай  $\tau \neq 0, \lambda = 0$  называют просто Transverse Field Ising Model (TFIM), для него есть особое преобразование [11], диагонализующее Гамильтониан явно – оно рассмотрено далее отдельно. Используя в качестве нулевого приближения собственные числа и вектора такого

случая, для маленьких  $\lambda \ll 1$  модель можно пертурбативно решить для систем большего размера, чем обычно позволяет полная (или частичная) численная диагонализация, однако *критерий применимости* теории возмущений не позволяет этого сделать, когда  $\lambda$  становится сравнима с расстоянием между уровнями  $\lambda \sim 2^{-L}$ . Потому как представленные в этой работе результаты приведены для (исследуемого, в частности, в [4, 5, 6]) случая

$$\tau = 1.05, \quad \lambda = 0.1, \quad (0.19)$$

в котором интегрируемость сильно нарушена и ожидается термализация, для их получения неизбежна необходимость диагонализировать Гамильтониан численно.

Матричное представление Гамильтониана продиктовано представлением матриц Паули. Пространство состояний системы представляет собой тензорное произведение пространств каждого из спинов  $\mathcal{H} = \mathbb{C}^{2^{\otimes L}}$ , базис в нем задается произведением Кронекера базисных векторов (собственных векторов  $\sigma^z$ )

$$\mathbf{e} = \mathbf{e}_1 \otimes \mathbf{e}_2 \otimes \cdots \otimes \mathbf{e}_L, \quad \mathbf{e}_n \in \left\{ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right\}, \quad (0.20)$$

матричный вид элементов Гамильтониана потому

$$\sigma_n^{x,z} = \underbrace{1 \otimes \cdots \otimes 1}_{n-1} \sigma^{x,z} \otimes \underbrace{1 \cdots \otimes 1}_{L-n}, \quad \sigma_n^z \sigma_{n+1}^z = \underbrace{1 \otimes \cdots \otimes 1}_{n-1} \sigma^z \otimes \sigma^z \otimes \underbrace{1 \cdots \otimes 1}_{L-n-1} \quad (0.21)$$

где за 1 обозначена единичная матрица  $2 \times 2$ .

Далее речь пойдет о чистых состояниях, задающихся матрицей плотности  $\rho_\Psi = |\Psi\rangle\langle\Psi|$  – ранга  $\text{rk}(\rho_\Psi) = 1$ . Состояние подсистемы  $A$  при этом задается частичным следом по дополнению к ней  $\bar{A}$

$$\rho_\Psi^A = \text{Tr}_{\bar{A}} \rho_\Psi \quad (0.22)$$

В выбранном нами матричном представлении наиболее простая реализация частичного следа позволяет получать состояния  $\rho_m$  первых  $m = 1, 2, 3, \dots$  подряд идущих спинов в цепочке. При необходимости возможно изучать состояние любой подсистемы, используя оператор трансляции

$$\hat{T} = \prod_{n=1}^L \hat{P}_{n,n+1}, \quad \hat{P}_{n,n+1} = \underbrace{1 \otimes \cdots \otimes 1}_{n-1} \hat{P} \otimes \underbrace{1 \cdots \otimes 1}_{L-n-1}, \quad (0.23)$$

где  $\hat{P}$  – оператор Дирака перестановки двух спинов

$$2\hat{P} = \sigma^x \otimes \sigma^x + \sigma^y \otimes \sigma^y + \sigma^z \otimes \sigma^z + 1, \quad \hat{P} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (0.24)$$

можно последовательными действиями  $\rho \rightarrow \hat{T}\rho\hat{T}^{-1} = \hat{T}\rho\hat{T}^T$  оператора трансляций переводить интересующую подсистему ‘влево’ и после вычислять частичный след.

# Численный метод, пакет PRIMME

Нас интересуют состояния, лежащие в середине спектра Гамильтониана. Для выбранных значений параметров (0.19) спектр располагается почти симметрично

$$-L \lesssim E \lesssim L. \quad (0.25)$$

С ростом  $L$  в этот промежуток укладывается  $\mathcal{N} = 2^L$  собственных значений, а потому расстояние между уровнями становится порядка

$$\Delta E \sim 2^{-L}. \quad (0.26)$$

Внутри (0.25), как обсуждается далее, распределение уровней близко к нормальному с нулевым средним, потому вблизи нуля уровней экспоненциально много и расстояния между ними экспоненциально малы. Это представляет основную трудность в изучении таких моделей. Несколько упрощает задачу тот факт, что из-за локальности Гамильтониана (0.18) матричный его вид содержит  $O(\mathcal{N} \log \mathcal{N})$  ненулевых элементов (все слагаемые с  $\sigma^z$  дают вклад только в диагональ, каждое слагаемое с  $\sigma^x - 2^L$  ненулевых элементов, всего  $2^L + L \cdot 2^L$ ), что позволяет считать Гамильтониан довольно разреженной (sparse) матрицей, и потому работа численных методов занимает приемлемое время, если число искомых собственных векторов невелико.

Полная диагонализация для изучения интересующего нас явления кажется избыточной – более того, при экспоненциальном росте размерности в какой-то момент размер набора векторов становится сравним с объемом оперативной памяти – работа алгоритмов замедляется из-за кэширования, и обработка результатов усложняется.

Для численной диагонализации использовался программный пакет PRIMME [13, 14] (см. также GitHub). Этот пакет использует комбинацию численных методов – оптимизированные по памяти [15, 16, 17] версии Generalized Davidson (GD) и Jacobi-Davidson (JD) – в зависимости от запроса, с предусмотренными интерфейсами вызова в C, Fortran, Python, MATLAB.

Первый метод – GD – обобщение метода Дэвидсона – эффективен в задаче о поиске младших (наименьших) собственных чисел и векторов разреженной эрмитовой матрицы, близкой к диагональной, и по этой причине часто используется в задачах вычислительной химии. Второй метод – JD – считается на сегодняшний день наиболее эффективным для нахождения собственных векторов для собственных чисел, лежащих в середине спектра, и потому используется в описываемой задаче. Метод итеративный, и каждая итерация состоит из двух последовательных шагов:

1. Поиск  $(\theta, \mathbf{u})$  - приближения к неизвестному собственному числу и вектору  $(\lambda, \mathbf{x})$  в подпространстве  $\mathcal{U}$  фиксированной размерности  $\dim \mathcal{U} = k$ , где  $k$  совпадает с числом желаемых собственных векторов. Этот шаг называют subspace extraction.
2. Обновление подпространства, в котором ведется поиск. Вектора, обновляющие  $\mathcal{U} \rightarrow \tilde{\mathcal{U}}$ , ищутся в ортогональном дополнении к  $\mathcal{U}$  – методом итерации с отношением Рэля. Этот шаг называют subspace expansion.

На первой итерации приближение к  $\theta$  – собственному числу – можно выбрать непосредственно, задав таким образом область поиска – это представляет большое удобство для задачи, когда для границ спектра (0.25) и распределения уровней есть оценки. Вкупе с тем, что поправки к системам уравнений на вектора  $\{\mathbf{s}_i\}$ , обновляющие  $\mathcal{U}$ , для эрмитовых матриц



асимптотически спадают как  $O(\|\mathbf{s}\|^3)$  (в общем случае квадратично  $O(\|\mathbf{s}\|^2)$ ), это доставляет методу быструю сходимость. Подробнее о методе JD см., например, обзор [18].

Для Гамильтониана (0.18) методом JD находились системы (из пар собственных чисел и векторов) размеров  $k = 100, 300$  *наименьших по модулю* собственных значений. *Критерием остановки* метода является точность собственных векторов (в PRIMME и далее обозначается  $\text{tol}$  – tolerance), определенная обычным образом через норму невязки

$$\text{tol}_i(\theta, \mathbf{u}) \equiv \|\mathbf{A}\mathbf{u} - \theta\mathbf{u}\|. \quad (0.27)$$

Эта величина вычисляется на каждой итерации и сравнивается с запрашиваемым –  $\text{tol}$  – значением точности. Расстояния между уровнями в исследуемой задаче требуют разрешения собственных векторов лучшего  $\text{tol} \sim 2^{-L}$  (0.26). В данной работе *исследовались системы размеров*

$$L = 12, \dots, 17, \quad (0.28)$$

потому выбор  $\text{tol} = 10^{-7}$  обеспечивает запас точности (достаточный для системы размеров  $-\log_2 10^{-7} \approx 23.25$ ) в несколько порядков. По умолчанию для всех размеров (0.28) системы наилучшей доступной точностью выбиралась потому  $\text{tol} = 10^{-7}$ , (требование лучшей точности для систем таких размеров нецелесообразно, а время вычисления сильно возрастет) ниже результаты для невязок:

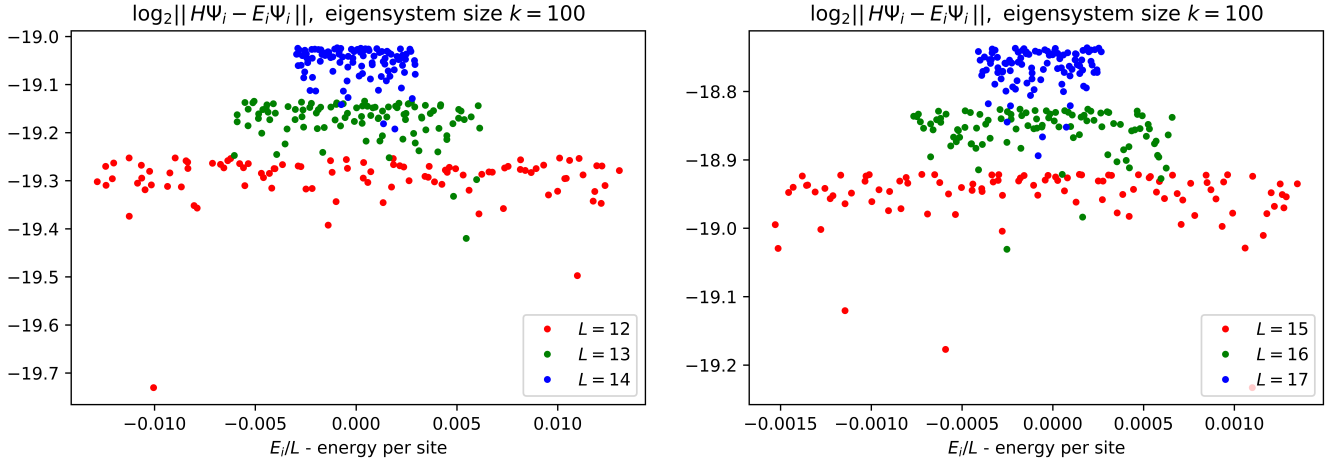


Рис. 1: Невязка собств. вектора в зависимости от средней энергии на спин.  $\text{tol} = 10^{-7}$

На приведенных графиках видно, во-первых, что при фиксированном  $k = 100$  числе изучаемых уровней из середины спектра ширина этого участка быстро уменьшается – число уровней в промежутке (0.25) в нормировке на число спинов  $-1 \lesssim E/L \lesssim 1$  растет как  $2^L$ . Во-вторых, точность получаемых векторов при одинаковой требуемой на  $\text{tol}$  ухудшается с ростом  $L$ , но, как видно, остается приемлемой по порядку (0.26).

Помимо  $\text{tol} = 10^{-7}$ , (лучшая доступная точность) для всех  $L = 12, \dots, 17$  спинов поиск  $k = 100$  собственных векторов из середины спектра велся также с  $\text{tol} = 10^{-3}, 10^{-4}, \dots, 10^{-6}$ . В качестве меры сходимости найденных таким образом собств. векторов к лучшим взят был средний (по набору размера  $k \cdot (k - 1)/2$ ) модуль их скалярных произведений на наилучшие собственные вектора (собственные значения, соответствующие каждой такой паре векторов,

различны – то есть среднее по ‘внедиагональным’ скалярным произведениям). Наблюдалась *сходимость к наилучшим векторам* с улучшением запрашиваемой точности. Для наилучших доступных векторов, на которых получены представленные далее результаты, порядок этой величины составляет  $|\langle \Psi_i | \Psi_j \rangle| \sim 10^{-14}$ ,  $i \neq j$  при  $\langle \Psi_i | \Psi_i \rangle \sim 1$  для всех  $L = 12, \dots, 17$  – с такой точностью набор собственных векторов можно считать ортогональным.

## Статистика матричных элементов

Основной интерес в ЕТН представляет (0.17) предположение Srednicki о статистике матричных элементов локальных наблюдаемых в системе. Выбор такой наблюдаемой в общем случае – предмет отдельного обсуждения. Здесь рассмотрен конкретный пример.

В подсистеме  $A$  из  $m = 1$  спина любой эрмитов оператор раскладывается по  $\{1, \sigma^x, \sigma^y, \sigma^z\}$  с вещественными коэффициентами. Матричные элементы  $\hat{1}$  тривиальны –  $\delta_{ij}$ . Мы ограничились изучением  $\sigma_i^x, \sigma_i^z$  с  $i = 1, \lfloor L/2 \rfloor$  – *компонент намагниченности* (0.21) соответственно, первого спина и спина, лежащего в середине цепочки. Для  $i = L$ , как ясно из симметрии, результаты (с точностью до погрешностей численных процедур) повторяют таковые для  $i = 1$ .

Для этих наблюдаемых есть возможность непосредственного измерения на эксперименте – на самом деле, из этого соображения правильнее рассматривать сумму нескольких  $m$  близко лежащих спинов, но мы ограничимся здесь  $m = 1$ .

В предположении о виде матричных элементов *ничего не утверждается о конкретном виде* их распределения. Из общих соображений можно полагать, что это распределение гауссово. (Для некоторых случаев такой факт можно доказать – в [1] показано, что для не термализующейся системы возмущение Гамильтониана, взятое из Гауссова унитарного ансамбля случайных матриц (GUA), приводит это распределение к гауссову виду.)

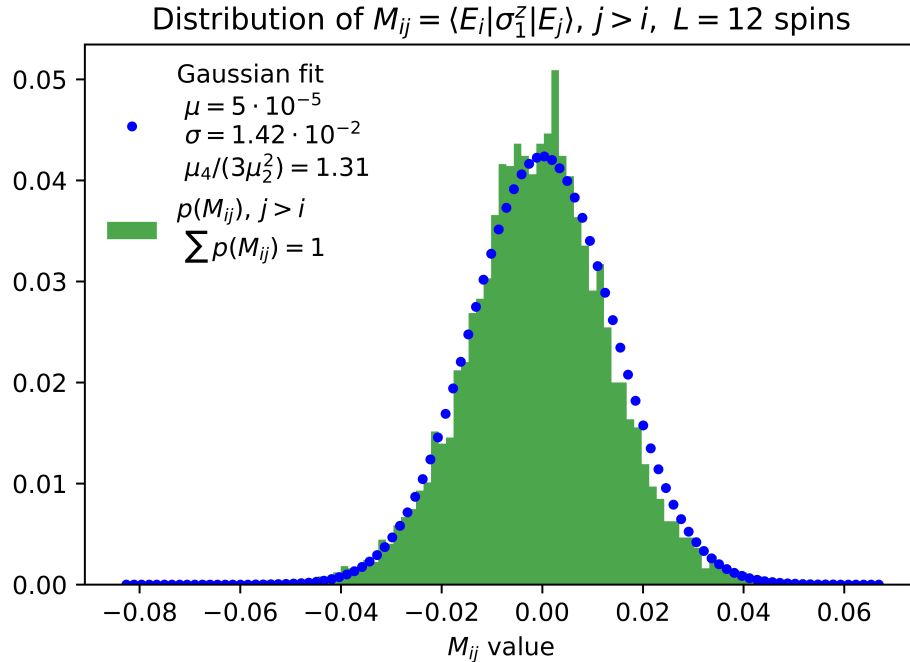


Рис. 2: Распределение внедиагональных матричных элементов  $\sigma_1^z$  для  $L = 12$  спинов.

Здесь мы приводим примеры графиков таких распределений. В согласии с  $\overline{R_{ij}} \approx 0$  (0.17) для  $\sigma_i^x, \sigma_i^z$  любого спина получается близкое к нулю среднее ( $\mu \sim 0$  в сравнении с  $\sigma$  – стандартным отклонением) на графиках. Распределение матричных элементов  $\sigma^x$ , однако, визуально *отличается от гауссова* для всех размеров систем. Этот факт примечателен. Для сравнения с нормальным распределением вычисляется коэффициент эксцесса/островершинности (точнее англ. kurtosis = коэф. эксцесса + 3)

$$\text{Kurt}[\xi] \equiv \frac{\mu_4}{\mu_2^2} = \frac{\mathbb{E}[(\xi - \mu)^4]}{(\mathbb{E}[(\xi - \mu)^2])^2}. \quad (0.29)$$

Несложно показать, что для нормального распределения  $\text{Kurt} = 3$ , потому удобно следить за отличием значения  $\eta \equiv \text{Kurt}/3$  от единицы – эта величина приводится на графиках. От распределений, для которых  $\eta > 3$ , ожидается ‘острый’ пик и медленное убывание распределения на  $\pm\infty$  – распределение Лапласа доставляет пример с  $\eta = 2$ .

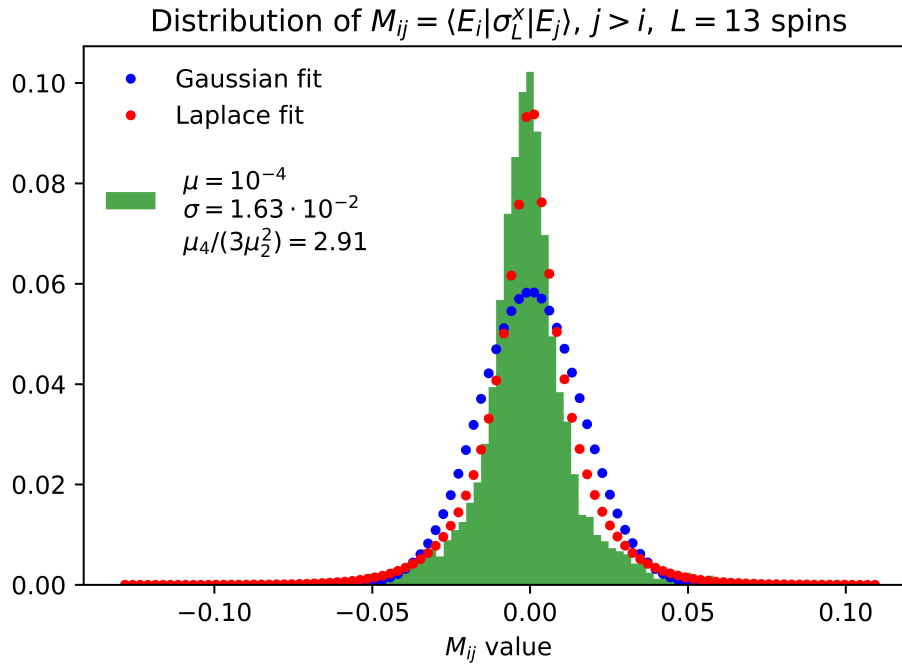


Рис. 3: Распределение внедиагональных матричных элементов  $\sigma_L^x$  для  $L = 13$  спинов.

На Рис. 3 это отличие от нормального распределения заметно (для примера рассмотрена  $\sigma_L^x$  – для последнего спина в цепочке). Можно ожидать изменения ситуации с увеличением  $k$  – размером той части спектра, на собственных состояниях из которой получены эти матричные элементы. Однако для  $k = 1500$  в случае  $L = 12$  спинов это отличие от нормального распределения все так же сохраняется.

Приведем потому (Рис. 4) вид зависимости  $\eta$  для  $\sigma^x, \sigma^z$  от размеров системы, *увеличив при этом  $k$  до 300* (обозримое время занимает поиск стольких собств. векторов для  $L =$

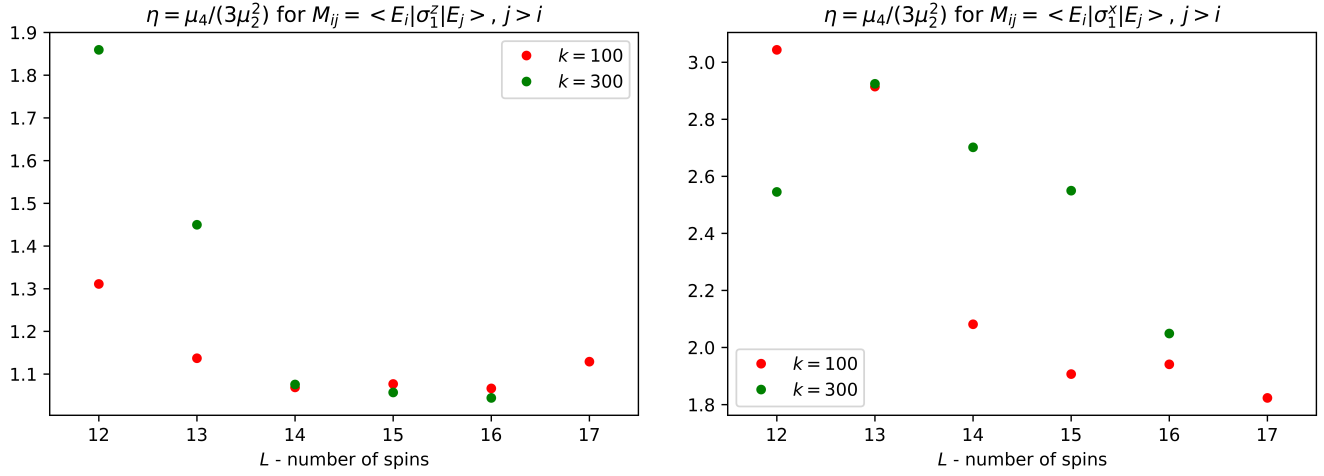


Рис. 4: Отличие от нормального распределения  $\eta = \mu_4/(3\mu_2^2)$  для  $\sigma_1^z, \sigma_1^x$  с ростом  $L$ .

12, ..., 16). Вид зависимости оставляет этот вопрос об отличии от нормального распределения для дальнейшего изучения и обсуждения – возможно, правильно говорить о нем в связи со статистикой уровней (зависимости  $M_{ij} = \langle E_i | \sigma^{x,z} | E_j \rangle$  от  $|E_i - E_j|$ ). Тем не менее, заметно, что для  $\sigma^z$  с ростом  $L$  и  $k$  параметр  $\eta$  близок к единице, потому распределение близко к нормальному, а для  $\sigma^x$  этот параметр остается больше значения 2, характерного для распр. Лапласа.

Основным в исследовании матричных элементов был вопрос о масштабировании их дисперсии с ростом  $L$ . Формула (0.17)

$$A_{\alpha\beta} = a(E_\alpha) \delta_{\alpha\beta} + e^{-S(\bar{E})/2} f(\bar{E}, \omega) R_{\alpha\beta} \quad (0.30)$$

предполагает  $\overline{R_{ij}} \approx 0$ ,  $\overline{R_{ij}^2} \approx 1$ . Экспоненциальный вклад хорошо прослеживается на Рис 5. Множитель при отложенных значениях выбран таким для сравнения с  $e^{-L/2}$ .

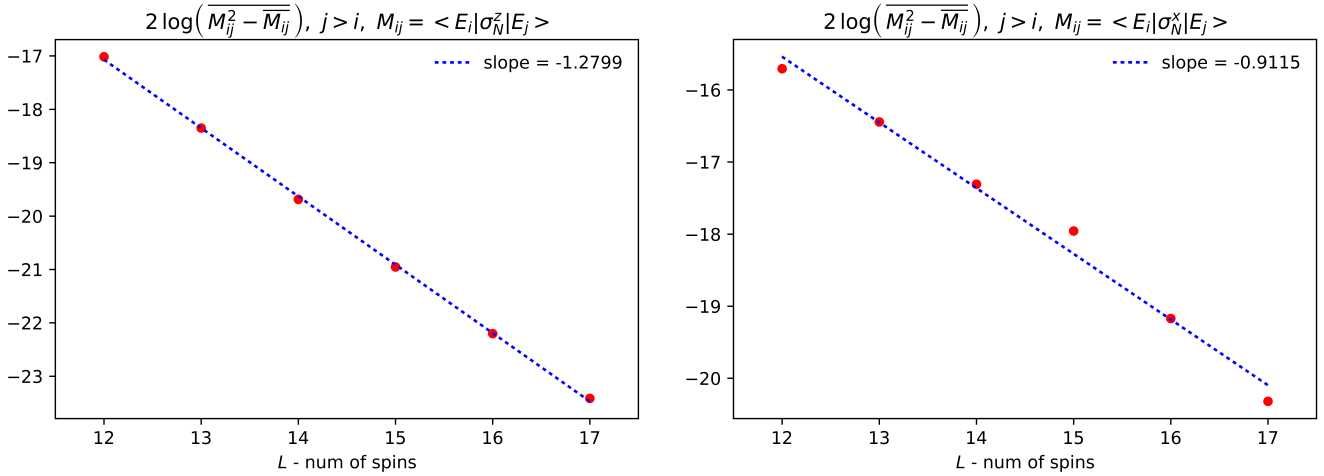


Рис. 5: Зависимость дисперсии матричных элементов от размера системы.

С увеличением размера  $k$  изучаемой части спектра ожидается [4] улучшение точности этого результата. Следует также изучить поведение *предэкспоненциальной* части. Энтропию в (0.30) можно определить через число состояний (или плотность уровней)  $\Omega(E)$  в точке  $E = 0$  – часть спектра, в которой мы работаем. Так как аналитическое решение модели неизвестно, точное выражение для плотности уровней – столь же сложная задача, как и собственно спектр Гамильтониана. Можно, однако, следуя [4, 5, 6], приблизить  $\Omega(E)$  биномиальным распределением

$$\Omega(E) = \frac{\kappa L!}{(L/2 - \kappa E)!(L/2 + \kappa E)!} \quad (0.31)$$

с параметром  $\kappa$ . При этом из однородности Гамильтониана считается, что вклад каждого спина в энергию приблизительно одинаков, потому число уровней определяется просто числом способов приписать каждому спину одно из 2 собственных состояний  $\sigma^z$ . При этом величина энергии сравнивается с  $L/2$  из предположения о том, что спектр с хорошей точностью симметричен относительно нулевого значения, а масштабный параметр  $\kappa$  должен оставлять справедливым условие нормировки  $\int \Omega(E) dE = 2^L$ . Его можно зафиксировать через второй момент

$$\kappa : \int E^2 \Omega(E) dE = \frac{L \cdot 2^{L-2}}{\kappa^2} = \text{Tr } H^2, \quad (0.32)$$

который несложно найти, используя  $(\sigma^{x,y,z})^2 = 1$ , откуда

$$\kappa = \frac{1}{2} (\tau^2 + \lambda^2 + 1)^{-1/2}. \quad (0.33)$$

Или уточненное значение

$$\kappa = \frac{1}{2} (\tau^2 + \lambda^2 + 1 - 1/L)^{-1/2}. \quad (0.34)$$

Плотность уровней можно также оценить из численных результатов, просто используя найденные  $k$  собственных значений  $\{\tilde{E}_i\}$

$$\Omega(E = 0) \approx \frac{k}{\max(\tilde{E}) - \min(\tilde{E})}. \quad (0.35)$$

Как видно на Рис. 6, эти два способа хорошо согласуются. Здесь использовалась формула Стирлинга для бета-функции [4] дающая приближение (0.31) для больших  $L$

$$\Omega(E = 0) \approx \frac{2^L}{\kappa \sqrt{2\pi}}. \quad (0.36)$$

В работе [4] поведение в  $E = 0$  предэкспоненты  $f(\bar{E}, \omega)$  уточняется

$$\tilde{\Omega}(E = 0) \approx \frac{2^L}{\kappa \sqrt{2\pi L}}. \quad (0.37)$$

Рассмотрим далее соответствие обоих выражений полученному поведению дисперсии.

Здесь на Рис. 7 представлены эти результаты. Для  $\sigma_L^z$  видно, что (0.36) и (0.37) дают хорошее предсказание для зависимости дисперсии от  $L$ . Потому разность графиков можно интерпретировать как  $\log f(\bar{E} = 0, \tilde{\omega})$ , где  $\tilde{\omega}$  – некоторое усреднение. Для  $\sigma_L^x$  ситуация существенно отличная.

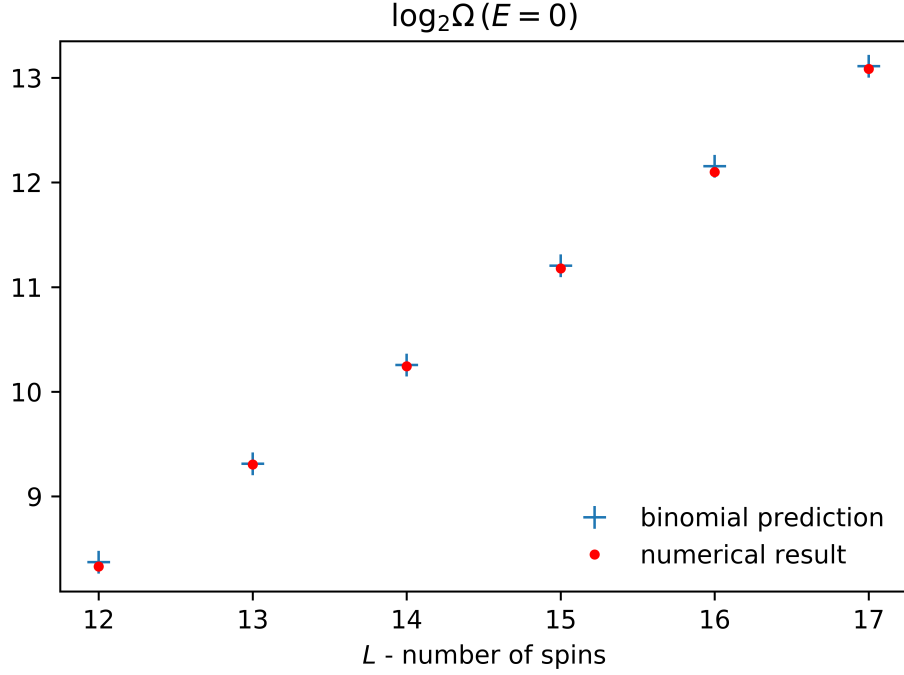


Рис. 6: Плотность состояний системы в  $E = 0$ .

## Состояние подсистемы

Термализация не ограничивается определенным видом (0.17) наблюдаемых, если физическая система моделируется и можно изучить непосредственно состояние. Вся информация о значениях наблюдаемых в подсистеме содержится в ее состоянии, а физическая возможность наблюдателя извлечь эту информацию ограничена наблюдаемыми. Потому автор ЕТН предпочитает формулировать эту гипотезу через их свойства.

Можно задаться вопросом – как выглядит *состояние подсистемы*, когда вся система находится, например, в собственном состоянии Гамильтониана. Для многочастичной системы как (0.18) приготовить в реальных условиях систему в собственном состоянии не представляется возможным. Разумнее говорить о состояниях системы (не таких труднодоступных), представляющих собой суперпозиции собственных состояний, энергии которых лежат в небольшом промежутке  $\Delta E$ . Однако идея ЕТН в том, что на уровне подсистемы термализация ‘заложена’ уже в собственных состояниях, потому здесь мы ограничимся их анализом.

Итак, для собственного состояния  $|E\rangle$  строится состояние подсистемы  $A$  из  $m = 1, 2, 3$  первых соседних спинов в цепочке

$$\rho_E = \text{Tr}_{\bar{A}} |E\rangle \langle E|. \quad (0.38)$$

Нас интересует близость этого состояния к равновесному (термальному). Определить такое, как описано во введении, можно не одним способом. Можно рассмотреть  $H_A$  – ограничение Гамильтониана на подсистему

$$H = H_A + H_{\bar{A}} + H_{\text{int}}, \quad (0.39)$$

пренебрегая  $H_{\text{int}}$  – взаимодействием между  $A$  и  $\bar{A}$ , и определить (локальное) равновесное состояние как

$$\rho_{\beta_A} = \mathcal{Z}_A^{-1} e^{-\beta_A H_A}. \quad (0.40)$$

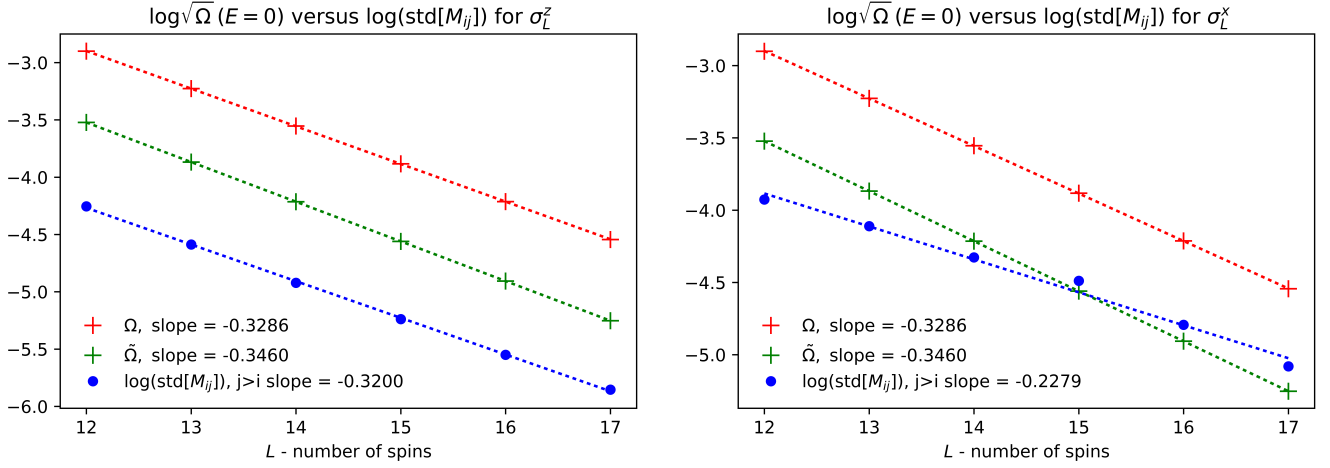


Рис. 7: Плотность состояний в  $E = 0$  и дисперсия матричных элементов.

Тогда  $\beta_A$  можно придать смысл ‘локальной’ [9] температуры. В изучаемом Гамильтониане взаимодействие не пренебрежимо мало, но  $H_{\text{int}} = -\sigma_m^z \sigma_{m+1}^z$ , потому заметив, что  $\text{Tr} \sigma^{x,y,z} = 0$ , можно непосредственно убедиться в следующем:

$$H_A = \frac{\text{Tr}_{\bar{A}} H}{\dim \bar{A}} \quad (0.41)$$

– просто потому, что слагаемые (0.21) Гамильтониана, действующие тождественно на  $\bar{A}$ , дают множитель

$$\text{Tr} \underbrace{1 \otimes \dots \otimes 1}_{L-m} = 2^{L-m}, \quad (0.42)$$

если  $A - m$  последовательных первых спинов, а любое слагаемое с отличным от тождественного действием на  $\bar{A}$  имеет нулевой след и потому не вносит вклада. Значит, с точностью до такой перенормировки  $\beta$ , определение 0.40 эквивалентно следующему

$$\tilde{\rho}_\beta = \mathcal{Z}^{-1} e^{-\beta \text{Tr}_{\bar{A}} H}, \quad (0.43)$$

где принято теперь  $\beta_A = \beta$ . Такое предположение об однородности температуры в общем случае не верно, но для однородной модели менее неразумно, чем для неоднородной – не ясно, как адекватно оценить  $\beta_A$ , в то время как  $\beta$  для всей системы это можно сделать. За этими определениями скрыто эффективное рассмотрение  $A$  и  $\bar{A}$  как системы и ее окружения, где размер окружения много больше размера системы. При таком рассмотрении  $\bar{A}$  выполняет роль термальной бани, англ. thermal bath. Отличие в нашем случае состоит в том, что дополнение  $\bar{A}$  – не маленькая подсистема, и о равновесии в нем говорить нельзя.

Мы рассмотрим (0.40) с предположением, что  $\beta_A = \beta$  и изучим, насколько это состояние близко к (0.38) собственному. Для этого необходимо определить  $\beta_\alpha$ , согласующее

$$E_i \underset{\beta_i-?}{=} \langle H \rangle \equiv \frac{\text{Tr} (H e^{-\beta_i H})}{\text{Tr} e^{-\beta_i H}} = - \left. \frac{\partial \log \mathcal{Z}}{\partial \beta} \right|_{\beta_i} \quad (0.44)$$

для доступных  $k = 100, 300$  собственных значений из середины спектра.

Эта задача для Гамильтониана (0.18) исследуемой модели не проста. В отсутствие поперечного поля (слагаемого с  $\sigma^x$  в Гамильтониане) Гамильтониан принимает диагональный вид и

модель эквивалентна классической. В таком случае, как показано в классической работе Онзагера [12], статсумму можно вычислить точно. Вкратце идея такова: вклады двух соседних пар спинов коммутируют, а потому

$$e^{H_{n-1,n}+H_{n,n+1}} = e^{H_{n-1,n}} \cdot e^{H_{n,n+1}} \quad (0.45)$$

(теорема Бейкера-Кэмпбелла-Хаусдорфа) и значит, если вклады спинов одинаковы (модель однородна), статсумма есть просто след матричной степени этих  $e^{-\beta H_{n,n+1}}$  вкладов

$$\mathcal{Z} = \text{Tr} (\mathcal{T}^{L-1}), \quad (0.46)$$

или  $\mathcal{T}^L$ , если граничные условия периодические. Для неоднородной модели, соответственно, это произведение таких матриц. Построенный так оператор называется трансфер-матрицей. При изучении квантовых систем, для которых можно выписать интегралы движения, последние представляют собой следы от степеней трансфер-матрицы (конечный линейно независимый набор размера  $\mathcal{N}$  – число степеней свободы). В нашем случае, однако, в присутствии поля по  $\sigma^x$ , показатели экспонент в статсумме не коммутируют, и способ не работает – это, впрочем, не является доказательством невозможности построить интегралы движения отличным способом. Этот общий вопрос об интегрируемости лежит за рамками данного обсуждения.

Для получения численным образом величин характерных температур состояний можно выбрать набор

$$\{\beta\} = (\beta_1, \dots, \beta_N), \quad (0.47)$$

например, с постоянным шагом  $\Delta\beta = \beta_{i+1} - \beta_i$  и вычислить в этих точках разностное приближение производной

$$\langle H \rangle (\beta_i) = \frac{1}{\Delta\beta} \log \frac{\mathcal{Z}_{\beta_i + \Delta\beta}}{\mathcal{Z}_{\beta_i}}, \quad (0.48)$$

после чего построить по этому набору точек  $\{\beta\}$  интерполяцию  $\langle H \rangle (\beta) \approx f(\beta)$ , и оценить согласующую среднее значение энергии температуру через обратную функцию  $\beta \equiv f^{-1}(E)$ . Для систем исследуемых нами размеров  $L = 12, \dots, 17$  вычисление матричных экспонент статсумм (использующее приближение Паде для ряда экспоненты) – сложная операция даже для разреженной матрицы Гамильтониана, занимающая много времени уже для небольших наборов температур (0.47). Другим разумным способом представляется переход в базис собственных векторов Гамильтониана, где просто

$$\langle H \rangle (\beta_i) = \frac{\sum_j E_j e^{-\beta_i E_j}}{\sum_j e^{-\beta_i E_j}}. \quad (0.49)$$

Это наблюдение нестрого демонстрирует, что сложность поиска оптимальной температуры (0.44) в общем случае такая же, что и сложность поиска всех собственных чисел Гамильтониана.

Величина (0.48) вычислялась в  $N = 200$  точках (0.47) в границах  $(\beta_{\min}, \beta_{\max}) = (-3.5, 3.5)$  (при этом  $\langle H \rangle (\beta_{\min}), \langle H \rangle (\beta_{\max})$  получались примерно  $E_{\min}, E_{\max}$ ) после чего нелинейным методом наименьших квадратов строилась интерполяция затравочной функцией (предположение было сделано из вида графиков)

$$f(\beta) = A \tanh(-a\beta + \phi) - \Phi \quad (0.50)$$



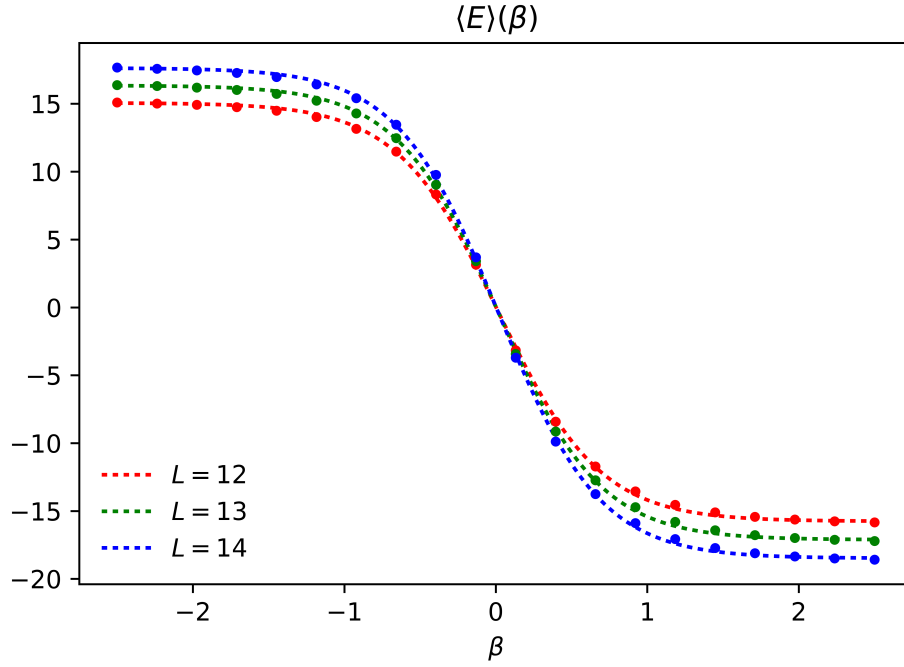


Рис. 8: Средняя энергия в зависимости от  $\beta$ , численный результат и интерполяция

Для тех  $k = 300$  собственных состояний из середины спектра посмотрим на их отличие от  $\rho_{\tilde{\beta}_A}$  по обычной норме Фробениуса (отличие на общую фазу невозможно, потому как все построенные численно матрицы вещественные).

На Рис. 9 прослеживается тенденция к уменьшению этого отличия с ростом размера  $L$  системы. Ожидается, что *в термодинамическом пределе* это отличие будет экспоненциально мало. Приведем результат усредненный по  $k = 300$  значениям, а также по  $k/2^{14-L} = 75, 150, 300$  значениям из середины спектра для  $L = 12, 13, 14$ , имея ввиду уменьшение промежутка энергий, занимаемого  $k = 300$  собственными числами.

Ожидается, что с появлением дополнительных симметрий в системе правильный вид равновесного состояния будет даваться обобщенным распределением Гиббса (0.7). В изучаемой нами модели спиновой цепочки несложно ввести, например, трансляционную симметрию: добавлением в Гамильтониан (0.18) взаимодействия между первым и последним спином  $-\sigma_1^z \sigma_L^z$ . Теперь оператор трансляции (0.23) коммутирует с Гамильтонианом  $[T, H] = 0$  и у них есть общий базис собственных состояний. Численный поиск общих собственных векторов подразумевает модификацию используемого алгоритма – собственные числа  $T^L = 1$  представляют собой корни из единицы, и правильно потому искать собственные вектора  $H$ , разбив  $\mathcal{H}$  на соответствующие подпространства. Можно, однако, отыскать собственные вектора прежним способом – они, как видно на Рис. 11, будут представлять собой небольшие наборы собственных векторов  $T$ , после чего поправить такой набор итеративной процедурой.

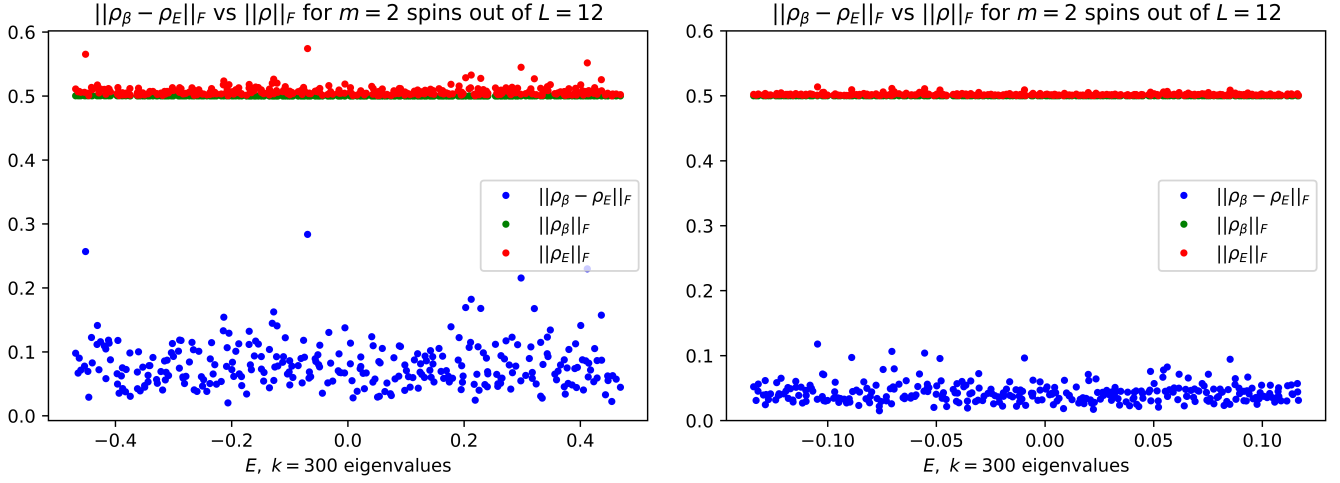


Рис. 9: Отличие состояния подсистемы из  $m = 2$  спинов от термального для  $L = 12, 14$ .

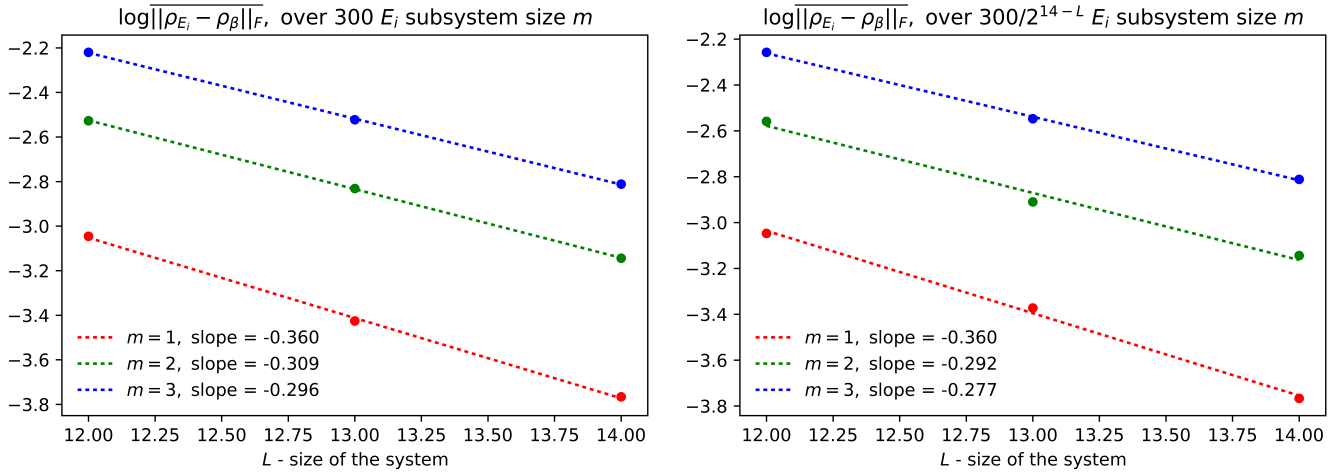


Рис. 10: Среднее отличие состояния подсистемы от термального с ростом  $L$ .

Следует проверить, можно ли уточнить выражение для равновесного состояния подсистемы, определив соответствующую  $\beta_T$ . Если находить соответствующее значение, как и ранее, интерполяцией по предвычисленному набору средних  $\langle E \rangle (\beta, \beta_T)$ ,  $\langle T \rangle (\beta, \beta_T)$ , это потребует уже двумерного набора точек (0.47).

Физический интерес такая ситуация представляет потому, что трансляционная инвариантность отвечает физически осмысленной наблюдаемой – если перейти от спинов к базису возмущений в системе (эта задача рассмотрена далее в дополнении) – суммарному импульсу таких возмущений. Можно непосредственно убедиться, что

$$\text{Tr}_{\bar{A}} T = T_A, \quad (0.51)$$

то есть  $T_A$  для подсистемы будет отвечать суммарному импульсу возмущений в ней. Это свойство аддитивности оператора трансляций согласуется с аддитивностью суммарного импульса и потому кажется, что  $T$  доставляет разумный пример физической величины для проверки ее присутствия в выражении для равновесного состояния – этот вопрос остается для дальнейшего исследования.

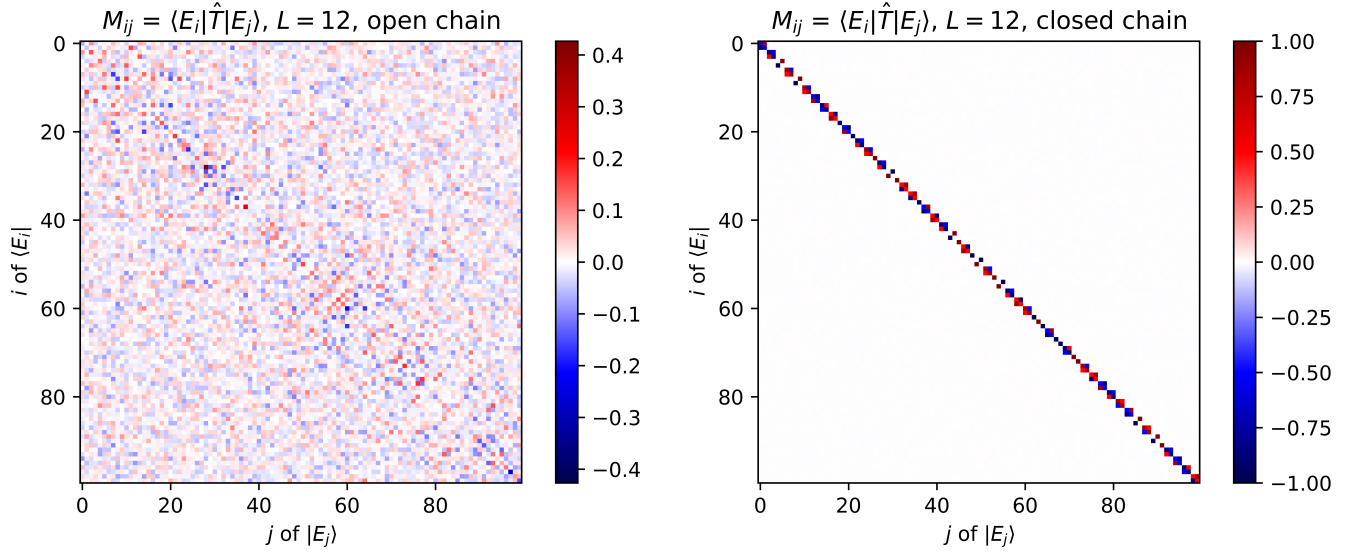


Рис. 11: Матричные элементы оператора трансляции для открытой и закрытой цепочек

## Дополнение: точная диагонализация TFIM

Гамильтониан (0.18) в случае  $\lambda = 0$ , отвечающий модели Изинга в поперечном магнитном поле (TFIM),

$$H = \sum_{n=1}^L (-\sigma_n^z \sigma_{n+1}^z + \tau \sigma_n^x), \quad (0.52)$$

можно явно диагонализировать, приведя к операторам рождения/уничтожения. Рассмотрим более простой случай – замкнутой или *закрытой* цепочки

$$H = \sum_{n=1}^L (-\sigma_n^z \sigma_{n+1}^z + \tau \sigma_n^x) - \sigma_L^z \sigma_1^z. \quad (0.53)$$

(Для открытой цепочки дальнейшие выкладки несколько усложняются, но идейно остаются такими же – изменится условие квантования квазиимпульсов.) Теперь Гамильтониан инвариантен относительно оператора трансляций. Известное преобразование Йордана-Вигнера [11] предлагает анзац для операторов рождения/уничтожения с правильными

$$\{c_n^\dagger, c_m\} = \delta_{nm}, \quad \{c_n, c_m\} = \{c_n^\dagger, c_m^\dagger\} = 0 \quad (0.54)$$

фермионными антикоммутиационными соотношениями

$$c_n^\dagger = \sigma_n^+ \prod_{m=1}^{n-1} \sigma_m^x, \quad c_n = \sigma_n^- \prod_{m=1}^{n-1} \sigma_m^x, \quad (0.55)$$

обеспеченными нелокальными множителями справа (эти множители называют иногда ‘струнами’ – они отвечают квазичастицам-возмущениям в задаче). Имея в виду  $(\sigma^x)^2 = 1$ , домножив на такую ‘струну’, легко выписать обратное преобразование

$$\sigma_n^x = 2c_n^\dagger c_n - 1, \quad \sigma_n^+ = c_n^\dagger \prod_{m=1}^{n-1} \sigma_m^x, \quad \sigma_n^- = c_n \prod_{m=1}^{n-1} \sigma_m^x. \quad (0.56)$$

Нужно иметь в виду, что сейчас мы работаем в  $x$ -базисе и потому

$$\sigma_n^\pm = \frac{1}{2}(\sigma_n^y \pm i\sigma_n^z), \text{ откуда } \sigma_n^z = -i(\sigma_n^+ - \sigma_n^-). \quad (0.57)$$

Теперь

$$H = \sum_{n=1}^{L-1} (c_n + c_n^\dagger) (c_{n+1} - c_{n+1}^\dagger) - P (c_L + c_L^\dagger) (c_1 - c_1^\dagger) + \tau \sum_{n=1}^L (2c_n^\dagger c_n - 1) \quad (0.58)$$

где  $P = \prod_{n=1}^L \sigma_n^x = \exp(i\pi \sum_n c_n^\dagger c_n) = (-1)^F$  ( $F$  – полное число фермионных возмущений) – оператор четности. Требование трансляционной инвариантности

$$H = \sum_{n=1}^L (c_n c_{n+1} - c_n^\dagger c_{n+1}^\dagger + c_n^\dagger c_{n+1} - c_{n+1}^\dagger c_n) + \tau \sum_{n=1}^L (2c_n^\dagger c_n - 1) \quad (0.59)$$

подразумевает  $P = -1$ ,  $c_{L+1} = c_1$  – периодическое,  $P = 1$ ,  $c_{L+1} = -c_1$  – антипериодическое граничное условия. Сделаем Фурье-преобразование

$$c_n = \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk}{2\pi} e^{ikn} c_k. \quad (0.60)$$

Интегрирование здесь схематическое – для конечной цепочки подразумевается дискретное преобразование, но корректные пределы суммирования легко восстановить из граничных условий.

Над

$$H = \sum_k \left( 2(\cos k - \tau) c_k^\dagger c_k + i \sin k (c_{-k}^\dagger c_k^\dagger + c_{-k} c_k) \right) - L\tau \quad (0.61)$$

сделаем поворот  $c_k = e^{i\pi/4} a_k$ , чтобы прийти к вещественнозначному виду

$$H = \sum_k \left( 2(\cos k - \tau) a_k^\dagger a_k + \sin k (a_{-k}^\dagger a_k^\dagger - a_{-k} a_k) \right) - L\tau \quad (0.62)$$

и сделаем преобразование Боголюбова с  $u_k, v_k \in \mathbb{R}$  и  $u_k^2 + v_k^2 = 1$

$$a_k = u_k b_k + v_k b_{-k}^\dagger, \quad a_k^\dagger = u_k b_k^\dagger + v_k b_{-k} \quad (0.63)$$

$$a_{-k}^\dagger = -v_k b_k + u_k b_{-k}^\dagger, \quad a_{-k} = -v_k b_k^\dagger + u_k b_{-k}, \quad (0.64)$$

после чего слагаемое примет вид

$$\begin{aligned} & 2(\cos k - \tau) \left( u_k^2 b_k^\dagger b_k + u_k v_k (b_k^\dagger b_{-k}^\dagger + b_{-k} b_k) + v_k^2 b_{-k} c_{-k}^\dagger \right) + \\ & + \sin k \left[ u_k^2 (b_{-k}^\dagger b_k^\dagger - b_{-k} b_k) + u_k v_k (b_{-k}^\dagger b_{-k} - b_k b_k^\dagger + b_k^\dagger b_k - b_{-k} b_{-k}^\dagger) + v_k^2 (-b_k b_{-k} + b_k^\dagger b_{-k}^\dagger) \right]. \end{aligned} \quad (0.65)$$

Приравняв нулю множитель при  $b_{-k} b_k$ ,

$$2u_k v_k (\cos k - \tau) + (-u_k^2 + v_k^2) \sin k = 0, \quad (0.66)$$

совместно с  $u_k^2 + v_k^2 = 1$  получим систему с решением

$$u_k = \sin \alpha, \quad v_k = \cos \alpha, \quad \tan(2\alpha) = \frac{\sin k}{\tau - \cos k}. \quad (0.67)$$

Мы получили желаемый вид

$$H = \sum_k \epsilon(k) \left( b_k^\dagger b_k - \frac{1}{2} \right), \quad (0.68)$$

где  $b_k^\dagger$  и  $b_k$  – новые правильно нормированные операторы рождения/уничтожения возмущений с дисперсионным соотношением

$$\epsilon(k) = 2\sqrt{\tau^2 - 2\tau \cos k + 1}. \quad (0.69)$$

Из граничных условий следуют условия квантования на значения квазиимпульсов:

$$k = \frac{2m\pi}{N}, \quad P = -1 \quad \text{и} \quad \frac{(2m+1)\pi}{N}, \quad P = 1, \quad (0.70)$$

где  $m = 0, 1, \dots, N - 1$ .

Как видно, физический смысл преобразования Йордана-Вигнера заключается в приведении ТФИМ к невзаимодействующим квазичастицам на прямой. Специфика одномерной задачи проявляется в том, что эти квазичастицы подчиняются Ферми-статистике, а потому в эффективном описании сильно отталкиваются – это делает невозможным квазиклассическое решение.

Это преобразование дает точный вид спектра ТФИМ – для систем меньших размеров  $L = 7, 8$  полной диагонализацией Гамильтониана с  $\lambda = 0$  был получен спектр, полностью согласующийся с (0.69). Помимо этого, оно позволяет строить полный набор собственных векторов – для этого необходимо найти, например, основное состояние  $|\text{vac}\rangle$ , и после, построив (в соответствующем матричном представлении) набор операторов  $b_k^\dagger$ , действовать на  $|\text{vac}\rangle$  – таким образом получая остальные  $2^L - 1$  собственных состояний.

## Заключение

В данной работе исследовалась термализация собственного состояния Гамильтониана на примере одномерной квантовой модели Изинга. Проверялось основное предположение ETH о виде матричных элементов наблюдаемых в подсистеме – об экспоненциальном спаде дисперсии внедиагональных матричных элементов наблюдаемых. Исследовались системы размеров  $L = 12, \dots, 17$ . Получить результаты для систем большего размера не удалось, потому утверждение о сохранении такой зависимости в термодинамическом пределе носит спекулятивный характер. Точных рассуждений о термодинамическом пределе не приведено. Идейно продемонстрирована невозможность аналитически диагонализировать и выписать интегралы движения известными автору на сегодняшний день методами.

Для одной из наблюдаемых масштабирование дисперсии внедиагональных матричных элементов получилось существенно отличным от предполагаемого, и распределение матричных элементов также получилось сильно отличным от нормального – введена и вычислена мера этого отличия через отношение моментов (отношение четвертого момента к квадрату второго) распределений. Основной задаче – демонстрации возможности выявить факт термализации, численно получая небольшой набор собственных состояний из середины спектра Гамильтониана системы – данная работа отвечает в той мере, в которой термализация наблюдаема на наборе векторов такого размера.

Автор выражает глубокую признательность своему научному руководителю, поставившему такую интересную задачу и подсказавшему путь ее решения. Актуальность темы на сегодняшний момент не подлежит сомнению. В процессе работы возник ряд непростых вопросов, заслуживающих дальнейшего изучения и прояснения.

## Список литературы

- [1] Deutsch J. M. Quantum statistical mechanics in a closed system //Physical Review A. – 1991. – Т. 43. – №. 4. – С. 2046.
- [2] Srednicki M. Chaos and quantum thermalization //Physical Review E. – 1994. – Т. 50. – №. 2. – С. 888.
- [3] Rigol M., Dunjko V., Olshanii M. Thermalization and its mechanism for generic isolated quantum systems //Nature. – 2008. – Т. 452. – №. 7189. – С. 854-858.
- [4] Dymarsky A., Liu H. Canonical Typicality of Energy Eigenstates of an Isolated Quantum System //arXiv preprint arXiv:1511.06680. – 2015.
- [5] Dymarsky A., Liu H. Canonical Universality //arXiv preprint arXiv:1702.07722. – 2017.
- [6] Dymarsky A., Lashkari N., Liu H. Subsystem ETH //arXiv preprint arXiv:1611.08764. – 2016.
- [7] Huse D., Quantum Thermalization //Lectures on Princeton Summer School for Condensed Matter Physics, – Princeton, 2016
- [8] Srednicki M., The Eigenstate Thermalization Hypothesis// Lecture on ‘Black Holes: Complementarity, Fuzz, or Fire?’ Workshop, – Kavli Institute for Theoretical Physics, 2013.
- [9] Kliesch M. et al. Locality of temperature //Physical review x. – 2014. – Т. 4. – №. 3. – С. 031019.
- [10] Santos L. F., Borgonovi F., Izrailev F. M. Onset of chaos and relaxation in isolated systems of interacting spins: Energy shell approach //Physical Review E. – 2012. – Т. 85. – №. 3. – С. 036209.
- [11] Jordan P., Wigner E. P. Über das Paulische Äquivalenzverbot //The Collected Works of Eugene Paul Wigner. – Springer Berlin Heidelberg, 1993. – С. 109-129.
- [12] Onsager L. Crystal statistics. I. A two-dimensional model with an order-disorder transition //Physical Review. – 1944. – Т. 65. – №. 3-4. – С. 117.
- [13] Stathopoulos A., McCombs J. R. PRIMME: preconditioned iterative multimethod eigensolver—methods and software description //ACM Transactions on Mathematical Software (TOMS). – 2010. – Т. 37. – №. 2. – С. 21.
- [14] Wu L., Romero E., Stathopoulos A. PRIMME\_SVDS: A High-Performance Preconditioned SVD Solver for Accurate Large-Scale Computations //arXiv preprint arXiv:1607.01404. – 2016.
- [15] Stathopoulos A. Nearly optimal preconditioned methods for Hermitian eigenproblems under limited memory. Part I: Seeking one eigenvalue //SIAM Journal on Scientific Computing. – 2007. – Т. 29. – №. 2. – С. 481-514.
- [16] Stathopoulos A., McCombs J. R. Nearly optimal preconditioned methods for Hermitian eigenproblems under limited memory. Part II: Seeking many eigenvalues //SIAM Journal on Scientific Computing. – 2007. – Т. 29. – №. 5. – С. 2162-2188.

- [17] Stathopoulos A. Locking issues for finding a large number of eigenvectors of Hermitian matrices. – Tech Report WM-CS-2005-09, Computer Science, The College of William & Mary, 2005.
- [18] Hochstenbach M. E., Notay Y. The Jacobi–Davidson method //GAMM-Mitteilungen. – 2006. – T. 29. – №. 2. – C. 368-382.
- [19] Luitz D. J., Lev Y. B. Anomalous thermalization in ergodic systems //Physical review letters. – 2016. – T. 117. – №. 17. – C. 170404.
- [20] Blaß B., Rieger H. Absence of thermalization in the two-dimensional transverse-field Ising model after quantum quenches in the ferromagnetic phase //arXiv preprint arXiv:1605.06258. – 2016.
- [21] Mondaini R. et al. Eigenstate thermalization in the two-dimensional transverse field Ising model //Physical Review E. – 2016. – T. 93. – №. 3. – C. 032104.