

# Cadeias quânticas quase-periódicas e aperiódicas: localização e criticalidade

André P. Vieira

*Instituto de Física, USP*

16 de outubro de 2019

- Introdução
  - Localização
  - Desordem determinística
- Relação entre potencial desordenado e hopping desordenado
- Criticalidade em cadeias quânticas
- Relação entre flutuações geométricas e propriedades de transporte

- Modelo *tight-binding*:

$$H = -t \sum_{r=1}^L \left( c_r^\dagger c_{r+1} + c_{r+1}^\dagger c_r \right) + V \sum_{r=1}^L n_r, \quad n_r \equiv c_r^\dagger c_r$$

- Sistema não interagente: estados de uma única partícula
- Diagonalizado por uma transformada de Fourier,

$$H = \sum_k E_k \eta_k^\dagger \eta_k + \text{constante}, \quad E_k = -2t \cos(ka),$$

com autoestados estendidos,

$$|k\rangle = \frac{1}{\sqrt{L}} \sum_{r=1}^L e^{ikra} |r\rangle.$$

# Localização de Anderson

Anderson, *Phys. Rev.* 109, 1492 (1958)

Em sistemas 1D **isolados**, estados **de uma única partícula** (não interagentes) sob um potencial aleatório  $\{V_j\}$  são localizados. Na ausência de banho térmico, não há difusão. Ergodicidade e ETH não funcionam.

$$H = -t \sum_{r=1}^L \left( c_r^\dagger c_{r+1} + c_{r+1}^\dagger c_r \right) + \sum_{r=1}^L V_r n_r, \quad n_r \equiv c_r^\dagger c_r$$

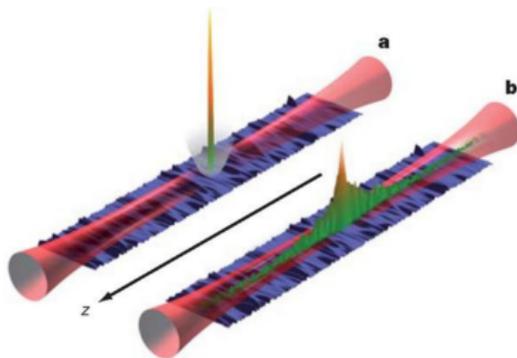


Figura retirada de Billy et al., *Nature* **453**, 891 (2008).

# Como quantificar a localização

- A função de onda de um estado espacialmente localizado é concentrada sobre poucos sítios. Em geral vale

$$\psi_r \sim \exp(-|r - r_0|/\xi),$$

mas há casos de localização anômala (ver adiante).

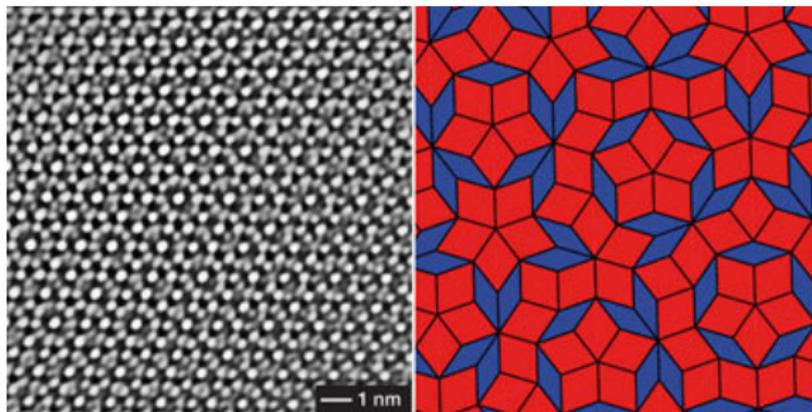
- Uma forma de quantificar isso através de um único número é a razão inversa de participação de um estado  $k$ ,

$$p_k \equiv \sum_r |\psi_r|^4,$$

em que supomos a normalização das funções de onda. A IPR é de ordem 1 para um estado localizado e de ordem  $1/L$  para um estado estendido em uma cadeia de comprimento  $L$ .

# Quebrando a simetria de translação

- Aleatoriedade: parâmetros escolhidos (independentemente) a partir de uma distribuição de probabilidades  $P(V_r)$ .
- Aperiodicidade determinística (quase-cristais)



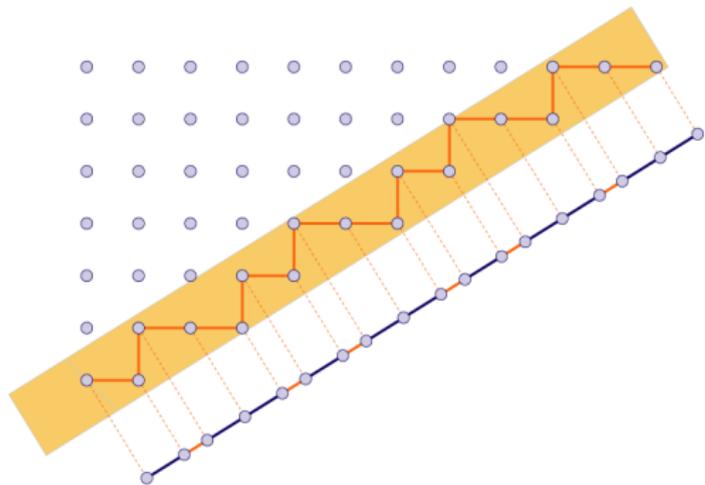
- Incomensurabilidade: introduzida no modelo de Aubry-André,

$$V_r = 2\lambda \cos(2\pi r b),$$

com  $b$  irracional, em geral escolhido como a razão áurea  $\varphi = (1 + \sqrt{5})/2$ .

- O sistema é autodual para  $|t| = \lambda$ . Se  $|t| < \lambda$  ( $|t| > \lambda$ ) todos os estados são localizados (estendidos).
- O espectro de energia tem natureza fractal.
- Os comportamentos do modelo de Anderson e do modelo de Aubry-André sugerem que a localização, caso exista, está associada a desordem (modulação) suficientemente forte.

# Análogos 1D de quase-cristais



Inclinação  $\theta$ :

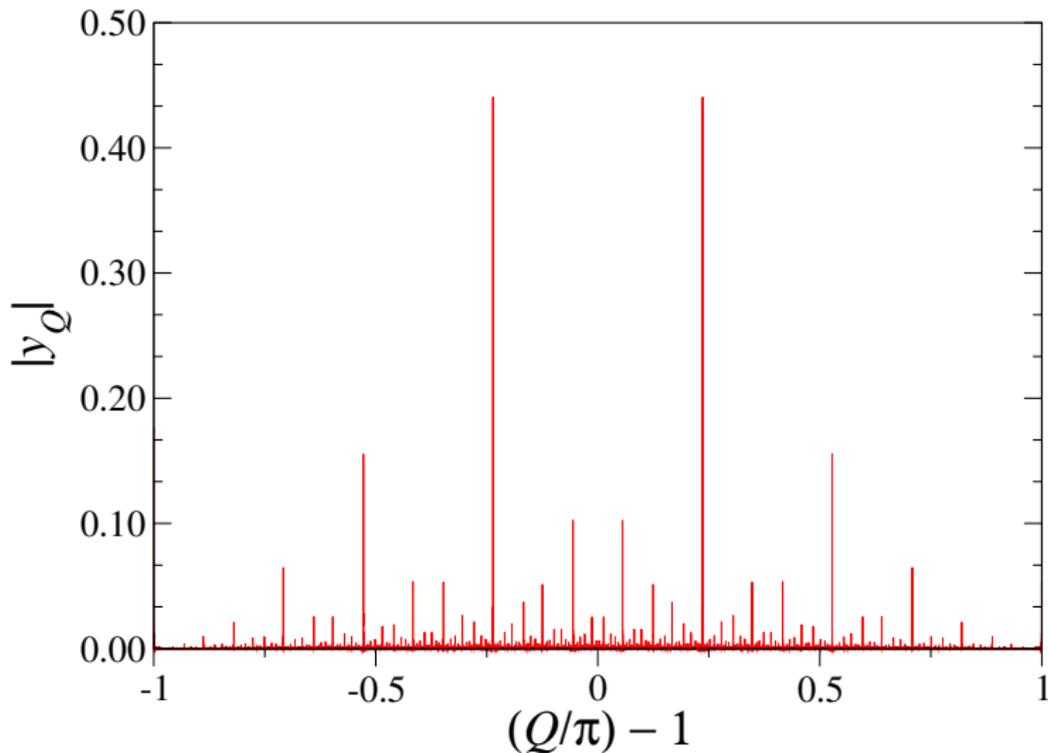
$$\tan \theta = \varphi = \frac{1 + \sqrt{5}}{2}.$$

- A sequência de distâncias projetadas é a mesma definida pela regra de substituição (ou inflação)

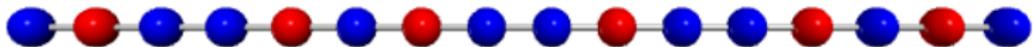
$$\text{Fibonacci} : \begin{cases} a \rightarrow ab \\ b \rightarrow a \end{cases} \quad \text{abaababaabaab...}$$

- Permite construir uma sequência **aperiódica** de parâmetros  $V_a$  e  $V_b$ .

Espectro de Fourier da sequência de Fibonacci ( $a \equiv 0, b \equiv 1$ )



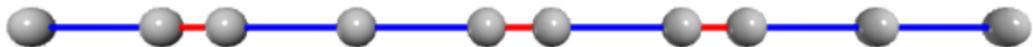
# Limite de modulação (desordem) forte



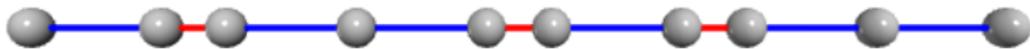
- Vamos supor  $V_a = 0$  e  $V_b \gg |t|$ . Nesse caso é possível calcular o espectro aproximado de energias perturbativamente.
- Primeiro ignoramos os hoppings:



- Há duas energias possíveis,  $E = 0$  e  $E = V_b$ . Um cálculo perturbativo até terceira ordem mostra que reintroduzir os hoppings produz correções a esses níveis associadas a hamiltonianos efetivos representados pictoricamente abaixo:



# Limite de modulação (desordem) forte



- Especificamente, desprezando pequenos termos de potencial,

$$\tilde{H} = \sum_{r=1}^L t_r \left( c_r^\dagger c_{r+1} + c_{r+1}^\dagger c_r \right) + \text{constante.}$$

- Para os níveis  $E = 0$ , vale

$$t_a = \frac{t^2}{V_b} \quad \text{e} \quad t_b = t.$$

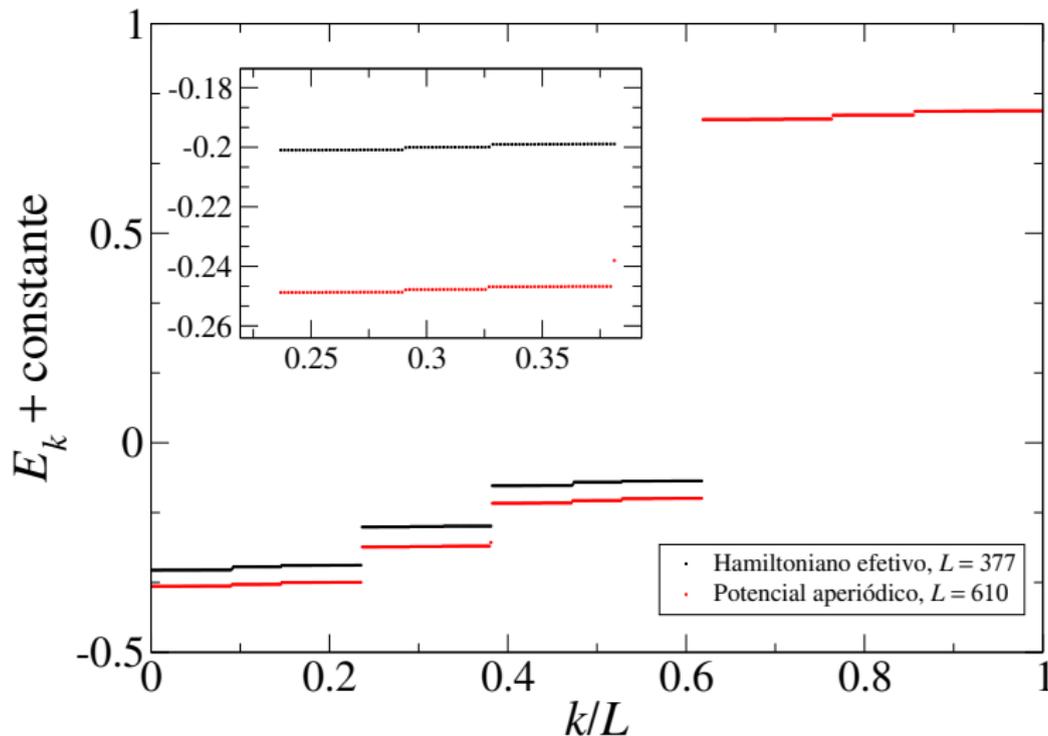
- Para os níveis  $E = V_b$ , vale

$$t_a = \frac{t^3}{V_b^2} \quad \text{e} \quad t_b = \frac{t^2}{V_b}.$$

- Em ambos os casos, os hoppings distribuem-se de acordo com a sequência de Fibonacci.

# Limite de modulação (desordem) forte

Comparação entre o espectro exato e o espectro do hamiltoniano efetivo para os estados de mais baixa energia no caso  $t/V_b = 1/10$ .



$$H = \sum_{r=1}^L t_r \left( c_r^\dagger c_{r+1} + c_{r+1}^\dagger c_r \right),$$

- O sistema exibe **simetria partícula-buraco**. Um autoestado  $|\Psi\rangle = \sum_r \psi_r |r\rangle$  satisfaz

$$t_{r-1} \psi_{r-1} + t_r \psi_{r+1} = E \psi_r,$$

de modo que  $|\Psi'\rangle = \sum_r (-1)^r \psi_r |r\rangle$  é também autoestado, com  $E' = -E$ .

- Eggarter e Riedinger (1978): todos os estados são localizados se os hoppings são aleatórios, mas o estado no centro da banda (com energia nula) exibe **localização anômala**,

$$\psi_r \sim \exp\left(-\sqrt{\frac{|r-r_0|}{\ell_0}}\right).$$

$$H = \sum_{r=1}^L t_r (c_r^\dagger c_{r+1} + c_{r+1}^\dagger c_r),$$

- A transformação de Jordan-Wigner,

$$S_r^- = \exp\left(-i\pi \sum_{n=1}^{r-1} c_n^\dagger c_n\right) c_r, \quad S_r^+ = c_r^\dagger \exp\left(i\pi \sum_{n=1}^{r-1} c_n^\dagger c_n\right),$$

produz o hamiltoniano da cadeia XX de spin  $\frac{1}{2}$ ,

$$H = \sum_{r=1}^L J_r (S_r^x S_{r+1}^x + S_r^y S_{r+1}^y), \quad J_r = 2t_r.$$

- O estado fundamental da cadeia XX corresponde à ocupação de todos os níveis de férmions com energia negativa, ou seja, abaixo do centro da banda.
  - Logo, as propriedades de localização da cadeia tight-binding estão relacionadas ao estado fundamental da cadeia XX.

$$H = J \sum_{j=1}^L \left( S_j^x S_{j+1}^x + S_j^y S_{j+1}^y \right), \quad J > 0$$

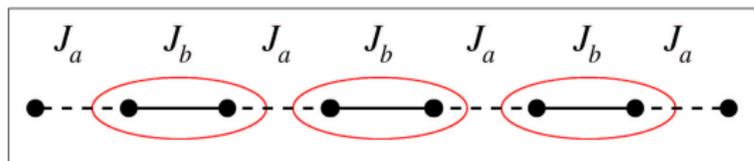


- O estado de Néel ( $\cdots \uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow \cdots$ ) **não** é um autoestado;  
 $\vec{S}_{2j} \rightarrow -\vec{S}_{2j} \Rightarrow [S_{2j}^x, S_{2j}^y] = -iS_{2j}^z \neq iS_{2j}^z$
- O estado fundamental é um singleto crítico ( $L$  par)  
 Spin total:  $\vec{S} = \vec{S}_1 + \vec{S}_2 + \cdots + \vec{S}_N$ ;  $\vec{S}^2 |\Psi_0\rangle = 0$

$$\langle S_j^\alpha S_{j+r}^\alpha \rangle_0 \sim \frac{(-1)^r}{r\eta_\alpha}; \quad E_1 - E_0 = 0$$

# Acoplamentos alternados: dimerização forçada

$$J_j = J \left[ 1 + \delta (-1)^j \right] > 0, \quad 0 \leq \Delta \leq 1$$



$$|\circ\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)$$

- Estado fundamental não crítico
  - Gap de energia para os primeiros estados excitados (estendidos):

$$\Delta E \sim |\delta|^{\nu}, \quad \nu = 1,$$

- Correlações no estado fundamental:  $\langle \vec{S}_j \cdot \vec{S}_{j+r} \rangle_0 \sim \exp(-r/\xi)$ .

# Dimerização média torna a cadeia XX não crítica

$$H = \sum_{r=1}^L J_r (S_r^x S_{r+1}^x + S_r^y S_{r+1}^y)$$

- Introduzindo a transformação

$$\sigma_{2n+\frac{1}{2}}^x = \prod_{j=1}^{2n} (2S_j^x), \quad \sigma_{2n+\frac{1}{2}}^y = 4S_{2n}^y S_{2n+1}^y,$$

$$\tau_{2n+\frac{3}{2}}^x = \prod_{j=1}^{2n+1} (2S_j^x), \quad \tau_{2n+\frac{3}{2}}^y = 4S_{2n+1}^y S_{2n+2}^y,$$

a cadeia XX é mapeada em duas cadeias de Ising quânticas,

$$H = \frac{1}{4} \sum_n \left( J_{2n} \tau_{2n-\frac{1}{2}}^x \tau_{2n+\frac{3}{2}}^x + J_{2n+1} \tau_{2n+\frac{3}{2}}^y \right) \\ + \frac{1}{4} \sum_n \left( J_{2n-1} \sigma_{2n-\frac{3}{2}}^x \sigma_{2n+\frac{1}{2}}^x + J_{2n} \sigma_{2n+\frac{1}{2}}^y \right)$$

# Dimerização média torna a cadeia XX não crítica

$$H = \frac{1}{4} \sum_n \left( J_{2n} \tau_{2n-\frac{1}{2}}^x \tau_{2n+\frac{3}{2}}^x + J_{2n+1} \tau_{2n+\frac{3}{2}}^y \right) \\ + \frac{1}{4} \sum_n \left( J_{2n-1} \sigma_{2n-\frac{3}{2}}^x \sigma_{2n+\frac{1}{2}}^x + J_{2n} \sigma_{2n+\frac{1}{2}}^y \right)$$

- Para a cadeia de Ising quântica, Pfeuty (1979) mostrou que a condição para a criticalidade (a inexistência de um gap de energia para os primeiros estados excitados) é que as médias geométricas dos acoplamentos e dos campos transversos sejam idênticas. No nosso contexto, isso equivale a

$$\prod_n J_{2n} = \prod_n J_{2n+1} \quad \Rightarrow \quad \boxed{\sum_n \ln \frac{J_{2n+1}}{J_{2n}} = 0.}$$

- Vamos nos concentrar em distribuições de acoplamentos que satisfazem essa condição.

# Modulação fraca: o critério de Harris–Luck

Harris, *J. Phys. C* 7, 1671 (1974); Luck, *EPL* 24, 359 (1993)

- Para a cadeia de Ising quântica, comparam-se as flutuações quânticas com as flutuações geométricas induzidas por quebra de simetria de translação .
- No contexto da cadeia XX, flutuações de  $\varepsilon_n = \ln(J_{2n+1}/J_{2n})$ .
- Supondo que essas flutuações variem com o tamanho  $L$  do sistema segundo

$$G_L \sim L^\omega,$$

com um certo expoente de flutuação  $\omega$ , a modulação será perturbativamente relevante se

$$\omega > \max \left\{ 0, 1 - (dv)^{-1} \right\} = 0 \quad (d = 1, v = 1).$$

- Para aleatoriedade,  $\omega = \frac{1}{2}$ : desordem fraca é **relevante**.
- Para aperiodicidade determinística,  $\omega$  depende da regra de substituição, e pode ser variado independentemente da modulação  $r = 1 - J_a/J_b$ .

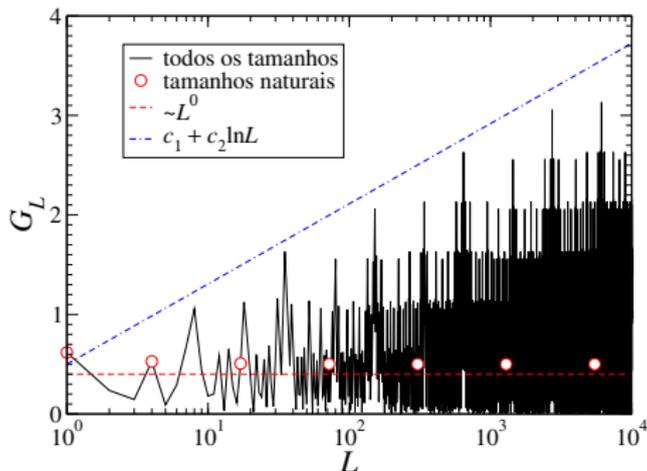
# Flutuações geométricas em seqüências aperiódicas

## Acoplamentos de Fibonacci

- Na cadeia XX, as flutuações são as de  $\varepsilon_n = \ln(J_{2n+1}/J_{2n})$ , relacionadas aos **pares de letras** consecutivas:

$$G_L \equiv \left| N_{ab}(L) - n_{ab}^{(\infty)} L \right|,$$

com  $N_{ab}(L)$  o número de pares  $ab$  em  $L$  letras e  $n_{ab}^{(\infty)}$  a fração de pares  $ab$  na seqüência infinita.



$$\omega \rightarrow 0^+$$

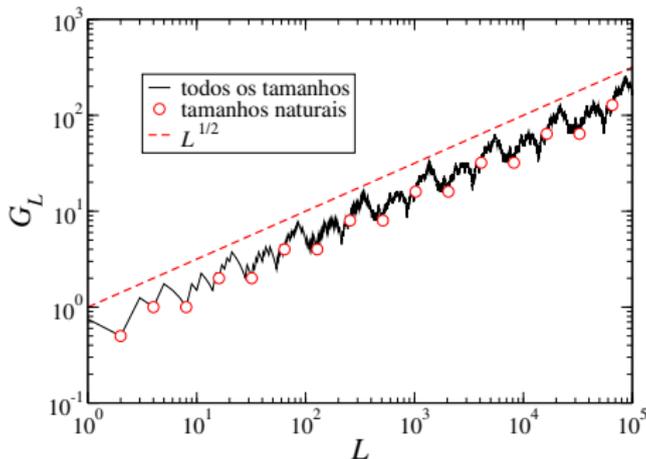
Aperiodicidade marginal

# Flutuações geométricas em seqüências aperiódicas

Acoplamentos de Rudin–Shapiro

- Sequência de Rudin–Shapiro

$$\left\{ \begin{array}{l} aa \rightarrow aaab \\ ab \rightarrow aaba \\ ba \rightarrow bbab \\ bb \rightarrow bbba \end{array} \right. \Rightarrow \text{aaabaabaaaabbbabaabaababbbbaaabaaaaba}$$



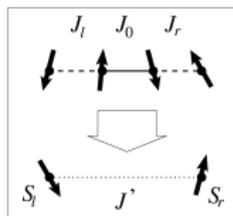
$$\omega = \frac{1}{2}$$

Aperiodicidade relevante

# Modulação forte: acoplamentos de Fibonacci

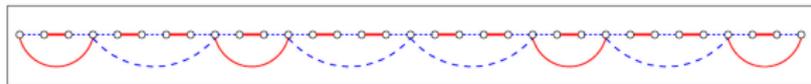
APV, PRL 94, 077201 (2005); PRB 71, 134408(2005)

- Estamos interessados no estado fundamental: queremos reduzir a escala de energia.
- Acoplamento efetivo produzido por teoria de perturbação:



$$J' = \frac{J_l J_r}{J_0}$$

- Acoplamentos  $J_a$  e  $J_b$  (de comprimento  $\ell$ ),  $\rho \equiv J_a/J_b \ll 1$ :



$$J'_a = \frac{J_a^3}{J_b^2}, \quad J'_b = \frac{J_a^2}{J_b}, \quad \Delta E' \sim J_b$$

- Iterar  $n$  vezes revela excitações sem gap quando  $L \rightarrow \infty$ :

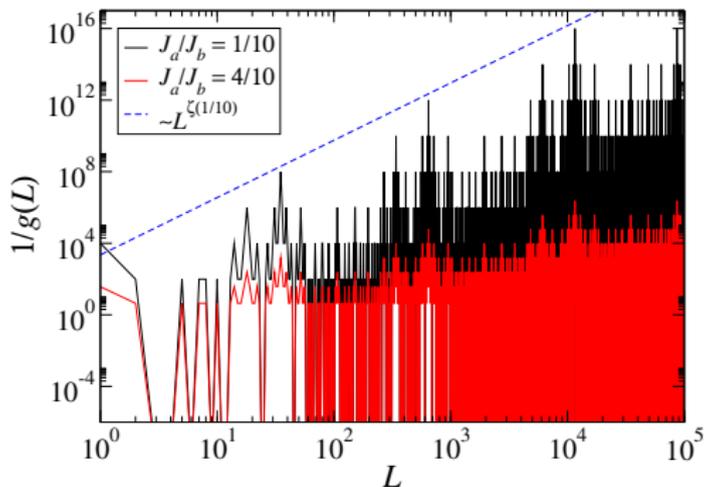
$$\Delta E_n \sim \ell_n^{-\zeta(\rho)}, \quad \zeta(\rho) \simeq -\frac{2}{3} \ln \rho / \ln \phi.$$

# Condutividade do estado $E = 0$ da cadeia tight-binding

## Seqüência de Fibonacci

- Mapeando de volta para a cadeia tight-binding, mostra-se que a condutividade  $g(L)$  do estado no centro da banda é determinada pelo hopping efetivo entre os extremos da cadeia:

$$g(L) = \frac{\tilde{t}_L^2}{(1 - \tilde{t}_L^2)^2}, \quad \tilde{t}_L = \frac{t_1 t_3 t_5 \cdots t_{L-2} t_L}{t_2 t_4 t_6 \cdots t_{L-1}} \quad (L \text{ ímpar}).$$

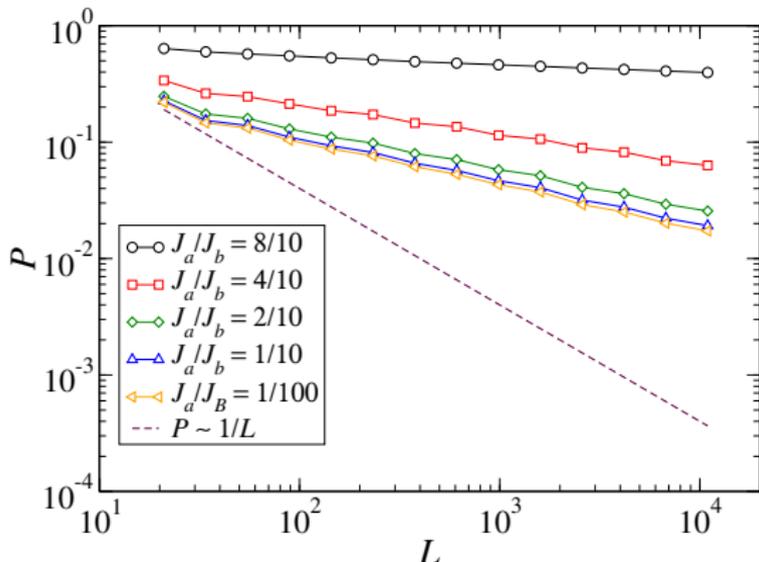


# Número de participação na cadeia tight-binding

## Sequência de Fibonacci

- Com base na razão inversa de participação dos  $L$  estados, podemos calcular o número de participação médio:

$$\bar{P} \equiv \frac{1}{L^2} \sum_{k=1}^L p_k^{-1}, \quad p_k = \sum_r \left| \psi_r^{(k)} \right|^4.$$



# Modulação forte: flutuações geométricas relevantes

APV, PRL 94, 077201 (2005); PRB 71, 134408(2005)

- Para acoplamentos (hoppings) escolhidos a partir de regras de substituição com  $\omega > 0$  (perturbativamente relevantes), como na sequência de Rudin–Shapiro (para a qual  $\omega = \frac{1}{2}$ ), mostra-se que, na cadeia XX,

$$\Delta E_n \sim \exp(-c\ell_n^\omega).$$

- Relembrando, o caso de Fibonacci ( $\omega = 0$ ) é descrito por

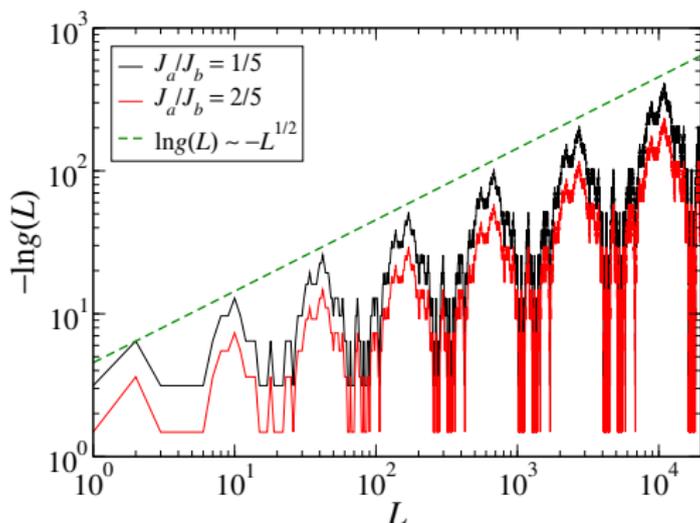
$$\Delta E_n \sim \ell_n^{-\zeta(\rho)}, \quad \zeta(\rho) \simeq -\frac{2}{3} \ln \rho / \ln \phi.$$

# Condutividade do estado $E = 0$ da cadeia tight-binding

Sequência de Rudin–Shapiro

- Mapeando de volta para a cadeia tight-binding, mostra-se que a condutividade  $g(L)$  do estado no centro da banda é determinada pelo hopping efetivo entre os extremos da cadeia:

$$g(L) = \frac{\tilde{t}_L^2}{(1 - \tilde{t}_L^2)^2}, \quad \tilde{t}_L = \frac{t_1 t_3 t_5 \cdots t_{L-2} t_L}{t_2 t_4 t_6 \cdots t_{L-1}} \quad (L \text{ ímpar}).$$

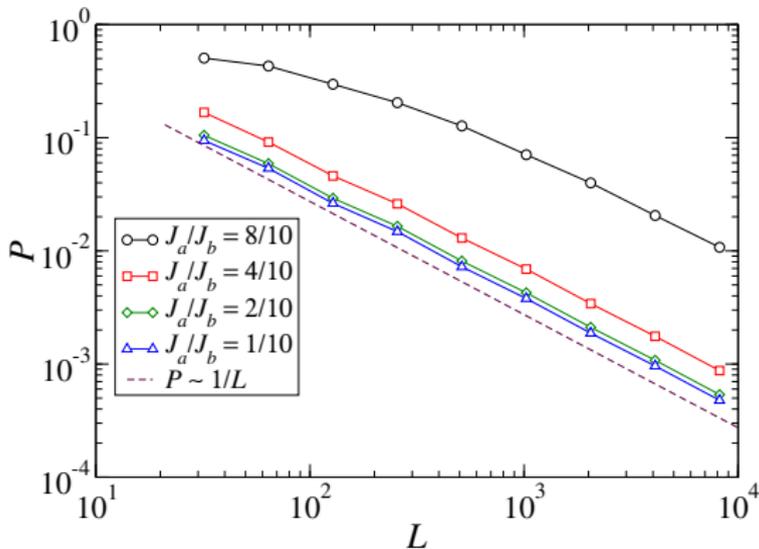


# Número de participação na cadeia tight-binding

Sequência de Rudin–Shapiro

- Com base na razão inversa de participação dos  $L$  estados, podemos calcular o número de participação médio:

$$\bar{P} \equiv \frac{1}{L^2} \sum_{k=1}^L p_k^{-1}, \quad p_k = \sum_r \left| \psi_r^{(k)} \right|^4.$$



- Cadeias tight-binding com potencial aperiódico podem ser aproximadamente mapeadas em cadeias com hoppings aperiódicos.
- Análise do caso de hoppings aperiódicos é facilitada pela equivalência com a cadeia XX.
- Desde que não haja dimerização média, as propriedades de localização no caso de hoppings aperiódicos relacionam-se ao expoente de flutuação geométrica  $\omega$  dos pares de letras na sequência aperiódica:
  - se  $\omega < 0$ , os estados são majoritariamente estendidos;
  - se  $\omega = 0$ , os estados são majoritariamente críticos;
  - se  $\omega > 0$ , os estados são localizados (mesmo que anormalmente).

# Interacting fermions in 1D and the quantum XXZ chain

$$H = \sum_{j=1}^L t_j \left( c_j^\dagger c_{j+1} + c_{j+1}^\dagger c_j \right) - \sum_{j=1}^L V_j n_j + \sum_{j=1}^L U_j \left( n_j - \frac{1}{2} \right) \left( n_{j+1} - \frac{1}{2} \right)$$

Mapping fermions to spins via the Jordan–Wigner transformation:

$$H = \sum_{j=1}^L J_j \left( S_j^x S_{j+1}^x + S_j^y S_{j+1}^y + \Delta S_j^z S_{j+1}^z \right) - \sum_{j=1}^L V_j S_j^z \quad (J \propto t, \Delta \propto U)$$

# Deterministic aperiodicity

Perturbatively irrelevant bond sequences: APV and Hoyos, PRB **98** 104203 (2018)

- Large family of substitution rules with  $\omega = 0$  and no average dimerization ( $\overline{J_{2j-1}} = \overline{J_{2j}}$ ).
- Representative example:

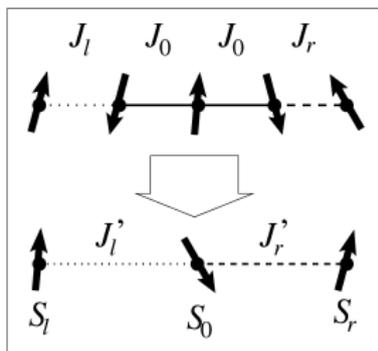
$$\left\{ \begin{array}{l} aa \rightarrow aa\,ba\,ab\,ab\,ba \\ ab \rightarrow \quad aa\,ba\,ab \\ ba \rightarrow ab\,ba\,aa\,ab\,ba \end{array} \right. .$$

- Harris–Luck criterion predicts weak modulation to be irrelevant; confirmed by bosonization approach.
- What about ***strong modulation?***

# Deterministic aperiodicity

Perturbatively irrelevant bond sequences: APV and Hoyos, PRB **98** 104203 (2018)

- For strong modulation, SDRG can be used.



$$J'_{l,r} = \gamma_3(\Delta_0) J_{l,r}$$

$$\Delta'_{l,r} = \delta_3(\Delta_0) \Delta_{l,r}$$

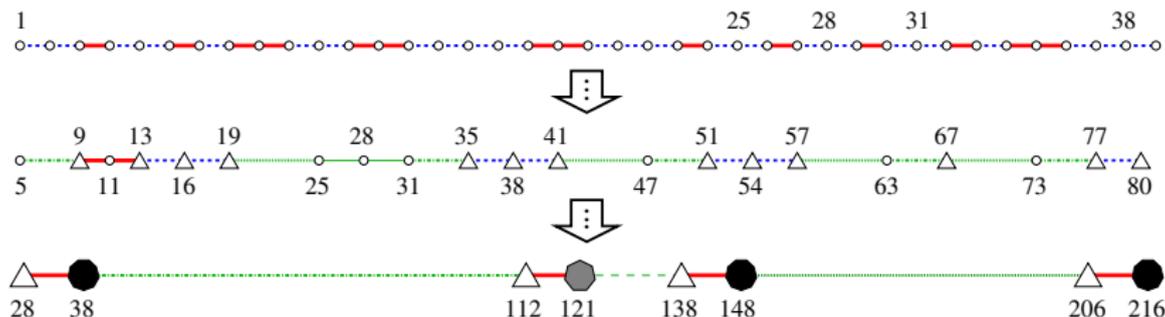
Which are now the 'strongest' bonds?



# Emergent dimerization

Perturbatively irrelevant bond sequences: APV and Hoyos, PRB **98** 104203 (2018)

- In the interacting Heisenberg limit, SDRG yields

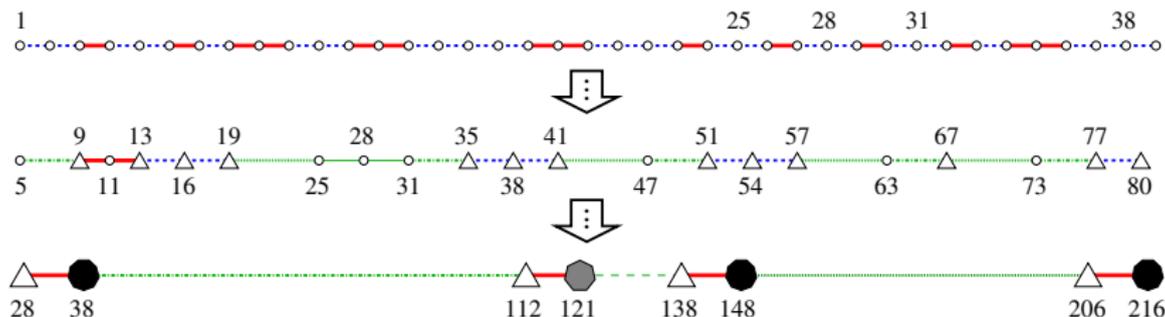


- Alternating weak and strong effective couplings: emergent dimerization.
- Strong couplings are all equal to each other; weak couplings form an aperiodic sequence with wandering exponent  $\omega = \frac{1}{2}$ .

# Emergent dimerization

Perturbatively irrelevant bond sequences: APV and Hoyos, PRB **98** 104203 (2018)

- In the interacting Heisenberg limit, SDRG yields



- Low-energy effective Hamiltonian:

$$\tilde{H} = \tilde{J}_{\text{strong}} \sum_{j=1}^{\ell/2} \vec{S}_{2j-1} \cdot \vec{S}_{2j} + \sum_{j=1}^{\ell/2-1} \tilde{J}_j \vec{S}_{2j} \cdot \vec{S}_{2j+1}.$$

# Emergent dimerization

Perturbatively irrelevant bond sequences: APV and Hoyos, PRB **98** 104203 (2018)

- Low-energy effective Hamiltonian in the Heisenberg limit:

$$\tilde{H} = \tilde{J}_{\text{strong}} \sum_{j=1}^{\ell/2} \vec{S}_{2j-1} \cdot \vec{S}_{2j} + \sum_{j=1}^{\ell/2-1} \tilde{J}_j \vec{S}_{2j} \cdot \vec{S}_{2j+1}.$$

- If  $\tilde{J}_j = 0$ , the ground state and the lowest-lying excitations are

$$|\Psi_0\rangle = |s\rangle_{1,2} \otimes |s\rangle_{3,4} \otimes |s\rangle_{5,6} \otimes \cdots \otimes |s\rangle_{\ell-1,\ell},$$

$$|j; S^z\rangle = \left( \bigotimes_{i \neq j} |s\rangle_{2i-1,2i} \right) \otimes |t; S^z\rangle_{2j-1,2j},$$

in which  $|s\rangle_{2j-1,2j}$  is a singlet state between effective spins at  $2j-1$  and  $2j$ , while  $|t; S^z\rangle_{2j-1,2j}$  is one of the triplet states.

# Emergent dimerization and localization

Perturbatively irrelevant bond sequences: APV and Hoyos, PRB **98** 104203 (2018)

- For  $\tilde{J}_j \neq 0$ , perturbation theory yields an effective Hamiltonian for the lowest-energy many-body band, describing the hopping of the “triplons” over the dimers:

$$\tilde{H}_{1\text{-triplon}} = -\frac{1}{4} \sum_{j=1}^{\ell/2-1} \tilde{J}_j (|j; S^z\rangle \langle j+1; S^z| + |j+1; S^z\rangle \langle j; S^z|).$$

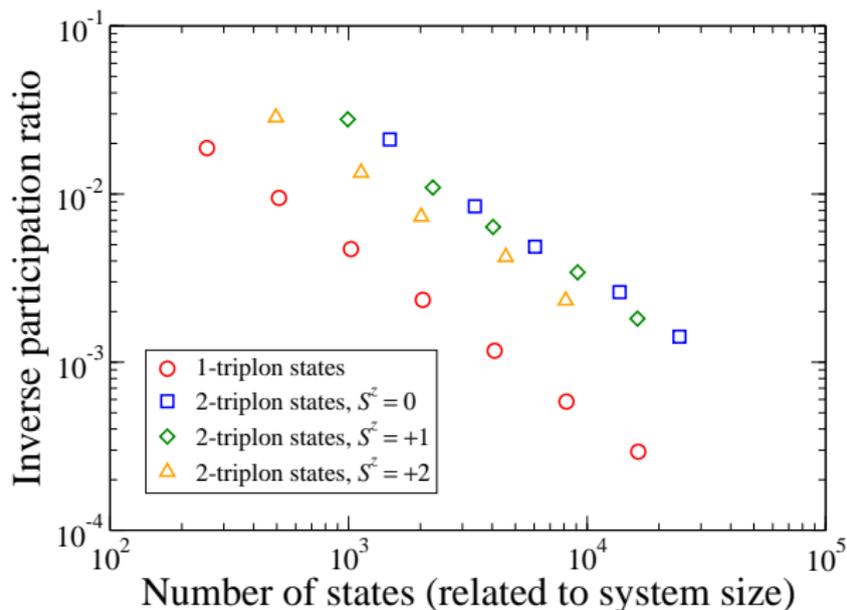
- Are single triplons localized? Participation ratio shows that they are. This remains true for 2-triplon excitations, whose effective Hamiltonian is more complicated.

$$\text{Participation ratio for state } k = \sum_j |\psi_{k,j}|^4$$

# Emergent dimerization and localization

Perturbatively irrelevant bond sequences: APV and Hoyos, PRB **98** 104203 (2018)

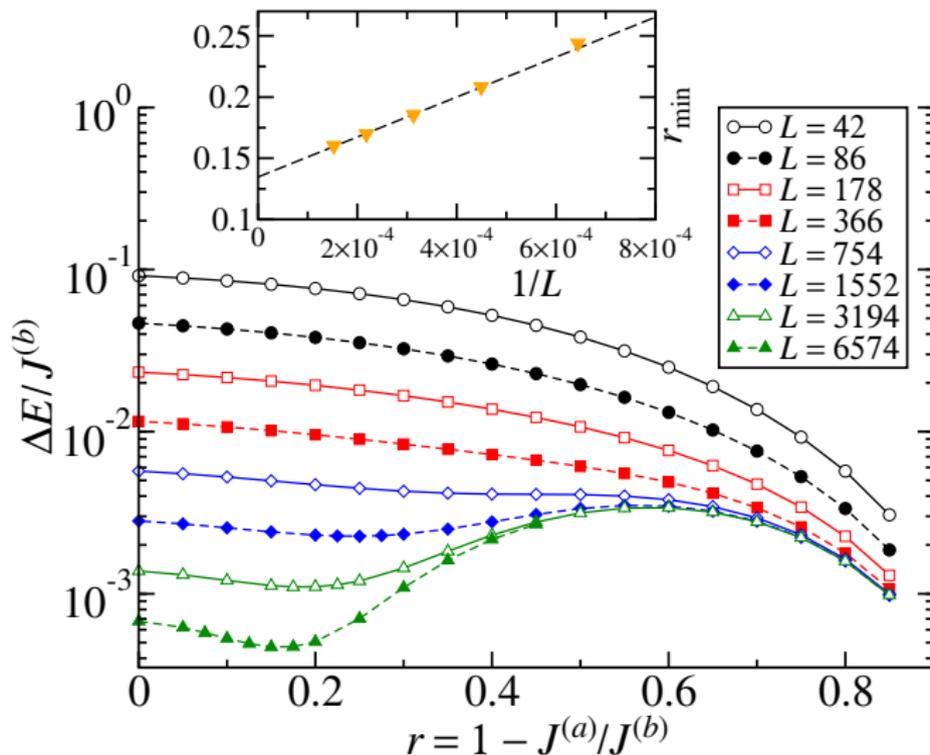
Inverse participation ratio of 1- and 2-triplon states vanishes for infinite system size  $\rightarrow$  localization



# Numerical checks

Perturbatively irrelevant bond sequences: APV and Hoyos, PRB **98** 104203 (2018)

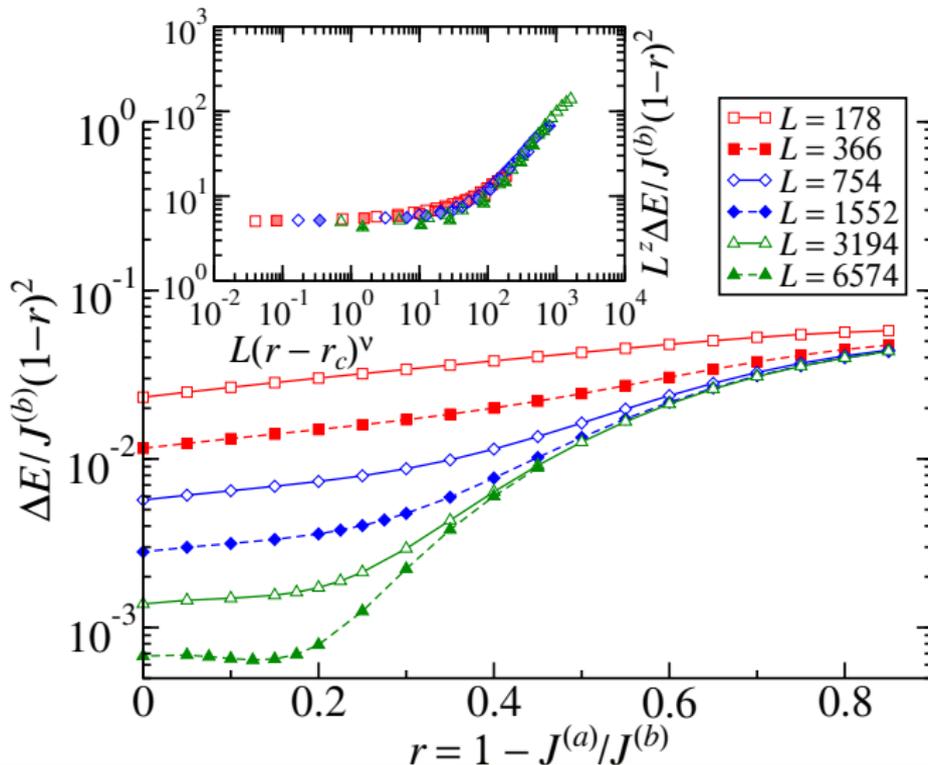
## DMRG results for the energy gap



# Numerical checks

Perturbatively irrelevant bond sequences: APV and Hoyos, PRB **98** 104203 (2018)

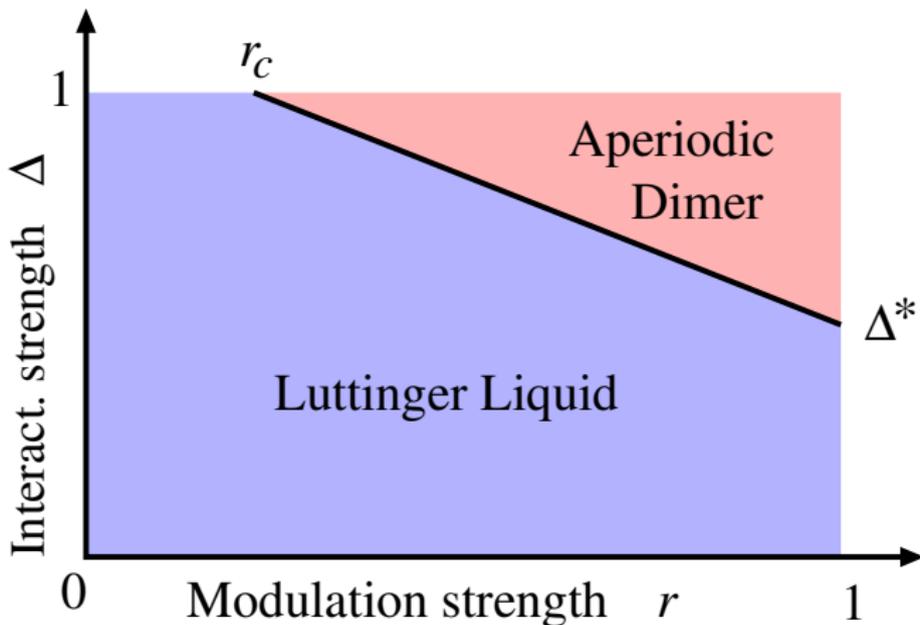
DMRG, gap rescaled by SDRG prediction ( $r_c \simeq 0.13$ ,  $z \simeq 1$ ,  $\nu \simeq 2$ )



# Cartoon of the phase diagram

Perturbatively irrelevant bond sequences: APV and Hoyos, PRB **98** 104203 (2018)

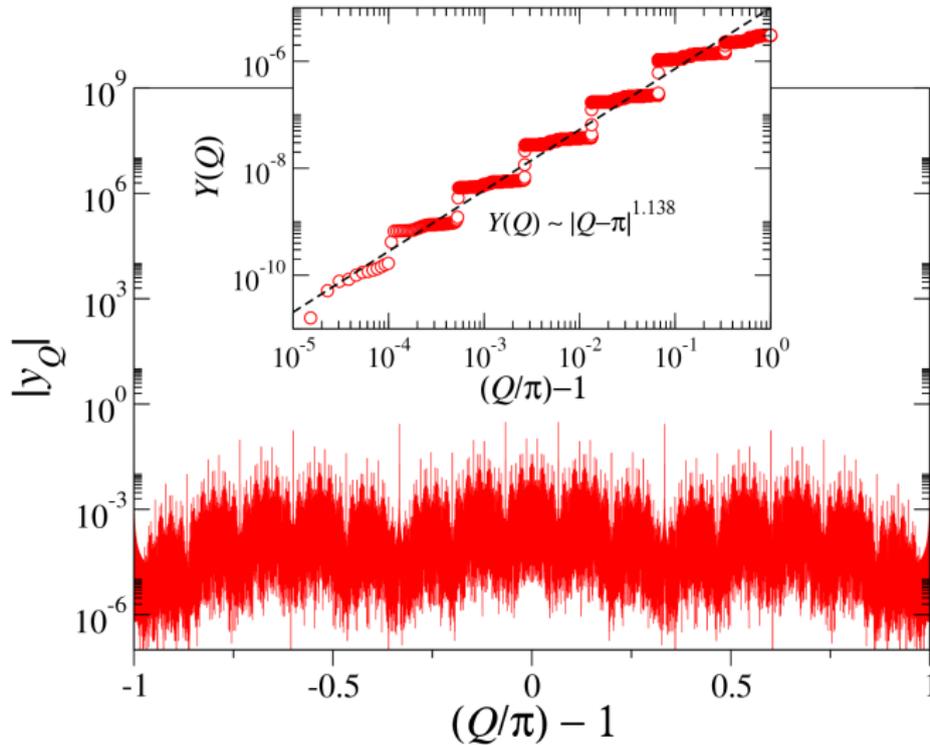
Luttinger liquid: extended; aperiodic dimer: localized at least at low energies



- Emergent dimerization: Novel mechanism for inducing a localized gapped phase in interacting quantum many-body systems.
- Single-particle eigenstates are extended even for very strong disorder; many-body low-energy states are localized for sufficiently strong disorder and sufficiently strong interactions.
- Transition can be studied, and critical exponents obtained. The transition is driven by both strong interactions and disorder modulation.
- In the fermion context, this is a metal-insulator transition very distinct from both the Mott and the Anderson transitions, exhibiting a spectral gap but no charge order.
- Perspectives: Thorough numerical check for  $0 < \Delta < 1$ ; numerical investigations of the dynamics close to the transition; high-temperature behavior and connection to many-body localization.

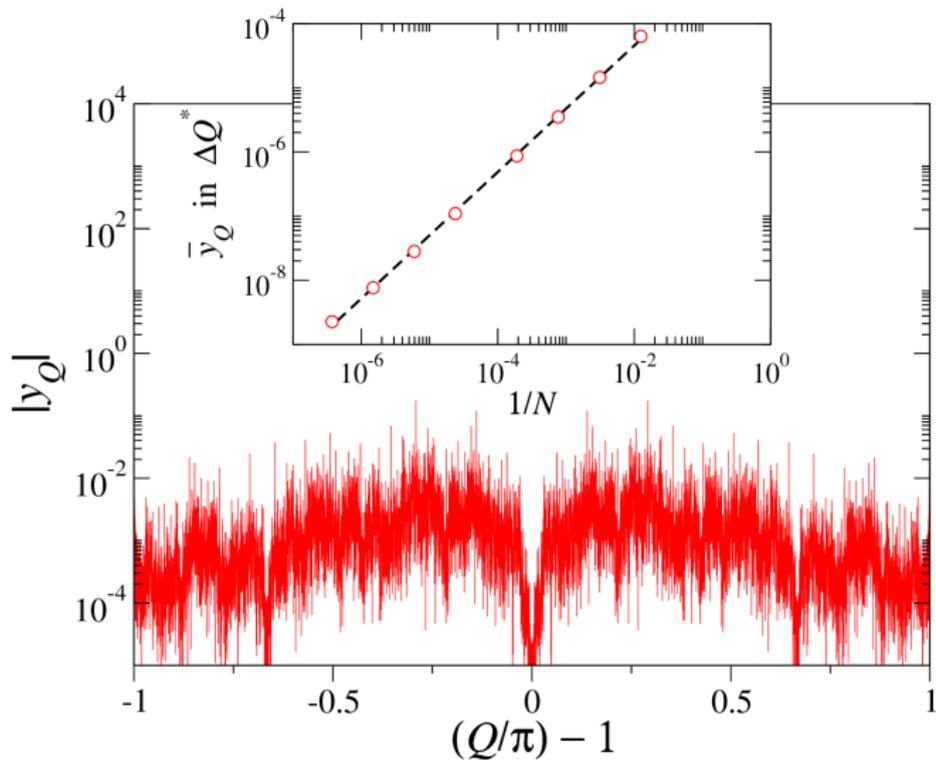
# FFT results

Perturbatively relevant bonds



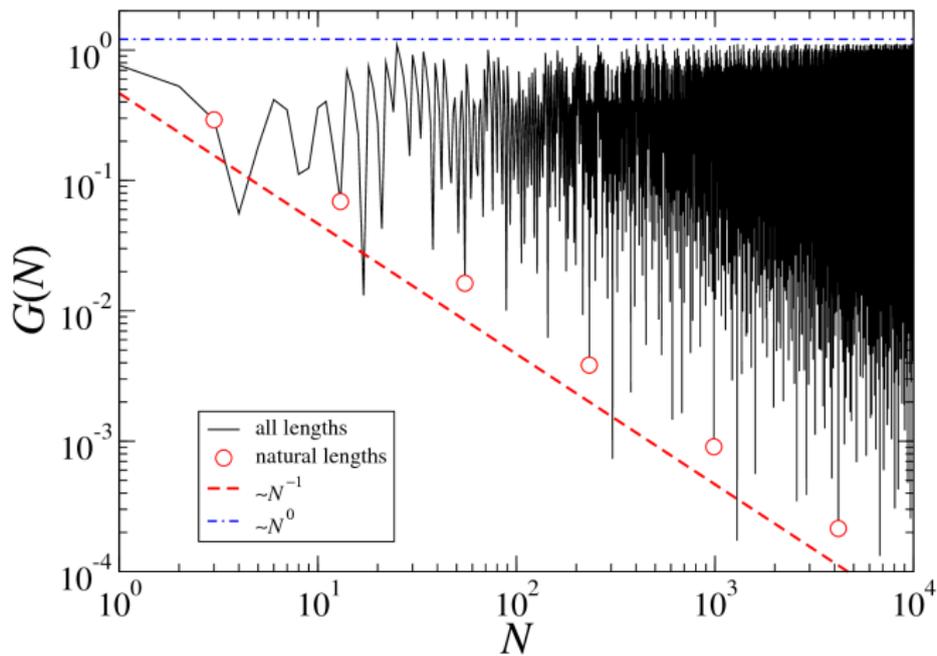
# FFT results

Perturbatively irrelevant bonds



# Geometrical fluctuations

Perturbatively irrelevant bonds



# Geometrical fluctuations

Fibonacci bonds



# Numerical checks

Perturbatively irrelevant bond sequences: APV and Hoyos, PRB **98** 104203 (2018)

QMC calculations with  $J_a/J_b = 1/10$

