

Rendezetlenség hatása a kvantumos bolyongás topologikus fázisaira

TDK DOLGOZAT

RAKOVSZKY TIBOR

Fizikus MSc I



Témavezető: **Dr. Asbóth János Károly**

WIGNER FIZIKAI KUTATÓKÖZPONT

KVANTUMOPTIKAI ÉS KVANTUMINFORMATIKAI OSZTÁLY

Belső konzulens: **Dr. Pályi András**

EÖTVÖS LORÁND TUDOMÁNYEGYETEM

ANYAGFIZIKAI TANSZÉK

Tartalomjegyzék

1. Bevezető	2
1.1. A dolgozat felépítése	3
2. A split step kvantumos bolyongás	4
3. Topologikus invariánsok a homogén bolyongás esetén	8
3.1. A homogén split step bolyongás spektruma	8
3.2. Királis szimmetria	10
3.3. Élállapotok	12
3.4. Csavarodási számok és topologikus invariánsok	16
4. Általánosítás a rendezetlen esetre	20
4.1. Valós térbeli csavarodási számok	21
4.2. A topologikus invariánsok és a szórás mátrix kapcsolata	22
5. A valóstérbeli szórás mátrixok módszere	25
5.1. A módszer általános leírása	25
5.2. Alkalmazás a split step bolyongásra; additív paraméterek	30
5.3. A homogén split step bolyongás szórás mátrixa	33
6. Rendezetlen split step bolyongás topologikus invariánsai	35
6.1. Általános rendezetlen eset	36
6.2. Élállapotok megkonstruálása	36
6.3. Bináris rendezetlenség	38
6.4. Uniform rendezetlenség	40
6.5. Összehasonlítás a valóstérbeli csavarodási számokkal	42
7. Összefoglalás	44
8. Köszönetnyilvánítás	45
A. 1. függelék	45

1. Bevezető

A kvantumos bolyongásokat eredetileg a klasszikus véletlen bolyongások analógiájaként vezették be.[2] A klasszikus bolyongásban általában valamilyen diszkrét rácson, illetve gráfon mozgó részecskét tekintünk, és a vizsgált mennyiség ennek a részecskének a megtalálási valószínűsége. Ez egy valószínűségi eloszlás a vizsgált gráfon, amelynek időfejlődését az egyik csúcsról a másikra történő ugrásokhoz tartozó valószínűségi ráták adják meg. A bolyongás kvantumos változatában a bolyongó részecske állapotát nem egy klasszikus valószínűségi eloszlás írja le, hanem egy komplex állapotvektor. Ez egy Hilbert-térnek az eleme, amelynek dimenziója a vizsgált rács rácspontjainak a száma, amelyeken a bolyongás zajlik, megszorozva a bolyongó részecske belső szabadsági fokainak számával. A kvantumosan bolyongó részecske mozgását nem átmeneti valószínűségek, hanem valószínűségi amplitúdók szabják meg, amelyek szintén komplex értékeket vehetnek fel (mint látni fogjuk, az általunk vizsgált esetekben ezek helyett a hopping amplitúdók helyett az időfejlődést közvetlenül az unitér időfejllesztő operátorral tudjuk megadni). Annak valószínűségét, hogy a részecske egy adott pontban tartózkodik, szokás szerint az állapotvektornak a megfelelő ponthoz tartozó komponenseinek abszolútérték négyzetösszege adja. Abban az esetben, amikor a bolyongó helyzetét rendszeresen, kis időközönként mérjük, a kvantumos bolyongás klasszikus véletlen bolyongásba megy át.

Az eredeti motivációt a kvantumos bolyongások tanulmányozásához a kvantumi-formációelmélet adta. Több kvantumos kereső algoritmus felhasználja a kvantumos bolyongások fogalmát[27]. Az a tény, hogy a kvantumos esetben a lokalizáltan induló bolyongó az idővel lineárisan terjed szét (szemben a klasszikus esetből ismert $\sqrt{t}$ -vel arányos terjedéssel), felhasználható a klasszikus keresési algoritmusoknál gyorsabb, kvantumos algoritmusok készítésére, például a Grover-algoritmus esetében.[9]. Ezen túlmenően belátható, hogy kvantumos bolyongások segítségével létrehozható általános kvantumszámítógép is.[8][16]

Az elmúlt években jelentős érdeklődés jelent meg a kvantumos bolyongások iránt a szilárdtestfizika területén is. Ennek oka az, hogy a kvantumos bolyongások lehetővé teszik a szilárdtestfizikában nagy érdeklődést kiváltó topologikus fázisok tanulmányozását. A topologikus fázisokkal rendelkező anyagok, az ún. topologikus szigetelők jellemzője, hogy bár a tömbi részük szigetelő, a felületükön olyan állapotok jelenhetnek meg, amelyek energiája a gap belsejébe esik (ezeket élállapotoknak

hívjuk). Ezen állapotok számát a tömbi rész Hamilton-operátora jellemző topológikus invariánsok határozzák meg, vagyis olyan mennyiségek, amelyek a rendszer paramétereinek folytonos deformációjára érzéketlenek. A topológikus szigetelőkre jellemző élállapotokat ma már több rendszer esetén kísérletileg is megfigyelték, például Bi_2Te_3 és Bi_2Se_3 kristályok esetén[31]. Egy rövid összefoglaló a topológikus szigetelőkről olvasható a [22] cikkben.

A topológikus szigetelőket több osztályba sorolhatjuk, dimenziójuk és szimmetriáik alapján, így felírható a topológikus szigetelők "periódusos rendszere".[26]. Belátható, hogy egy- és két dimenzióban a topológikus szigetelők összes lehetséges osztálya szimulálható kvantumos bolyongások segítségével, továbbá a kvantumos bolyongásokban olyan új topológikus fázisok is megjelennek, amelyeknek nincs megfelelője a statikus rendszerek között.[15] A bolyongások különösen alkalmasak ilyen mesterséges topológikus szigetelők létrehozására, mivel számos különböző rendszerben megvalósíthatóak, többek között csapdázott ionokkal[30], optikai rácson lévő atomokkal[12] és fotonokkal.[6]. Egy fotonokkal végzett kísérletben a topológikus fázisok jelenlétére jellemző élállapotokat is sikerült detektálni.[14]

1.1. A dolgozat felépítése

Az irodalomban eddig elsősorban homogén kvantumos bolyongásokat vizsgáltak, vagyis olyan eseteket, amelyekben a rendszerre jellemző paraméterek helytől függetlenek. Mivel a valós anyagok általában nem tökéletesen homogének, így felmerül az igény, hogy a jól kezelhető kvantumos bolyongások esetében is megvizsgáljuk a rendezetlenség hatásait, különös tekintettel a bolyongás topológikus fázisaira. Jelen dolgozatban ezt tesszük meg, egy egyszerű, de gazdag struktúrát mutató példára koncentrálna. Bemutatunk egy kvantumos bolyongások esetén általánosan használható módszert a topológikus fázisok meghatározására, amelyet példarendszerünkön szemléltetünk, végül pedig összehasonlítunk egy másik lehetséges eljárással. A dolgozat előzményeként megemlítjük a [20] cikket.

A 2 fejezetben bevezetjük a vizsgálni kívánt kvantumos bolyongást és hozzá kapcsolódóan a bolyongás effektív Hamilton-operátorának fogalmát.

A 3 fejezetben ismertetjük a homogén esetre vonatkozó eredményeket. Először megvizsgáljuk a bolyongás energiaspektrumát, majd a rendszer szimmetriáira építve belátjuk az élállapotok létezését és a topológikus szigetelők egyik alapvető tételét, a

tömb-él korrespondenciát.

A 4 fejezet tárgyalja az irodalomban fellelhető két módszert a topologikus fázisoknak a rendezetlen rendszerekre történő általánosítását illetően.

A gondolatmenetünk szempontjából lényeges korábbi eredmények összefoglalása után a 5 és 6 fejezetekben ismertetjük a rendezetlen kvantumos bolyongásokra vonatkozó új eredményeinket.

A 5 fejezetben bemutatunk egy módszert, amellyel a rendezetlen kvantumos bolyongás topologikus fázisai hatékonyan meghatározhatóak. Ezt először egy általánosabb esetre mutatjuk meg, majd megmutatjuk, hogyan alkalmazható a korábban vizsgált egyszerű bolyongásra.

A 6 fejezetben a 5 fejezet eredményeire építve megadunk egy képletet a vizsgált bolyongás topologikus jellemzőire tetszőleges korrelálatlan rendezetlenség esetén, majd ezt a képletet alkalmazzuk a rendezetlenség két konkrét modelljére. Megmutatjuk az általunk kiszámított mennyiségek kapcsolatát az élállapotokkal, végül pedig összehasonlítjuk eredményeinket a 4 fejezetben vázolt másik módszerrel és kitérünk ez utóbbinak numerikus implementációjára is.

2. A split step kvantumos bolyongás

A kvantumos bolyongás kifejezés a különböző lehetséges rendszereknek egy nagyon gazdag tárházát öleli fel. Megkülönböztethetünk folytonos illetve diszkrét időben lezajló bolyongásokat. Ezen felül különbséget tehetünk az egyes bolyongások között aszerint, hogy milyen térbeli állapotok között zajlik a bolyongás (1,2 vagy 3 dimenziós szabályos rács vagy akár valamilyen általános gráf, lásd [1]), illetve a belső szabadsági fokok száma szerint.

A jelen dolgozatban egy olyan bolyongást vizsgálunk, amely a matematikai leírás szempontjából még kellően egyszerű, de már gazdag viselkedést mutat, elsősorban a topologikus fázisok tekintetében. Ennek érdekében arra az esetre korlátozzuk magunkat, amikor a bolyongás egy egydimenziós lineáris láncon történik, így a lehetséges hely-állapotok egy egész számmal indexelhetőek. Ezen felül a belső szabadsági fokok terét szintén a lehető legegyszerűbb nemtriviális esetnek, vagyis 2 dimenziós-nak választjuk. Ezek után a rendszer egy általános állapota, a helyoperátor és a σ_z Pauli-mátrix sajátállapotainak bázisán a következőképpen írható:

$$|\psi\rangle = \sum_{x=-\infty}^{\infty} \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} c_{x,\sigma} |x, \sigma\rangle \quad (2.1)$$

Az állapottér meghatározása után a következő lépésben meg kell adnunk a rendszer dinamikáját. A jelen dolgozatban tárgyalt bolyongás a diszkrét idejű kvantum bolyongások közé tartozik. Ez azt jelenti, hogy a rendszer időfejlődése diszkrét, T hosszúságú lépésekben történik. Ezt az időfejlődést valamilyen unitér időfejleszt operátor írja le, amely összekapcsolja egymással a t és a $t + T$ időpontokban vett állapotokat:

$$|\psi(t + T)\rangle = U|\psi(t)\rangle \quad (2.2)$$

A gyakorlati megvalósítás szempontjából a diszkrét idejű bolyongás azt jelenti, hogy a laborban mesterségesen létrehozott rendszert (gondoljunk például optikai rácsban csapdázott atomokra) kívülről periodikusan manipuláljuk T periódusidővel, az állapotokat pedig mindig csak stroboszkopikusan, az egyes periodusok végén tekintjük. Vegyük észre, hogy ekkor van egy szabadságunk abban, hogy, hogy a periódus kezdőpontját hol vesszük fel. Egyetlen periodikus protokoll tehát nem egyetlen, hanem végtelen sok U időléptető operátort határoz meg, amelyek egymástól a periódus kezdőpontjában különböznek.[4]

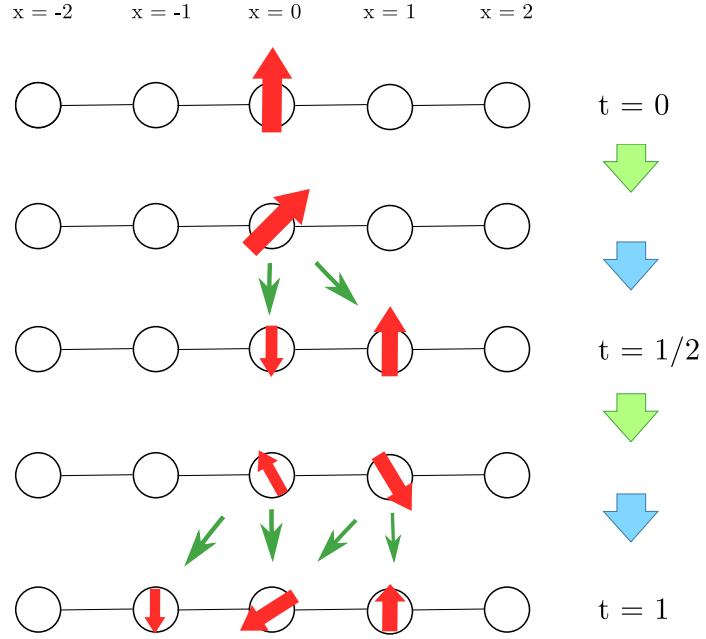
Az általunk vizsgált, úgy nevezett *split step bolyongás* esetén az időfejlesztés négy egymást követő lépésből áll[13] (lásd a 1 ábrát):

- Egy forgatás a belső szabadsági fokok terében (spin-tér), az y tengely körül egy $2\theta_1(x)$ szöggel, ahol megengedjük azt a lehetőséget, hogy a forgatás szöge helyfüggő legyen. Ekkor a forgatás operátora hely-reprezentációban: $R_1 = \bigoplus_x e^{-i\theta_1(x)\sigma_y}$
- Egy spinfüggő eltolás. Ennek során minden rácsponton a hullámfüggvény $|\uparrow\rangle$ komponense egy rácsponttal jobbra tolódik. Az ennek megfelelő operátor: $S_\uparrow = \sum_x |x+1\rangle\langle x| \otimes |\uparrow\rangle\langle\uparrow| + \mathbb{1} \otimes |\downarrow\rangle\langle\downarrow|$
- Egy másik forgatás, az előztől különböző θ_2 szöggel, de szintén az y tengely körül: $R_2 = \bigoplus_x e^{-i\theta_2(x)\sigma_y}$
- Végül egy másik spinfüggő eltolás, ahol ezúttal a $|\downarrow\rangle$ komponenst toljuk el balra egy rácsponttal: $S_\downarrow = \sum_x |x-1\rangle\langle x| \otimes |\downarrow\rangle\langle\downarrow| + \mathbb{1} \otimes |\uparrow\rangle\langle\uparrow|$

Megjegyzés: a gyakorlati megvalósítás esetén valójában nincs eleve adott rács, amelyen a részecske mozog, hanem az eltolások végpontjai jelölik ki azokat a hely állapotokat, amelyek között a bolyongás zajlik.

Egy időlépés operátora:

$$U = S_{\downarrow} R_1 S_{\uparrow} R_2 \quad (2.3)$$



1. ábra. A *split step* bolyongás szekvenciája. Egy lépés négy egymást követő operációból áll: először a *spin*-térben végrehajtunk egy forgatást az *y* tengely körüli, $2\theta_1$ szöggel; ezután a $|\uparrow\rangle$ spinkomponenseket eltoljuk jobbra egy rácsponttal; Ezután következik egy második forgatás $2\theta_2$ szöggel, végül pedig a $|\downarrow\rangle$ komponens eltolása balra.

A fenti kvantumos bolyongás egyik érdekessége a szokványos kvantumrendszerekkel összehasonlítva az, hogy a rendszer dinamikáját nem a Hamilton-operátoron keresztül, hanem közvetlenül az időlépéssel adtuk meg. A definícióból nyilvánvaló, hogy az ennek megfelelő Hamilton-operátor az időnek periodikus függvénye, az U operátort pedig az alábbi képlettel kapjuk, bevezetve a $\hbar = 1$ konvenciót:

$$U_{t_0} = e^{-i \int_{t_0}^{t_0+T} H(t) dt} \quad (2.4)$$

A teljes időfejlődés megadásához tehát ennek az időfejlesztő operátornak kellene megadnunk az időrendezett exponenciális függvényét. A kvantumos bolyongás

leírásánál azonban az állapotokra csak a $t = t_0 + NT$, $N \in \mathbb{N}$ időpontokban vagyunk kíváncsiak. Emiatt nincs szükségünk a $H(t)$ operátor ismeretére a periódus minden időpontjában (valójában több különböző $H(t)$ is szolgáltatthatja ugyanazt az időlépést). Ez lehetővé teszi, hogy bevezessünk egy *effektív Hamilton-operátort* az alábbi összefüggéssel:

$$U \equiv e^{-iH_{\text{eff}}T} \quad (2.5)$$

Az így definiált H_{eff} egy olyan időfüggetlen Hamilton-operátor, amely által generált időfejlődés a periódusidő egész számú többszörösei esetén egybeesik a $H(t)$ által leírt időfejlődéssel. Ebben az értelemben a bolyongás tekinthető a H_{eff} által leírt statikus rendszer stroboszkopikus szimulációjának[13]. Az effektív hamiltoni tanulmányozásából sokat megtudhatunk a bolyongás viselkedéséről. Ismét hangsúlyozzuk azonban, hogy a leírásunk tartalmaz egy önkényes elemet: a 2.4 egyenletben szereplő t_0 paramétert tetszlegesen választhatjuk egy perióduson belül. Így egy adott bolyongáshoz, amelyet a $H(t)$ időfüggő hamiltoni ír le, végtelen sok különböző U operátor, és következésképpen végtelen sok effektív hamiltoni tartozik. Ezekre a különböző kezdőponthoz tartozó időléptető operátorokra azt mondjuk, hogy ugyanazt a bolyongást különböző *timeframe*-ben írják le (lásd [4]). Később látni fogjuk, hogy a bolyongás topologikus tulajdonságainak meghatározásához több különböző timeframe-ből származó információt kell kombinálnunk.

A 2.5 definícióból kitűnik, hogy a H_{eff} operátor sajátértékei egy $2\pi/T$ nagyságú intervallumban vannak értelmezve. Ez a diszkrét időeltolási szimmetria következménye és teljesen analóg azzal, ahogyan a diszkrét térbeli eltolásszimmetria esetén az impulzus helyét a Brillouin-zónában értelmezett kváziimpulzus veszi át. Ennek megfelelően H_{eff} sajátértékeit *kvázienergiáknak* fogjuk nevezni. Az egyszerűség kedvéért a továbbiakban T értékét 1-nek vesszük, és a kvázienergiákat a $[-\pi, \pi]$ intervallumban értelmezzük. A későbbiekben, ha az "energia" kifejezést használjuk, akkor az alatt mindig kvázienergiát értünk.

3. Topologikus invariánsok a homogén bolyongás esetén

A dolgozatban célunk a rendezetlen kvantumos bolyongások vizsgálata az előző fejezetben ismertetett split step bolyongás példáján keresztül. Mielőtt azonban rátérnénk a rendezetlen esetre, először ismertetjük a rendezett, homogén bolyongásokra vonatkozó eredményeket. Ennek során bevezetjük azokat a fogalmakat, amelyekre később szükségünk lesz a rendezetlen split step bolyongás leírásánál.

3.1. A homogén split step bolyongás spektruma

Ebben a fejezetben a homogén split step bolyongást vizsgáljuk, vagyis azt az esetet, amikor a két forgatási szög a helykoordinátától független: $\theta_1(x) = \theta_1$ és $\theta_2(x) = \theta_2 \forall x$. Ez az eset már jól ismert az irodalomban (lásd a [13] [3] cikkeket) ezért most csupán összefoglaljuk azokat a fontosabb eredményeket, amelyekre később támaszkodni fogunk a rendezetlen eset leírásánál.

A homogén esetben a rendszer a diszkrét időeltolási szimmetria mellett diszkrét térbeli szimmetriát is mutat. Ekkor a szilárdtestfizikai rendszerekhez hasonlóan érdemes a koordinátareprezentációból áttérni kváziimpulzus-térbe, akkor az effektív Hamilton-operátor diagonálissá válik:

$$H_{\text{eff}} = \int_{-\pi}^{\pi} dk |k\rangle\langle k| \otimes H_{\text{eff}}(k) \quad (3.1)$$

Itt $H_{\text{eff}}(k)$ egy 2×2 -es mátrix, amelyet az alábbi egyenletből kaphatunk meg:

$$U(k) = e^{-iH_{\text{eff}}(k)} = e^{-ik\sigma_z/2} e^{-i\theta_2\sigma_y} e^{-ik\sigma_z/2} e^{-i\theta_1\sigma_y} \quad (3.2)$$

A 3.2 egyenletből következik, hogy $H_{\text{eff}}(k)$ trace-e 0. Következésképpen felírható a Pauli-mátrixok lineárkombinációjaként:

$$H_{\text{eff}}(k) = E(k) \mathbf{n}(k) \cdot \boldsymbol{\sigma} \quad (3.3)$$

ahol $\boldsymbol{\sigma}$ a Pauli-mátrixokból álló vektor, $\mathbf{n}(k)$ a három dimenziós tér egy egységvektora, $E(k)$ pedig egy valós szám. Mivel $\mathbf{n}(k) \cdot \boldsymbol{\sigma}$ sajátértékei ± 1 , így az adott k kváziimpulzushoz tartozó energiákat éppen $\pm E(k)$ adja.

Felhasználva, hogy tetszőleges $\mathbf{n}$ egységvektorra teljesül $\exp(a \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}) = \mathbb{1} \cos a + \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma} \sin a$, a 3.2 egyenletből kifejezhető $E(k)$ és $\mathbf{n}(k)$ [13]:

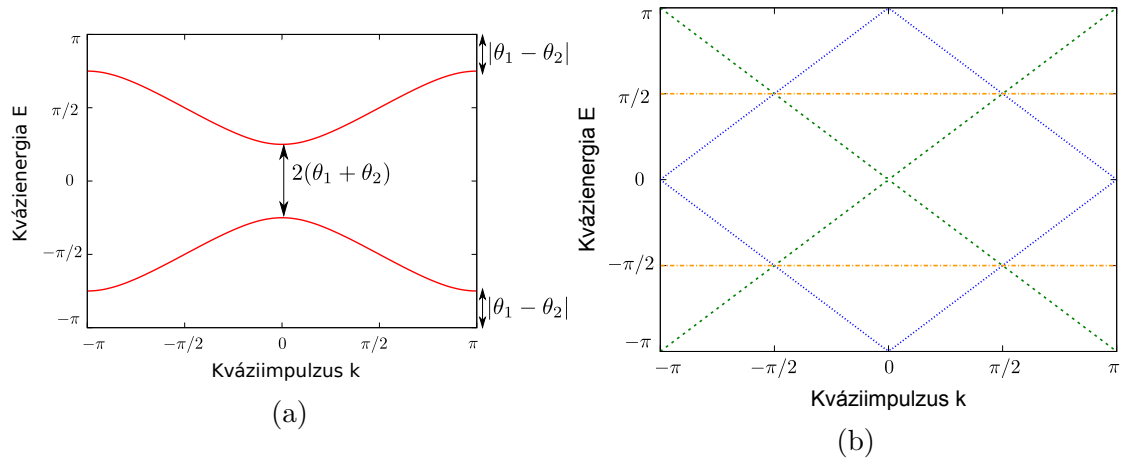
$$\cos E(k) = \cos \theta_1 \cos \theta_2 \cos k - \sin \theta_1 \sin \theta_2 \quad (3.4)$$

$$\mathbf{n}(k) = \frac{1}{\sin E(k)} \begin{pmatrix} \sin \theta_1 \cos \theta_2 \sin k \\ \sin \theta_1 \cos \theta_2 \cos k + \cos \theta_1 \sin \theta_2 \\ -\cos \theta_1 \cos \theta_2 \sin k \end{pmatrix} \quad (3.5)$$

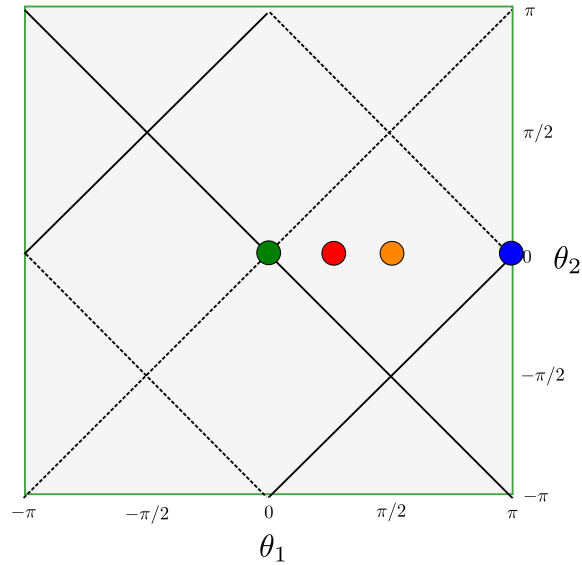
A 3.4 egyenlettel megadott diszperziós relációt néhány speciális esetben a 2 ábrán láthatjuk. A $\theta_{1,2}$ paraméterek általános értékei esetén a diszperziós reláció két független ágra bomlik, amelyeket gapek választanak el egymástól, a bolyongás tehát szigetelőként viselkedik. A kvázienergia periodicitása miatt, tekintve, hogy az energiák $\pm E(k)$ alakban adóttak, két olyan eset van ahol a sávok keresztezhetik egymást: $E = 0$ -nál és $E = \pi$ -nél. A 0 energia körüli gap nagysága $2(\theta_1 + \theta_2)$, a π energia körülié pedig $2(\theta_1 - \theta_2)$. A 3.4 képletet deriválva könnyen megállapítható, hogy a diszperziós reláció szélsőérték helyei $k = 0$ és $k = \pi$. Összességében tehát négy olyan eset van, amikor valamelyik gap záródik. Ezeket a 1 táblázat foglalja össze. Ezek a feltételek négy egyenest határoznak meg a homogén split step bolyongás két dimenziós (θ_1, θ_2) paraméterterében ahogy az a 3 ábrán látható. Ha a paramétereket úgy választjuk, hogy ezen egyenesek valamelyikén helyezkedjenek el, akkor a bolyongás vezetőként viselkedik. Látni fogjuk, hogy ezek a vonalak, ahol valamelyik gap záródik, különböző topológiájú tartományokat választanak el egymástól.

	$E = 0$	$E = \pi$
$k = 0$	$\theta_2 = -\theta_1$	$\theta_2 = \pi - \theta_1$
$k = \pi$	$\theta_2 = \theta_1 - \pi$	$\theta_2 = \theta_1$

1. táblázat. Azon egyenesek egyenletei a split step bolyongás paraméterterében, ahol a gapek záródnak 0 vagy π energián



2. ábra. A 3.4 egyenletben leírt diszperziós reláció $\theta_{1,2}$ paraméterek bizonyos értékeinél. Mindegyik ábrán $\theta_2 = 0$. Az (a) ábrán egy általános esetet ($\theta_1 = \pi/4$) ábrázoltunk. Látható, hogy ekkor véges gap van $E = 0$ és $E = \pi$ körül is. A (b) ábrán látható 2 olyan speciális eset, ahol a gap mindkét helyen záródik ($\theta_1 = 0$ - zöld görbe; illetve $\theta_1 = \pi$ - kék görbe), illetve a $\theta_1 = \pi/2$ eset, amikor mindkét sáv lapos. Ekkor a csoportsebesség 0, k értékétől függetlenül.



3. ábra. A split step bolyongás paramétertere. A folytonos vonal azokat a pontokat jelöli, ahol a gap bezárul $E = 0$ energiánál, a szaggatott vonal pedig azokat, ahol az $E = \pi$ energiánál zárul.

3.2. Királis szimmetria

A split step kvantumos bolyongás egyik legfontosabb jellemzője az ún. *királis szimmetria* jelenléte[13][4]. Tekintsük A Hamilton-operátoroknak egy $H(\chi)$ sokasá-

gát, ahol a χ egy formális változó, amely összefoglalja a rendszer összes paraméterét. A split step bolyongás esetén χ egy, a különböző rácspontokhoz tartozó összes $\theta_1(x)$ és $\theta_2(x)$ szögek értékeiből álló vektort jelent. Ekkor a $H(\chi)$ sokaság a paraméterek különböző eloszlása esetén lehetséges összes split step bolyongásokból áll. A $H(\chi)$ -nek egy ilyen sokasága esetén azt mondjuk, hogy az általuk leírt rendszer királis szimmetriával rendelkezik, amelyet a Γ operátor reprezentál, ha az alábbi három feltétel teljesül:

$$\Gamma^\dagger = \Gamma^{-1} \quad (3.6a)$$

$$\Gamma^2 = \mathbb{1} \quad (3.6b)$$

$$H(\chi)\Gamma = -\Gamma H(\chi) \quad (3.6c)$$

A 3.6b egyenletből következik, hogy a királis szimmetria operátora az alábbi alakba írható: $\Gamma = \Pi_A - \Pi_B$, ahol Π_A és Π_B merőleges alterekre vetítő projektorok. Az altereket, amelyekre vetítenek, a szilárdtestfizikában elterjed szóhasználatnál A és B alrácoknak nevezzük[5]. A 3.6c egyenletből következik az alábbi összefüggés:

$$\Pi_A H \Pi_A = \Pi_B H \Pi_B = 0 \quad (3.7)$$

Ez azt jelenti, hogy a hamiltoninak csak a különböző alrácok közötti mátrixelemei nem nullák. Ha H -ra mint szoros kötésű Hamilton-operátorra gondolunk, akkor azt mondhatjuk, hogy az csak olyan hoppingokat tartalmaz, amelyek az A alrácra a B alrácra, illetve B -ről A -ra visznek. Ebből az is következik, hogy királis szimmetria csak akkor fordulhat elő, ha a hamiltoniban nincsenek diagonális elemek (on-site potenciálok).

A 3.6c egyenlet másik következménye, hogy ha $|\psi\rangle$ H -nak egy E energiájú sajátállapota, akkor $\Gamma|\psi\rangle$ is sajátállapot $-E$ energiával. Emiatt $\Gamma|\psi\rangle$ -t a $|\psi\rangle$ állapot királis partnerének nevezzük.

Célunk belátni, hogy a split step bolyongás valóban rendelkezik királis szimmetriával. Ehhez azonban először vissza kell utalnunk a timeframe-ek korábban bevezetett definíciójára. Láttuk, hogy egy adott periodikus gerjesztési protokoll nem egyetlen effektív hamiltoninak felel meg, hanem azok egy egész sokaságának, amelyek különböző timeframe-ekhez tartoznak[4]. Ennek megfelelően azt mond-

juk, hogy a kvantumos bolyongás rendelkezik királis szimmetriával, ha van olyan timeframe, amelyben az effektív hamiltonira teljesülnek a 3.6 feltételek. Ezeket a timeframe-eket, ahol a szimmetria expliciten jelen van, királis timeframe-eknek nevezzük. Minden kvantumos bolyongás esetén két ilyen királis timeframe van (lásd [4]). A split step bolyongás esetén ebben a két timeframe-ben az időlépés operátora a következőképpen néz ki:

$$U' = R(\theta_1/2) S_\downarrow R(\theta_2) S_\uparrow R(\theta_1/2) \quad (3.8a)$$

$$U'' = R(\theta_2/2) S_\uparrow R(\theta_1) S_\downarrow R(\theta_2/2) \quad (3.8b)$$

Könnyen ellenőrizhetjük, hogy ezek valóban rendelkeznek királis szimmetriával. Definiáljuk a szimmetria operátorát a következőképpen:

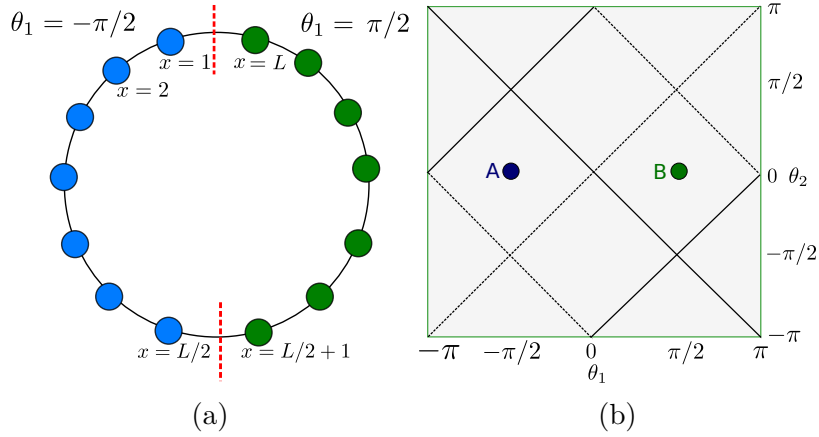
$$\Gamma = \bigoplus_{x=-\infty}^{\infty} \sigma_x \quad (3.9)$$

Ekkor mindkét királis timeframe-ben teljesül $\Gamma U \Gamma = U^{-1}$, ez pedig ekvivalens a $\Gamma H_{\text{eff}} \Gamma = -H_{\text{eff}}$ feltétellel¹. Így tehát a fenti Γ operátor valóban királis szimmetriát fejez ki, még hozzá két különböző timeframe-ben is. Vegyük észre, hogy a bizonyításban nem használtuk ki azt, hogy $\theta_{1,2}(x)$ paramétereknek milyen a térbeli eloszlása, így az tetszőleges inhomogén rendszerre is érvényes.

3.3. Élállapotok

Tekintsünk egy egyszerű inhomogén esetet, amely mindössze két tömbből (A és B) áll, ahogyan az a 4 ábrán látható. A teljes rendszer véges sok, L számú rácspontból áll, amelyeket periodikus határfeltétel mellett veszünk, vagyis az $L+1$. pontot azonosítjuk az 1.-vel. A két tömb $x=1$ -nél és $x=L/2$ -nél érintkeznek. A tömbök homogének és a paramétereiket az egyszerűség kedvéért a következőképpen választjuk: $\theta_1^A = \pi/2$, $\theta_1^B = \pi/2$, $\theta_2^A = \theta_2^B = 0$. Ekkor a 2.3 definícióból könnyen ellenőrizhetjük, hogy egy tetszőleges rácspontból indított bolyongó végig lokalizált marad: mindig csak a kiindulási pontot és annak szomszédait járja be. Ennek

¹A bizonyításhoz írjuk be a $\Gamma U \Gamma$ szorzatba a 3.8 definíciókat és minden tényező közé szúrjunk be $\Gamma^2 = \mathbb{1}$ -et. Ezután hármassával csoportosítva a tényezőket felismerhetjük bennük az U -ban szereplő operátorok inverzeit fordított sorrendben



4. ábra. Két tömbből álló inhomogén bolyongás periodikus határfeltételekkel. (a) Az A tömbben (kékekkel jelölt rácspontok) $\theta_1 = -\pi/2$, a B tömbben (zöld rácspontok) $\theta_1 = \pi/2$, θ_2 pedig 0 az egész rendszerben. A tömböket két éles határ választja el $x = 1$ -nél és $x = L/2$ -nél, ezeket a piros szaggatott vonalak jelzik. (b) A két tömb paramétereit a bolyongás paraméterterében. A kék pont az első, a zöld pont a második tömbnek felel meg.

ellenére egy különbséget figyelhetünk meg attól függően, hogy a részecskét a két tömb határol, vagy valamelyik tömb belsejéből indítjuk-e el. A tömbök belsejében ($x \neq 1$ és $x \neq L/2 + 1$) U sajátállapotainak alakja:

$$|x\rangle \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \pm i|x-1\rangle \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (3.10)$$

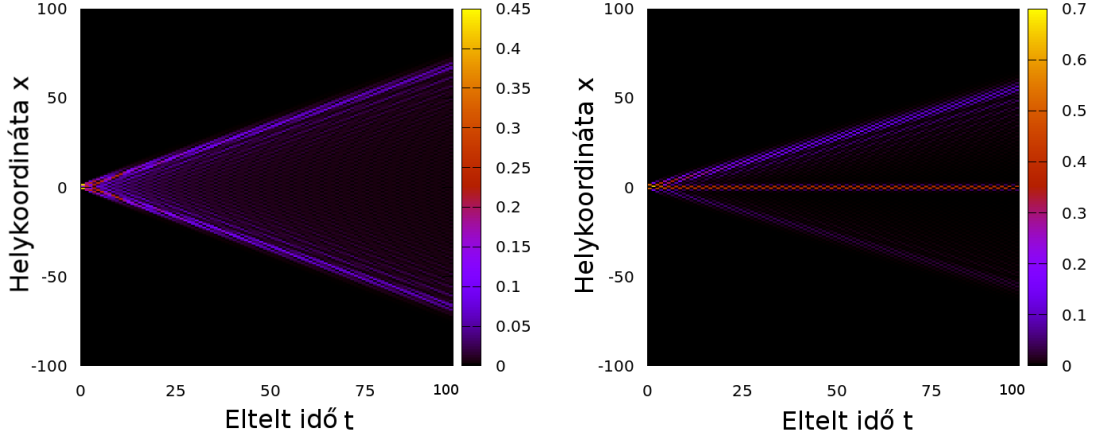
Ezek energiája $\pm\pi/2$ (az A tömbben) illetve $\mp\pi/2$ (a B tömbben) és egymásnak királis partnerei (ez expliciten nem látszik, mivel most az eredeti timeframe-ben vagyunk és nem a királis timeframe-ek valamelyikében; az U operátor sajátértékei a timeframe-től függetlenek, a sajátállapotok alakja viszont változik az egyik timeframe-ből a másikba való áttéréskor). Ezeket az állapotokat a továbbiakban tömbi állapotoknak nevezzük. Ezzel szemben a határokon ($x = 1$ illetve $x = L/2+1$) a sajátállapotok alakja a következő:

$$|x\rangle \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \pm |x-1\rangle \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (3.11)$$

Az ezekhez tartozó energiák 0 illetve π . Ha áttérnénk valamelyik 3.8-ben definiált királis timeframe-be, azt látnánk, hogy ezek saját maguk királis partnerei (ne feledjük, hogy a kvázienergia periodicitáva miatt $E = \pi$ -t és $E = -\pi$ -t nem különböztetjük

meg). Ezeket az állapotokat élállapotoknak nevezzük. A név 2 dimenziós rendszerek vizsgálatából származik, ahol a tömbök közötti határ egy egy dimenziós élnek felel meg.[25]

A kétféle sajátállapot közötti különbség akkor válik nyilvánvalóvá, ha a elkezdjük a θ_1^A és θ_1^B paraméterek értékét folytonosan változtatni (az egyszerűség kedvéért most feltesszük, hogy a tömbökön belül ezek továbbra is homogének, de fontos megjegyezni, hogy a gondolatmenet akkor is érvényes, ha a tömbök belsejében inhomogén rendezetlenséget vezetünk be). Ekkor a tömbök belsejében a sávok kiszélesednek, a lokalizált állapotok delokalizálttá válnak, a nekik megfelelő diszperziós reláción a 2b ábrán sárga vonallal jelölt lapos sávok átmennek a 2a ábrán jelzett általánosabb esetben, ahol a sajátállapotok lineárisan terjedő, nem 0 csoportsebességű síkhullámok (lásd 5a ábrát). Mi történik az élállapotokkal? A királis szimmetria megköveteli, hogy az energia sajátállapotok $\pm E$ energiás párokban létezzenek. Ezen felül az élállapotok a királis timeframe-ekben Γ -nak is sajátállapotai, ami akkor lehetséges, ha a Γ által definiált két alrács közül csak az egyikben vesznek fel nem nulla értékeket. Egy adott határfelülethez tartozó két élállapot különböző energiájú, így egymással nem tudnak hibridizálódni (más, bonyolultabb rendszerekben előfordulhat, hogy egyazon határfelületen több azonos energiájú élállapot is jelen van, ekkor azonban ezek mind ugyanarra az alrácsra koncentrálnak, így szintén nem tudnak hibridizációval tömbi állapotokat létrehozni). Ez azt jelenti, hogy egy élállapot energiája a paraméterek változtatása során rögzített marad a 0 és π energiákon. Korábban láttuk, hogy éppen ezen energiák körül a tömbökben általában véges méretű gapek vannak. Mivel a tömbökben nincsenek megfelelő energiájú állapotok, következésképpen az élállapotok a tömböket elválasztó határpontok közelében lokalizálódva maradnak és a tömbök belseje felé exponenciálisan lecsengenek (lásd 5b ábra). Ez egészen addig így van, amíg valamelyik tömb paraméterei nem érik el a 1 feltételek által definiált vonalak valamelyikét. Ekkor a gapek egyike bezáródik és az adott energián az egész tömbre kiterjedő delokalizált állapotok lesznek jelen a rendszerben. Ezek lehetővé teszik, hogy a két különböző határfelületen lévő, azonos energiájú élállapotok egymással hibridizálódni tudjanak, tömbi állapotokat hozva létre. A paramétereket tovább változtatva ezen állapotok energiája elmozdulhat a 0 illetve π értékekről, így ekkor maguk is tömbi állapotokká válnak.



(a) Megtalálási valószínűség $|\psi(x)|^2$

(b) Megtalálási valószínűség $|\psi(x)|^2$

5. ábra. Az origóból induló részecske propagációjának numerikus szimulációja. Az ábrákon szín-kódolás jelzi a $|\psi(x)|^2 = |\psi(x, \uparrow)|^2 + |\psi(x, \downarrow)|^2$ megtalálási valószínűséget. (a) Egy homogén tömb belsejében, $\theta_1 = 0, 3\pi$ és $\theta_2 = 0$ paraméterek esetén. Ekkor jól láthatóan két hullámfront terjed szét a rendszerben ballisztikus módon. (b) Két tömb határáról indulva. A tömbök paraméterei: $\theta_1^A = 0, 3\pi$, $\theta_1^B = -0, 3\pi$ és $\theta_2 = 0$ az egész rendszerben. Ekkor a hullámfüggvény jelentős része a határ közelében marad lokalizálódva, jelezve az élállapotok jelenlétét.

Az élállapotok száma tehát akkor tud megváltozni, amikor a tömbök egyike átmegegy a 1 egyenesek által határolt tartományok egyikéből egy másikba. Így az azonos tartományokban lévő pontok a paraméterterben az élállapotok szempontjából ekvivalensek (ha például a két tömb paraméterei azonos tartományban vannak, akkor nem lehetnek élállapotok, hiszen ez átdeformálható egy homogén tömbbé nélkül, hogy kereszteznénk valamelyiket azon vonalak közül ahol a gap záródik). Ez arra utal, hogy a homogén kvantum bolyongásnak kell legyen valamilyen jellemzője, amely csupán attól függ, hogy a paraméterterben a 3 ábrán jelzett tartományok közül melyikben vagyunk. Továbbá azt várjuk, hogy két, egymással érintkező homogén tömb esetén ennek a jellemzőnek az értéke a tömbökben meghatározza, hogy a tömbök határán lehetnek-e élállapotok. Ez a gondolatmenet elvezet minket a topologikus invariánsok fogalmához.

3.4. Csavarodási számok és topologikus invariánsok

Tekintsünk egy homogén split step bolyongást. Induljunk ki abból, hogy valamelyik királis timeframe-ben vagyunk és írjuk az adott k hullámszámhoz tartozó effektív Hamilton-operátort $H_{\text{eff}}(k) = \mathbf{h}(k)\boldsymbol{\sigma}$ alakba, ahol $\mathbf{h} = (h_1, h_2, h_3)$ egy három komponensű, k -tól függő vektor. Ekkor a királis szimmetria feltétele, felhasználva a 3.9 definíciót, leegyszerűsödik a $\sigma_x H_{\text{eff}}(k) \sigma_x = -H_{\text{eff}}(k) \forall k$ követelményre. Ez ekvivalens azzal, hogy a h_1 komponens 0, vagyis a $\mathbf{h}(k)$ vektor tetszőleges k érték esetén az $y - z$ síkban fekszik. A kváziimpulzus periodicitása miatt $\mathbf{h}(k)$ végpontja egy zárt görbét rajzol ki ebben a síkban, miköben k végighalad a Brillouin-zónán. Ekkor két esetet különböztethetünk meg: az origó vagy ezen a zárt görbén belül, vagy rajta kívül helyezkedik el. Azt a számot, ahányszor a görbe megkerüli az origót, *csavarodási számnak* nevezzük, és ν -vel jelöljük. Általában ν valamilyen egész értéket vehet fel. Ha az origó a görbén kívül van, akkor $\nu = 0$, ha pedig belül. akkor ν lehet pozitív vagy negatív, attól függően, hogy a görbe az óramutató járásával ellentétes vagy megegyező irányban kerüli-e meg az origót.

A csavarodási számot explicit képlettel is megadhatjuk. Vezessük be a $h(k) = h_1(k) + ih_2(k)$ komplex számot. Abban a bázisban, ahol a királis szimmetria operátora diagonális, az effektív Hamilton-operátor a következő alakú:

$$H_{\text{eff}}(k) = \begin{pmatrix} 0 & h(k) \\ h^*(k) & 0 \end{pmatrix} \quad (3.12)$$

A csavarodási szám nem más, mint $h(k)$ fázisának teljes megváltozása, osztva 2π -vel, miközben k végighalad a Brillouin-zónán. Ez a következőképpen számítható:

$$\nu = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\pi}^{\pi} dk \frac{d}{dk} \log h(k) \quad (3.13)$$

Mivel a $\mathbf{h}(k)$ vektor hossza éppen az $E(k)$ energia, így a vektor végpontja egy π sugarú körlapon belül mozog, ahol a gömb felületének összes pontját azonosítjuk. Ebből jól látható, hogy a csavarodási szám értékét kétféleképpen változathatjuk meg: a $\mathbf{h}(k)$ görbét vagy az origón húzzuk keresztül, vagy pedig a gömb felületén. Ez a két eset annak felel meg, hogy a gap bezáródik $E = 0$ -nál, illetve $E = \pi$ -nél. Ez azt jelenti, hogy H_{eff} paramétereinek folytonos változtatásakor ν értéke csak valamelyik gap záródásakor tud megváltozni. A rendszer olyan jellemzőit, amely érzéketlen a paraméterek változásaira, egészen addig amíg a szigetelő tartományban vagyunk

és egyik gap sem zárul be, *topologikus invariánsoknak* nevezzük. Így tehát mindig a csavarodási szám, mind a rendszerben jele lévő élállapok száma topologikus invariáns. Most azt fogjuk belátni, hogy ezek egymástól nem függetlenek: a csavarodási szám megváltozása a tömbökben kapcsolatban van az élállapotok megjelenésével a tömbök határán. A kettő közötti kapcsolatot tömb-él korrespondenciának (*bulk-boundary correspondence*) szokás nevezni.

Az első lépés az, hogy az eddig tisztán geometriai alapon bevezetett csavarodási számnak fizikai jelentést adjunk. Látni fogjuk, hogy ez a fizikai jelentés az elektromos polarizáció fogalmához kapcsolódik. Egy egy dimenziós szigetelő kristály esetén a tömbi elektromos polarizáció így adható meg [23], [5]:

$$P_{el} = e \sum_n \gamma_n \quad (3.14)$$

ahol a e az elemi töltés, szumma a betöltött sávokra megy és γ_n az n . sávhoz tartozó ún. *Zak-fázis*:

$$\gamma_n = \frac{1}{2\pi i} \int dk \langle u_n(k) | \frac{d}{dk} | u_n(k) \rangle \quad (3.15)$$

Itt $|u_n(k)\rangle$ az n . sávhoz és a k kváziimpulzushoz tartozó Bloch-állapot az integrálást pedig a Brillouin-zónára végezzük. Királis szimmetria esetén vehetjük az adott alrácsra vetített polarizációt (e egységeken):

$$P_A = \frac{1}{2\pi i} \sum_n \int dk \langle u_n(k) | \Pi_A \frac{d}{dk} \Pi_A | u_n(k) \rangle \quad (3.16)$$

és hasonlóan kapjuk a B alrács polarizációját Π_A -t Π_B -re cserélve a fenti képletben. A csavarodási szám pedig átírható a következőképpen:

$$\nu = P_A - P_B = \frac{1}{2\pi i} \sum_n \int_{-\pi}^{\pi} dk \langle u_n(k) | \Gamma \frac{d}{dk} | u_n(k) \rangle \quad (3.17)$$

Amikor tehát a csavarodási szám értéke eggyel megváltozik, valamelyik alrács a másikhöz képest egységnyi polarizációra tesz szert. Ez még szemléletesebb, ha megfontoljuk, hogy az elektromos polarizáció szoros kapcsolatban van a helyoperátor várható értékével.[24] Ez látható a 3.15 képletből is, ha figyelembe vesszük, hogy impulzustérben a helyoperátor az $\frac{1}{i} \frac{d}{dk}$ differenciáloperátorral reprezentálható.

A csavarodási szám megváltozása tehát intuitíven úgy képzelhető el, hogy a hul-

lámfüggvények A illetve B alrácsra vett vetületei egymáshoz képest térben eltolódnak. A 3.17 egyenlet alapján a csavarodási szám és az élállapotok közötti kapcsolatot is megérthetjük. A királis szimmetria miatt a tömbi állapotok mindig választhatók úgy, hogy egyenlő súlyuk legyen mindkét alrácsra. Így a csavarodási szám, vagyis az alrács-polarizációk különbsége az élállapotok megjelenésével tud megváltozni. Ha két különböző csavarodási számmal rendelkező tömb érintkezik egymással, akkor az alrács-polarizációkban jelentkező különbséget a felületen lévő élállapotok egyenlítik ki, így az élállapotok számát a tömbök csavarodási számainak különbsége meghatározza. Ez utóbbi összefüggés a korábban említett tömb-él korrespondencia. Jelöljük a baloldali (L) és jobboldali (R), ν_L illetve ν_R csavarodási számokkal jellemzett tömbök határán lévő élállapotok számát m_A -val illetve m_B -vel, aszerint, hogy melyik alrácsra laknak.[5][4] Ekkor:

$$\nu_L - \nu_R = m_A - m_B \quad (3.18)$$

Ez az egyenlet ugyan megadja az élállapotok és a csavarodási számok közötti kapcsolatot, azonban érzéketlen az élállapotok energiájára. A célunk az, hogy olyan tömbi topologikus invariánsokat találjunk, amelyek külön-külön megadják a 0 illetve π energiájú élállapotok számát a 3.18 egyenlethez hasonló alakban. Ehhez idézzük fel, hogy a 3.8 egyenletek értelmében a kvantumos bolyongás esetén két különböző királis timeframe van. Mindkettő esetén definiálhatunk egy csavarodási számot a 3.13 képlet alapján, ahol $h(k)$ helyébe az adott timeframe-ben vett effektív Hamilton operátor mátrixelemét kell beírunk. Jelöljük ezt a két csavarodási számot ν' -vel és ν'' -vel. Eddig nem hivatkoztunk arra, hogy melyik timeframe-ről beszélünk, így a 3.18 képlet egyaránt érvényes ν' -ra és ν'' -re.

Az élállapotok energiája független a timeframe-től, a hullámfüggvény alakja viszont függhet tőle. Megvizsgálva azt, hogy hogyan változnak az élállapotok az egyik királis timeframe-ből a másikra való áttérésnél, belátható (lásd a [4] cikket), hogy a 0 energiájú élállapotok azonos alrácsokhoz tartoznak mindkét timeframe-ben, míg a π energiájúak ellentétes alrácsokhoz. Ebből következik az alábbi összefüggés:

$$m''_A = m''_{A,0} + m''_{A,\pi} = m'_{A,0} + m'_{B,\pi} \quad (3.19a)$$

$$m''_B = m''_{B,0} + m''_{B,\pi} = m'_{B,0} + m'_{A,\pi} \quad (3.19b)$$

Ahol $m'_{A,E}$ és $m''_{A,E}$ az A alrácson lévő, $E \in \{0, \pi\}$ energiájú élállapotok száma a 3.8-ben definiált első, illetve második timeframe-ben. Kombinálva a 3.19 és a 3.18 képleteket:

$$m'_{A,0} - m'_{B,0} = \nu_{0,L} - \nu_{0,R} \quad (3.20a)$$

$$m'_{A,\pi} - m'_{B,\pi} = \nu_{\pi,L} - \nu_{\pi,R} \quad (3.20b)$$

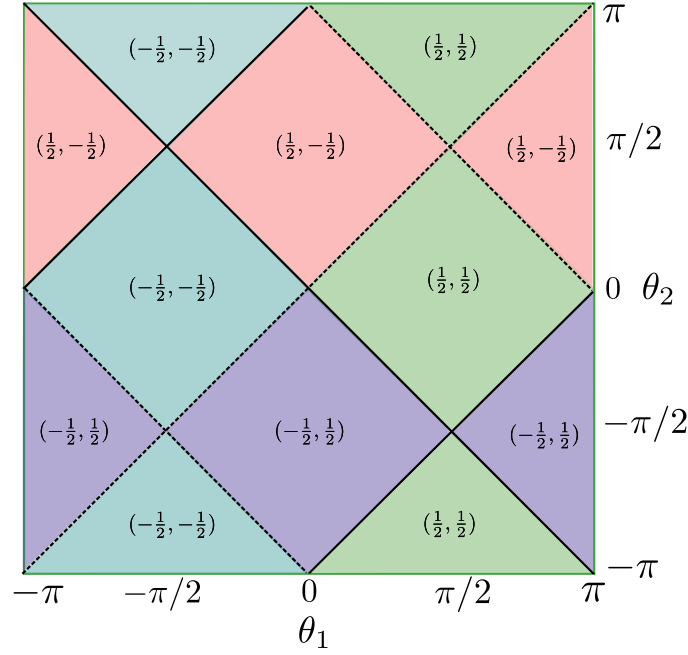
ahol bevezettünk két új jelölést:

$$\nu_0 = \frac{\nu' + \nu''}{2} \quad (3.21a)$$

$$\nu_\pi = \frac{\nu' - \nu''}{2} \quad (3.21b)$$

A 3.20 egyenletből látható, hogy ezek a mennyiséget a várt módon megadják az adott energiájú élállapotok számát két tömb határán. ν_0 -t és ν_π -t a kvantumos bolyongás tömbi topologikus invariánsainak, vagy egyszerűen csak topologikus invariánsoknak nevezzük. Ezek együttesen ugyanazt az információt tartalmazzák, mint ν' és ν'' , de praktikusabbak az élállapotok jellemzésének szempontjából.

Összegezve az eddig tárgyalt eredményeket, felrajzolhatjuk a split step bolyongás fázistérképét. Az egyes tartományok határait már láttuk a 3 ábrán, a hozzájuk tartozó ν_0 és ν_π topologikus invariánsokat pedig a 6 ábra mutatja.



6. ábra. A *split step* bolyongás fázistérképe. A zárójelbe írt mennyiségek a topologikus invariánsok (ν_0, ν_π) . A különböző topologikus fázisokat azok a vonalak választják el egymástól, ahol a gap záródik, lásd a 1 táblázatot

4. Általánosítás a rendezetlen esetre

A 3.13 és a 3.17 képletekből világosan látszik, hogy a tömbi topologikus invariánsoknak az előző fejezetben ismertetett definíciója kizárólag homogén, eltolásra nézve invariáns rendszerekben működik (ezért beszélünk tömbi invariánsokról, mivel a tömbön belül érvényesül az eltolás-invariancia). Ezzel szemben az élállapotok létezésére vonatkozó levezetésünk érvényben marad abban az esetben is, amikor az eltolásszimmetria sérül, a levezetésből pedig az is következik, hogy amíg a gapek be nem zárulnak addig az élállapotok robusztusak a tömböt érintő perturbációkkal szemben, akkor is ha azok valamilyen térbeli rendezetlenséget mutatnak. Ez alapján joggal várhatjuk, hogy a topologikus invariánsok definíciója kiterjeszthető rendezetlen rendszerekre is.²

Az irodalomban kétféle ilyen általánosítással találkozhatunk. Az egyik lehetőség a 3.13 képlet átfogalmazása kváziimpulzus-reprezentációból valós térbe [18]. A másik

²Jelen dolgozatban rendezetlenség alatt mindig térbeli rendezetlenséget értünk, vagyis olyan esetet amikor a paraméterek - a θ_1, θ_2 szögek - minden x koordináta esetén valamilyen valószínűségi eloszlásból származnak, időben viszont állandóak. Feltesszük továbbá azt is, hogy a rendezetlenség lokális és korrelálatlan, az egyes rácspontok paraméterei a többi rácsponttól függetlenek.

út a topologikus invariánsok és a szórásmatrix közötti kapcsolaton alapul. [10] [28]. Most röviden ismertetjük ezt a két módszert.

4.1. Valós térbeli csavarodási számok

A tömbi topologikus invariánsok fogalmának első lehetséges általánosítása abból indul ki, hogy, amint azt korábban láttuk, az invariánsok értéke érzéketlen a Hamilton-operátor deformációjára egészen addig, amíg a gapek egyike sem zárul be. Ez azt jelenti, hogy ha adott egy szigetelő hamiltoni, akkor a topologikus invariánsok számolásakor azt mindig helyettesíthetjük a "kilapított" verziójával, amelyet úgy kapunk, hogy minden E energia-sajátértéket $\text{sign}(E)$ -vel helyettesítünk. Jelöljük ezt az operátort Q -val. A definíció alapján könnyen látható, hogy ez két projektor különbségeként adódik: $Q = P_+ - P_-$, ahol P_+ és P_- a pozitív, illetve negatív energiákra vetít.

A 3.12 és 3.13 egyenletekből látható, hogy a csavarodási szám kiszámításához a hamiltoninak az off-diagonális elemére illetve ennek inverzére lesz szükségünk. A Q operátor esetében ezek egyszerűen megadhatóak a királis szimmetria operátor projektorainak segítségével. Az off-diagonális elem $Q_{AB} = \Pi_A Q \Pi_B$, inverze pedig $Q_{AB}^{-1} = Q_{BA} = \Pi_B Q \Pi_A$ (Ez az összefüggés valójában csak a $\Pi_A \mathcal{H}$ altéren érvényes, ahol $\mathcal{H}$ a rendszerhez tartozó Hilbert-tér). Ezen felül a $\frac{d}{dk}$ differenciáloperátor valós térben egy $-i$ szorzó erejéig megfeleltethető a helyoperátorral vett kommutátornak, $\frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dk$ pedig megfeleltethető az egységnyi hosszra vett trace-nek. Összességében A 3.13 képlet valós térbeli megfelelője egy L méretű rendszerre:

$$\nu = -\text{Tr}(Q_{BA}[X, Q_{AB}])/L \quad (4.1)$$

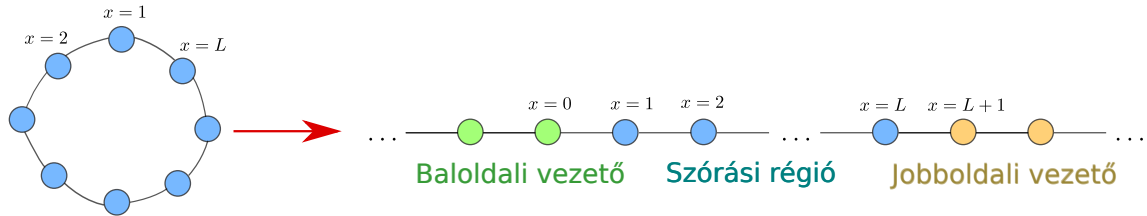
Általában a fenti képletet valamilyen véges méretű rendszerre akarjuk implementálni, periodikus határfeltételek mellett. Ekkor ügyelnünk kell arra, hogy a határfeltételek szükségessé teszik a helyoperátor definíciójának megfelelő módosítását [24]. Ennek megfelelően numerikus számításoknál a diszkretizációt is megfelelően kell elvégezni és a képletben szereplő kommutátort is a szokásostól eltérően kell értelmezni. A helyes diszkretizációs eljárás megtalálható a [21] cikkben, ezt később összefoglaljuk a 6.5 fejezetben. Ezeket figyelembe véve a 4.1 képlet segítségével tetszőleges rendezetlen rendszerre kiszámíthatjuk a csavarodási számot. A kvantumos bolyongás esetében ezt mindkét királis timeframe-hez tartozó effektív hamiltoni ese-

tén meg kell tennünk és ezekből a 3.21 képleteknek megfelelően kapjuk a keresett topologikus invariánsokat. Ennek mikéntjére visszatérünk a 6.5 fejezetben.

4.2. A topologikus invariánsok és a szórasmátrix kapcsolata

A másik út a topologikus invariánsok fogalmának rendezetlen rendszerekre való általánosításához a szórasmátrix fogalmán keresztül vezet. A szórasmátrix bevezetéséhez a periodikus határfeltételek helyett egy véges méretű nyílt rendszert veszünk, amelynek mindkét feléhez visszaszórás nélküli vezetőket csatlakoztatunk, ahogyan azt a 7. ábra mutatja. A kvantumos bolyongás esetében ez azt jelenti, hogy $x > L$ és $x < 1$ esetén (ezek a jobb- és baloldali vezetők) az időfejlődésből elhagyjuk a forgatásokat és az időlépés operátorát egyszerűen $U = S_\downarrow S_\uparrow$ -ként definiáljuk. Ezzel szemben az $1 \leq x \leq L$ tartományon (szórási régió) meghagyjuk az eredeti időfejlődést. Ekkor a vezetőkben a sajátállapotok lineáris diszperziójú síkhullámok lesznek (lásd a 2b ábrán zölddel jelölt görbéket). A szórasmátrix a két vezetőben lévő bejövő illetve kimenő síkhullámokat köti össze egymással az alábbi módon[17]

$$\begin{pmatrix} |\Psi_{In}^L\rangle \\ |\Psi_{In}^R\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r(E) & t'(E) \\ t(E) & r'(E) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} |\Psi_{Out}^L\rangle \\ |\Psi_{Out}^R\rangle \end{pmatrix} \quad (4.2)$$



7. ábra. A szórási probléma megfogalmazásakor a periodikus határfeltételek helyett egy nyílt rendszert veszünk amelyhez két vezetőt csatlakoztatunk. A szórási régióban az eredeti időfejlődés érvényes míg a jobb- és baloldali vezetőkben csak az eltolások vannak jelen így itt $U = S_\downarrow S_\uparrow$.

Az In és Out indexek a bejövő illetve kimenő síkhullámokat jelölik, míg az L és R indexek rendre a baloldali és jobboldali vezetőre utalnak. A képletben megjelenő mátrix a szórasmátrix, amelynek komponensei az r , r' reflexiós mátrixok illetve t , t' transzmissziós mátrixok, amelyek függenek a síkhullámok E energiájától (ez a leírás olyan rendszerekben értelmes, ahol a szórási régióban nincs disszipáció; ez a kvantumos bolyongásokra mindig teljesül). Általános esetben egy adott ve-

zetőben több azonos irányú módus is terjedhet, a szórásmátrix komponensei tehát maguk is mátrixok. A kvantumos bolyongás esetén az egymástól független jobbra ill. balra haladó síkhullámok száma megegyezik azzal, ahányszor az $S_{\uparrow}$ illetve az $S_{\downarrow}$ operátorok szerepelnek az időlépés operátorában. Így a split step bolyongás esetében mindegyik vezetőben csak egy bejövő és egy kimenő hullám terjed. Ekkor a a szórásmátrix 2×2 -es, komponensei komplex számok amelyeket szórási illetve transzmissziós amplitudóknak nevezünk.

A szórásmátrix és a topologikus invariánsok közötti kapcsolatot részletesen vizsgálták mind közönséges topologikus szigetelőkre[10] mind kvantumos bolyongások esetére[28]. Most röviden összegezzük a bolyongásokra vonatkozó eredményeket, a split step bolyongásra koncentrálva.

Ha a bolyongás egy időlépését az U operátor írja le, akkor a reflexió illetve transzmisszió kifejezhető a következőképpen:

$$r(E) = \langle 0, \downarrow | \sum_{s=0}^{\infty} e^{iEs} U^s | 0, \uparrow \rangle \quad (4.3a)$$

$$t(E) = \langle L+1, \uparrow | \sum_{s=0}^{\infty} e^{iEs} U^s | 0, \uparrow \rangle \quad (4.3b)$$

Ehhez hasonlóan kifejezhető $r'(E)$ és $t'(E)$ is.

A rendszer szimmetriái különféle feltételeket szabnak a szórásmátrix alakjára nézvést.[28] Ezek közül a split step bolyongás topologikus invariánsainak szempontjából leglényegesebb a királis szimmetria. A Γ operátor egy E energiájú, jobbra ill. balra haladó síkhullámot átvizsgál egy $-E$ energiájú, az ellenkező irányba haladó síkhullámmá. Ez a következő feltételt jelenti a reflexió amplitudóra nézvést:

$$r(E) = r(-E)^* \quad (4.4)$$

Mint láttuk, az élállapotok mindig $E = 0$ vagy $E = \pi$ energiával rendelkeznek. Ezeken az energiákon a 4.4 feltétel azt jelenti, hogy a reflexió amplitudójának valósnak kell lennie. Ezen kívül, ha valamelyik szigetelő tartományon belül vagyunk, akkor a tömbökben nincsenek ilyen energiájú állapotok, ezért az ezeken az energiákon bejövő síkhullámok a szórási régióban evanescens hullámokként exponenciálisan lecsengenek. Ez azt jelenti, hogy az $L \gg 1$ határesetben $r(0)$ és $r(\pi)$ egységnyi szá-

mok. A két feltételből együttesen következik, hogy négy különböző lehetőség van: $r(0) = \pm 1$ és $r(\pi) = \pm 1$, egymástól függetlenül. A reflexiós amplitudó előjelének megváltozása akkor lehetséges, ha a gap az adott energián bezárul, vagyis egyik topologikus fázisból a másikba megyünk át. Ez azt jelenti, hogy a reflexiós amplitudó előjele (kellően nagy rendszer esetében ez megegyezik magával az amplitudóval) jó topologikus invariáns. Továbbá igaz az, hogy a kötött állapotok rezonanciákként jelentkeznek a szórás kísérletben. Általános esetben ahhoz, hogy két tömb (jelöljük őket A -val és B -vel) határára kötött állapotok lehessenek, a $\det(1 - r_A r_B') = 0$ feltételnek kell teljesülnie. Ebből a feltételből belátható hogy a reflexiós mátrixok az élállapotokhoz tartozó energiákon megadják az adott energiájú élállapotok számát, vagyis teljesül rájuk a tömb-él korrespondencia.[11][10][28] Ennek alapján a 3.21 egyenletekkel definiált topologikus invariánsok megfeleltethetőek a reflexiós mátrixok bizonyos mátrixinvariánsainak (részletesen lásd a hivatkozott cikkeket). A split step bolyongás esetén, ahol a reflexiós mátrix 1×1 -es, ez az alábbi egyszerű összefüggéseket jelenti:

$$\nu_E = \frac{1}{2}r(E) \quad (E = 0, \pi) \quad (4.5)$$

Így tehát a topologikus invariánsok korábbi definícióját sikeresen átfogalmaztuk a szórási probléma nyelvezetére. Ennek számos előnye van. Egyrészt, szemben a 3.13 képlettel, amelynek alkalmazásához a Hamilton-operátor teljes spektrumát ismerni kellett, a 4.5 képlet alapján csupán az élállapotok energiáján kell ismernünk a rendszer viselkedését ahhoz, hogy az élállapotok számát meghatározzuk. A továbbiak szempontjából még fontosabb az, hogy a szórás mátrixon alapuló definíció természetes módon alkalmazható rendezetlen rendszerek esetére is.

A dolgozat további részében először részletesen megvizsgáljuk, hogy hogyan ültethető át a szórás mátrixokra épülő módszer a gyakorlatba olyan módon, ami lehetővé teszi mind a numerikus, mind az analitikus számolásokat és bemutatjuk az ezzel a módszerrel a rendezetlen split step bolyongás esetén elért eredményeket. A dolgozat végén ismét visszatérünk a valós térbeli csavarodási számokon alapuló módszerre és összevetjük a két úton kapott eredményeket.

5. A valóstérbeli szórásmátrixok módszere

Ebben a szekcióban egy olyan módszert mutatunk be, amelynek segítségével konkrétan kiszámíthatjuk a kvantumos bolyongás korábban definiált szórásmátrixát. A módszert először általánosabb egy dimenziós bolyongásokra ismertetjük, majd bemutatjuk a módszer alkalmazását a split step bolyongásra.

5.1. A módszer általános leírása

A szórási probléma megoldásaként olyan stacionárius állapotot keresünk, amely a szórási régióhoz csatlakoztatott két vezetőben a megfelelő határfeltételeknek tesz eleget. Mivel a keresett állapot stacionárius, teljesül rá az alábbi egyenlet:

$$U |\psi\rangle = e^{-iE} |\psi\rangle \quad (5.1)$$

Célunk az, hogy ebből a feltételből kifejezzük azt, hogy a $|\psi\rangle$ állapot hullámfüggvényében hogyan aránylanak egymáshoz a szomszédos rácspontokhoz tartozó komponensek.

Tekintsünk egy olyan egy dimenziós bolyongást, amelynek egyetlen időlépése N darab forgatást, illetve eltolást tartalmaz:

$$U_0 = S_N R_N \dots S_1 R_1 \quad (5.2)$$

ahol $S_i = S_\downarrow$ vagy $S_i = S_\uparrow$, R_i pedig egy forgatás az y tengely körül valamilyen $\theta_i(x)$ szöggel, amely függhet a helykoordinátától. Tegyük fel, hogy az N darab eltolásoperátor között $n^\uparrow$ darab $S_\uparrow$ és $n^\downarrow$ darab $S_\downarrow$ van (valójában $n^\uparrow = n^\downarrow$, különben a spektrumban nem lehetne gap). Ebben az esetben a hullámfüggvénynek egy lépés utáni értékét az x helyen az $x - n^\uparrow$ -tól $x + n^\downarrow$ -ig terjed pontokban a lépés előtt felvett értékei határozzák meg. Tovább bonyolítja a helyzetet, hogy az eltolások közé beiktatott forgatási operátorok miatt előfordulhat az is, hogy a bolyongó részecske egyetlen lépés alatt visszatér a kiindulási helyére. Ez megnehezíti azt, hogy a szomszédos pontok hullámfüggvényei között olyan kapcsolatot írjunk le, amely csak egyetlen rácspont paramétereitől függ.

Hogy a fenti nehézségeket elkerüljük, az alábbi trükkhöz folyamodunk. Az eredeti U_0 időlépést felbontjuk N darab egyenlő időtartalmú részlépésre. Ezt úgy érjük el, hogy az eredeti bolyongásról N darab másolatot, "klónt" készítünk. Ez megfelel

annak, hogy a belső szabadsági fokok számát N -szeresére növeljük. Ezek után a bolyongó állapota a következő általános alakba írható:

$$|\psi\rangle = \sum_x \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \sum_{j=1}^N \Psi(x, \sigma, j) |x, \sigma, j\rangle \quad (5.3)$$

ahol az újonnan bevezetett j index a különböző klónokat indexeli. Az új, N klónból álló rendszer egy időlépésének operátorát a következőképpen definiáljuk:

$$U = SRD \quad (5.4)$$

ahol az egyes szimbólumok jelentése:

$$S = \bigoplus_{j=1}^N S_j \quad (5.5a)$$

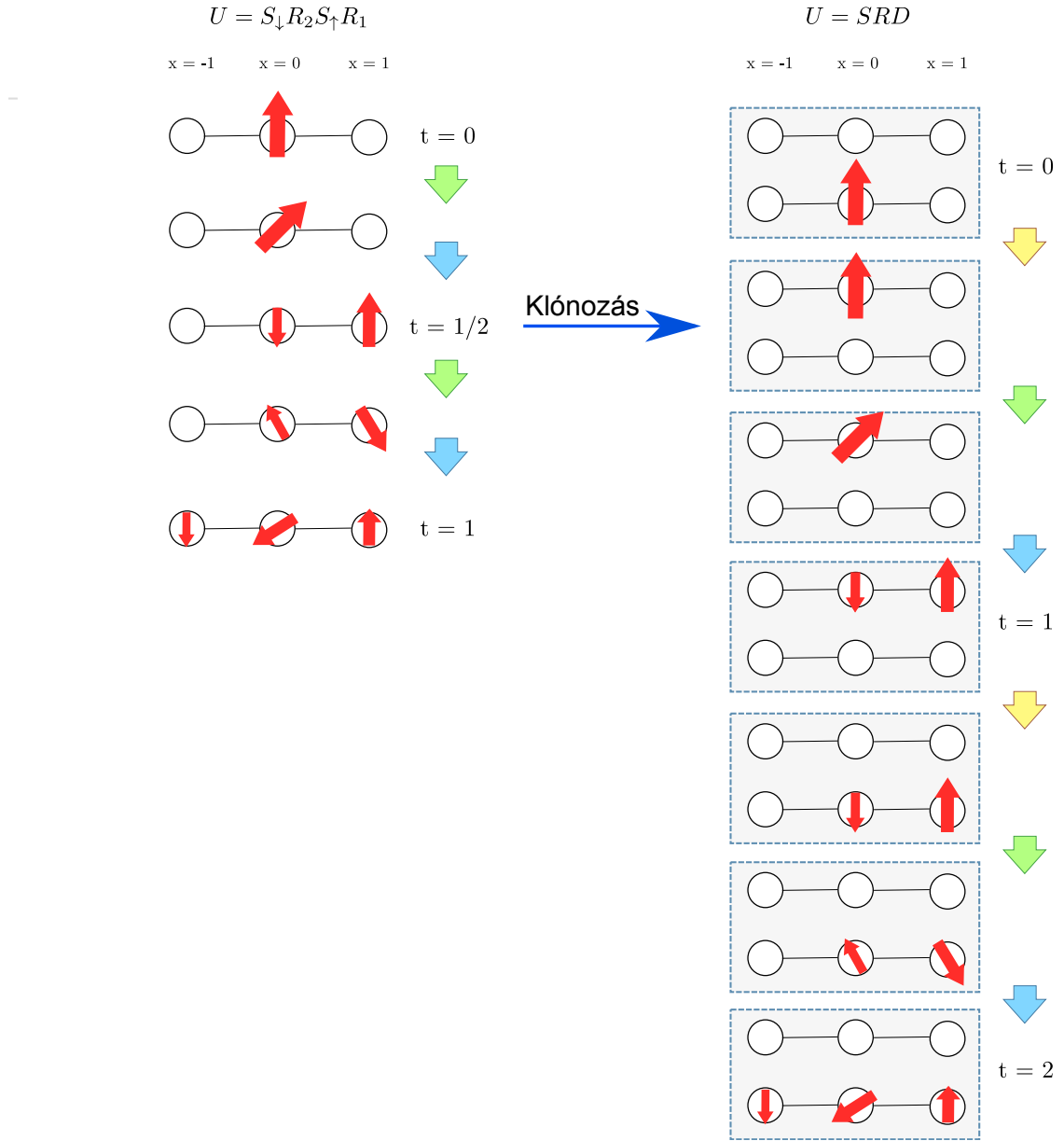
$$R = \bigoplus_{j=1}^N R_j \quad (5.5b)$$

$$D = \sum_x \sum_{\sigma} \sum_{j=1}^N |x, \sigma, j \pmod{N} + 1\rangle \langle x, \sigma, j| \quad (5.5c)$$

$$(5.5d)$$

Tehát a j . klónon az eredeti U_0 operátor j . részlépése működik, a D operátor pedig egy klónnal lefelé léptet (periodikusan, az N -ről az 1.-re). A definícióból következik, hogy ha az N . klónról indítjuk a bolyongót, akkor k időlépés után az állapota meg fog felelni a klónozatlen rendszer állapotának k/N lépés után, (a split step bolyongás esetére ezt mutatja a 8 ábra) ha pedig a j . klónról indulunk akkor az időfejlődés annak felel meg, mint ha az eredeti bolyongást egy olyan timeframe-ben íránk fel, ahol a lépés az $S_{j+1}R_{j+1}$ operátorral kezdődik. Mivel az új időlépést N -szer kell ismételni ahhoz, hogy az eredeti dinamikát visszacapjunk, ezért a két rendszer sajátenergiái között az alábbi összefüggés áll fent: $E_0 = NE_{klón}$.

A klónozási eljárást úgy definiáltuk, hogy az új rendszerben a bolyongó helykoordinátája minden lépésben pontosan egy rácsponttal változik meg. Ennek köszönhetően most már lehetőségünk nyílik arra, hogy egyértelmű kapcsolatot teremtsünk egy adott energiájú stacionárius állapot szomszédos rácspontokhoz tartozó komponensei között. Ennek érdekében a belső szabadsági fokok terén térjünk át arra a bázisra,



8. ábra. A *split step* bolyongás klónozása. A második klónról indulva a klónozott rendszerben bolyongó részecske állapota t idő után megfelel az eredeti rendszer állapotának $t/2$ idő után.

amelyen a S operátor alakja a következő: $S = \text{diag}(e^{-ik}, \dots, e^{-ik}, e^{ik}, \dots, e^{ik}, 1, \dots, 1)$. Ebben a bázisban az adott rácsponthoz tartozó hullámfüggvény három egymást követő "szektorra" bontható: $n^{\uparrow}$ darab olyan komponense van, amelyeket az S operátor jobbra léptet, $n^{\downarrow}$ darab komponens, amelyeket balra léptet és $n^0 = n^{\uparrow} + n^{\downarrow}$ darab olyan amelyek a léptetéskor helyben maradnak. Az egyes szektorokat a megfelelő

indexszel jelezve az adott pontbeli hullámfüggvény a következőképpen írható:

$$\Psi_x = \begin{pmatrix} \Psi_x^\uparrow \\ \Psi_x^\downarrow \\ \Psi_x^0 \end{pmatrix} \quad (5.6)$$

Ennek megfelelően az időlépésnek az eltolást megelőző részét, az RD operátort is felbonthatjuk:

$$A \equiv RD = \begin{pmatrix} A^{\uparrow\uparrow} & A^{\uparrow\downarrow} & A^{\uparrow 0} \\ A^{\downarrow\uparrow} & A^{\downarrow\downarrow} & A^{\downarrow 0} \\ A^{0\uparrow} & A^{0\downarrow} & A^{00} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A^\uparrow \\ A^\downarrow \\ A^0 \end{pmatrix} \quad (5.7)$$

Ahol $A^{\sigma\rho}$ az operátornak a ρ szektorból a σ szektorba képező része, egy $n^\sigma \times n^\rho$ méretű mátrix és $A^\sigma \equiv (A^{\sigma\uparrow}, A^{\sigma\downarrow}, A^{\sigma 0})$; $\rho, \sigma \in \{\uparrow, \downarrow, 0\}$. Ezekkel a jelölésekkel a stacionárius állapotokra vonatkozó feltétel:

$$\begin{pmatrix} A_{x-1}^\uparrow \Psi_{x-1}^\uparrow \\ A_{x+1}^\downarrow \Psi_{x+1}^\downarrow \\ A_x^0 \Psi_x^0 \end{pmatrix} = e^{-iE} \begin{pmatrix} \Psi_x^\uparrow \\ \Psi_x^\downarrow \\ \Psi_x^0 \end{pmatrix} \quad (5.8)$$

Itt és a fejezet további részében ε a klónozott rendszerben vett energiát jelöli. A harmadik egyenletből Ψ_x^0 kifejezhető:

$$\Psi_x^0 = G_x(\varepsilon)(A_x^{0\uparrow}\Psi_x^\uparrow + A_x^{0\downarrow}\Psi_x^\downarrow) \quad (5.9)$$

ahol bevezettük az alábbi jelölést:

$$G_x(\varepsilon) \equiv (e^{-i\varepsilon} \mathbb{1}_{n^0 \times n^0} - A_x^{00})^{-1} \quad (5.10)$$

Ψ_x^0 fenti kifejezését visszaírva a 5.8 egyenletbe, az az alábbi összefüggésre egyszerűsödik:

$$\begin{pmatrix} \psi_{x-1}^\downarrow \\ \psi_{x+1}^\uparrow \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{r} & \mathbf{t}' \\ \mathbf{t} & \mathbf{r}' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_x^\uparrow \\ \psi_x^\downarrow \end{pmatrix} \quad (5.11)$$

ahol bevezettük a következő jelöléseket:

$$\mathbf{r}_x = e^{i\varepsilon} \left(A_x^{\downarrow\uparrow} + A_x^{\downarrow 0} G_x(\varepsilon) A_x^{0\uparrow} \right); \quad (5.12a)$$

$$\mathbf{t}_x = e^{i\varepsilon} \left(A_x^{\uparrow\uparrow} + A_x^{\uparrow 0} G_x(\varepsilon) A_x^{0\uparrow} \right); \quad (5.12b)$$

$$\mathbf{t}'_x = e^{i\varepsilon} \left(A_x^{\downarrow\downarrow} + A_x^{\downarrow 0} G_x(\varepsilon) A_x^{0\downarrow} \right); \quad (5.12c)$$

$$\mathbf{r}'_x = e^{i\varepsilon} \left(A_x^{\uparrow\downarrow} + A_x^{\uparrow 0} G_x(\varepsilon) A_x^{0\downarrow} \right). \quad (5.12d)$$

A 5.11 egyenlet a szórásmátrix definíciójára emlékeztet, azzal a különbséggel, hogy bejövő és kimenő síkhullámok szerepét a hullámfüggvénynek azon komponensei játsszák, amelyek egy adott lépésben az x . rácspontba beléptek, illetve onnan kiléptek. Ennek megfelelően a 5.11 egyenletben megjelenő mátrixot az x . rácspont *valóstérbeli szórásmátrixának*, a 5.12 által definiált komponenseit pedig *valós térbeli reflexiós és transzmissziós amplitudóknak* nevezzük. Vegyük észre, hogy a jobbra, illetve balra haladó módusok száma $n^\uparrow$ és $n^\downarrow$, így minél több eltolást tartalmazott az eredeti időlépés, annál nagyobbak lesznek a valós térbeli reflexiós és transzmissziós mátrixok.

Köszönhetően annak, hogy a szórásmátrix szokásos definíciójával analóg módon vezettük be, a valós térbeli szórásmátrixra is vonatkozik a szórásmátrixokra levezethető kombinációs szabály (lásd [17]). Ennek értelmében a teljes L rácspontból álló rendszer valós térbeli reflexiós és transzmissziós amplitúdói megkaphatók az első $L - 1$ pont szórásmátrixának és az L . pont szórásmátrixának kombinálásával az alábbi módon:

$$B = [1 - \mathbf{r}_L \mathbf{r}'_{1,L-1}]^{-1}; \quad (5.13a)$$

$$\mathbf{r}_{1,L} = \mathbf{r}_{1,L-1} + \mathbf{t}'_{1,L-1} B \mathbf{r}_L \mathbf{t}_{1,L-1}; \quad (5.13b)$$

$$\mathbf{t}_{1,L} = \mathbf{t}_L \mathbf{t}_{1,L-1} + \mathbf{t}_L \mathbf{r}'_{1,L-1} B \mathbf{r}_L \mathbf{t}_{1,L-1}; \quad (5.13c)$$

$$\mathbf{r}'_{1,L} = \mathbf{r}'_L + \mathbf{t}_L \mathbf{r}'_{1,L-1} B \mathbf{t}'_L; \quad (5.13d)$$

$$\mathbf{t}'_{1,L} = \mathbf{t}'_{1,L-1} B \mathbf{t}'_L. \quad (5.13e)$$

Használva ezeket a kombinációs szabályokat, megkaphatjuk egy tetszőleges véges méretű szórási régió valós térbeli szórásmátrixát. Ebből már könnyen visszakaphatjuk a be- és kimenő síkhullámokat összekapcsoló szórásmátrixot a következőképpen.

Vegyünk egy balról bejövő síkhullámot. Ekkor a reflexiós és transzmissziós mátrixokra az alábbi egyenleteknek kell teljesülniük:

$$\psi_0^\downarrow = r(\varepsilon)\psi_0^\uparrow = e^{-i\varepsilon}r(\varepsilon)\psi_1^\uparrow \quad (5.14a)$$

$$\psi_{L+1}^\uparrow = t(\varepsilon)\psi_0^\uparrow = e^{-i\varepsilon}t(\varepsilon)\psi_1^\uparrow \quad (5.14b)$$

Összevetve a valós térbeli szórásmátrix definíciójával:

$$\mathbf{r}_{1,L}\psi_1^\uparrow = \psi_0^\downarrow; \quad \Rightarrow \quad r(\varepsilon) = e^{i\varepsilon}\mathbf{r}_{1,L}; \quad (5.15a)$$

$$\mathbf{t}_{1,L}\psi_1^\uparrow = \psi_{L+1}^\uparrow; \quad \Rightarrow \quad t(\varepsilon) = e^{i\varepsilon}\mathbf{t}_{1,L}. \quad (5.15b)$$

Ezekhez hasonló képletek érvényesek $\mathbf{r}'$ -re és $\mathbf{t}'$ -re is. Tehát a 5.11 egyenletben definiált valós térbeli szórásmátrixból, felhasználva a 5.13 kombinációs szabályokat és a 5.15a összefüggést, visszatérve az eredeti klónozatlan rendszer E energiájára, egy tetszőleges véges méretű rendszer esetén megkaphatjuk az $r(E = 2\varepsilon)$ reflexiós amplitudókat bármely energián, beleértve a 0 és π energiákat is. Ezekből a 4.5 képletek segítségével meghatározhatjuk, hogy az adott rendszerhez milyen topologikus invariánsok tartoznak.

A valós térbeli szórásmátrixok módszere tehát egy hatékony, numerikusan is jól implementálható módszert ad a kezünkbe, amelynek segítségével meghatározhatjuk a rendszer reflexiós amplitudóit és így a topologikus invariánsokat. A következő fejezetben látni fogjuk, hogy hogyan tudunk a valós térbeli szórásmátrixra alapozva olyan képleteket levezetni, amelyből a split step bolyongás esetére egzaktul kiszámolhatóak a topologikus invariánsok várható értékei.

5.2. Alkalmazás a split step bolyongásra; additív paraméterek

Az előző fejezetben ismertetett valós térbeli szórásmátrixok módszerét a split step bolyongásra alkalmazva az alábbi képletet kapjuk a bolyongás egy adott, θ_1 és θ_2 szögekkel jellemzett rácspontjának valós térbeli szórásmátrixra abban az esetben amikor a rendszer stacionárius állapotának energiája E :

$$\begin{pmatrix} \mathbf{r} & \mathbf{t}' \\ \mathbf{t} & \mathbf{r}' \end{pmatrix} = \frac{e^{iE}}{1 + e^{iE} \sin \theta_1 \sin \theta_2} \begin{pmatrix} e^{iE/2} \sin \theta_1 + e^{-iE/2} \sin \theta_2 & \cos \theta_1 \cos \theta_2 \\ \cos \theta_1 \cos \theta_2 & -e^{-iE/2} \sin \theta_1 - e^{iE/2} \sin \theta_2 \end{pmatrix} \quad (5.16)$$

Ez az $S(E)$ valós térbeli szórásmátrix, amely definíció szerint az alábbi módon teremt kapcsolatot a stacionárius állapot hullámfüggvényének komponensei között:

$$\begin{pmatrix} \Psi_{x-1}^\downarrow \\ \Psi_{x+1}^\uparrow \end{pmatrix} = S \begin{pmatrix} \Psi_x^\uparrow \\ \Psi_x^\downarrow \end{pmatrix} \quad (5.17)$$

Mint láttuk ez megfelel annak, hogy a szórásmátrix a bejövő és a kimenő síkhullámokat kapcsolja össze egymással. Ezzel ekvivalens leírást ad az ún. *transzfermátrix*, amely a jobboldali vezetőbenben terjedő síkhullámokat köti össze a baloldali vezetőben terjedőekkel.[17] Ezzel összhangban definiálhatjuk a valós térbeli M transzfermátrixot az alábbi összefüggéssel:

$$\begin{pmatrix} \Psi_{x+1}^\uparrow \\ \Psi_x^\downarrow \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} \Psi_x^\uparrow \\ \Psi_{x-1}^\downarrow \end{pmatrix} \quad (5.18)$$

A transzfermátrix nagy előnye a szórásmátrixszal szemben, hogy, mint az a definícióból könnyen látható, a teljes rendszer transzfermátrixa egyszerűen, az egyes rácspontok transzfermátrixainak szorzataként adódik. Amennyiben ezt sikerül kiszámítanunk, belőle visszakaphatjuk a transzmisszió és a reflexió értékeit (ezzel szemben szomszédos részrendszerek szórásmátrixaira bonyolultabb kombinációs szabály vonatkozik, mint azt a 5.13 képletekben láttuk).

A szórásmátrix korábbi 5.16 kifejezéséből kiindulva kifejezhető a split step bolyongás transzfermátrixa, amelyre az alábbi kifejezés adódik:

$$M(E) = \frac{1}{\cos \theta_1 \cos \theta_2} \begin{pmatrix} e^{iE} + \sin \theta_1 \sin \theta_2 & -e^{-iE/2} \sin \theta_1 - e^{iE/2} \sin \theta_2 \\ -e^{iE/2} \sin \theta_1 - e^{-iE/2} \sin \theta_2 & -e^{-iE} + \sin \theta_1 \sin \theta_2 \end{pmatrix} \quad (5.19)$$

A topologikus invariánsokat az $E = 0$ illetve $E = \pi$ energiákhoz tartozó szórási amplitudók adják. Ezeken az energiákon a királis szimmetriának köszönhetően a transzfermátrix alakja nagyban leegyszerűsödik:

$$M(0) = e^{\lambda_0 \sigma_x} \quad (5.20a)$$

$$M(\pi) = e^{-\lambda_\pi \sigma_y} \quad (5.20b)$$

Ez transzfermátrix ilyen jellegű paraméterezése használatos topologikus szigetelőknél[11] és más, királis szimmetriával rendelkező rendszerek esetén is, lásd [7],[19]. A λ_0 és λ_π paramétereket a továbbiakban kanonikus vagy additív paramétereknek nevezzük (az irodalomban időnként használatos rájuk a Ljapunov-exponens elnevezés is[11]). Ezek az alábbi módon függenek a rácsponthoz tartozó forgatási szögektől:

$$\tanh \lambda_0 = -\frac{\sin \theta_1 + \sin \theta_2}{1 + \sin \theta_1 \sin \theta_2} \rightarrow \lambda_0(\theta_1, \theta_2) = \frac{1}{2} \log \frac{(1 - \sin \theta_1)(1 - \sin \theta_2)}{(1 + \sin \theta_1)(1 + \sin \theta_2)} \quad (5.21a)$$

$$\tanh \lambda_\pi = -\frac{\sin \theta_1 - \sin \theta_2}{\sin \theta_1 \sin \theta_2 - 1} \rightarrow \lambda_\pi(\theta_1, \theta_2) = \frac{1}{2} \log \frac{(\sin \theta_1 - 1)(1 + \sin \theta_2)}{(1 + \sin \theta_1)(\sin \theta_2 - 1)} \quad (5.21b)$$

Mint az a 5.20 egyenletekből világosan látszik, a $\lambda_{0,\pi}$ paraméterek additívak a transzfermátrixok szorzására nézve. Ez azt jelenti, hogy a teljes rendszer valós térbeli transzfermátrixa ugyanilyen alakba írható a $\lambda_{0,\pi} \rightarrow \lambda_{0,\pi}^{tot} = \sum_x \lambda_{0,\pi}^{(x)}$ helyettesítéssel, ahol $\lambda_{0,\pi}^{(x)}$ az x . rácspont paramétereire tartozó $\lambda_{0,\pi}$ értéket jelöli. Visszatérve a szórás mátrixra, azt kapjuk, hogy a reflexiók illetve transzmissziók amplitúdók a következőképpen függenek λ^{tot} -tól (a következőekben bevezetjük az E mindexet, amely a 0 és π értékeket veheti fel):

$$r(E) = -\tanh \lambda_E^{tot} \quad (5.22a)$$

$$t(E) = 1/\cosh \lambda_E^{tot} \quad (E = 0, \pi) \quad (5.22b)$$

Mint látható, megfelelően nagy rendszer esetén az $r(E) = +1$ és $r(E) = -1$ topologikus fázisok az egy rácspontra jutó átlagos additív paraméter, $\langle \lambda_E \rangle = \lambda_E^{tot}/L$ pozitív, illetve negatív értékeinek felelnek meg:[11]:

$$\nu_E = -\text{sgn}(\lambda_E)/2 \quad (5.23)$$

A fázishatárt a $\langle \lambda_E \rangle = 0$ feltétel teljesülése jelzi. A fázishatáron a várakozásaink-

nak megfelelően a transzmisszió értéke 1-hez tart, ez a kiterjedt hullámfüggvények megjelenését jelzi, ami szükséges feltétele annak, hogy az élállapotok száma megváltozhasson (később konstruktívan is be fogjuk látni, hogy a λ_E^{tot} paraméter előjele meghatározza az E energiás élállapotok számát). A fázishatártól távol a transzmisszió valószínűsége a következőképpen írható:

$$T(E) = |t(E)|^2 = \frac{1}{\cosh^2 \lambda_E^{tot}} \approx 4e^{-2L/\xi} \quad (5.24)$$

Ahol bevezettük a $\xi(E) = 1/\langle |\lambda_E| \rangle$ *lokalizációs hosszt*. Ez tetszőleges energiára értelmezhető a $\xi(E) = -2L/\ln(T(E)/4)$ definícióval. A lokalizációs hossz jellemzi a rendezetlen rendszerben kialakuló sajátállapotok átlagos kiterjedését. A topologikusan szigetelő fázisokban tehát a transzmisszió exponenciálisan csökken minden energián, ami annak a jele, hogy az összes sajátállapot valamilyen véges tartományra lokalizált. A fázishatáron viszont valamelyik élállapothoz tartozó energián a lokalizációs hossz rosszul definiálttá válik, hiszen ekkor $1/\langle \lambda_E \rangle$ divergál. Ez azt jelzi, hogy ezen az energián az egész rendszerre kiterjedő delokalizált állapotok vannak jelen. Ahogy már korábban is láttuk, ez szükséges ahhoz, hogy az élállapotok száma megváltozhasson. Így tehát a topologikus fázisátalakulást egy delokalizációs átmenet kíséri, amely csak adott energiákon ($E = 0$ vagy $E = \pi$) jelentkezik. Ez összhangban van a korábbi gondolatmenetünkkel, amely szerint az élállapotok száma akkor tud megváltozni, ha a közöttük lévő térben delokalizált állapotok vannak jelen, amelyek lehetővé teszik azt, hogy az egymástól távol lévő élállapotok egymással hibridizálódjanak. A Fermi-energián lévő delokalizált állapotok megjelennek más, királis szimmetriával rendelkező rendezetlen rendszerek esetén is, lásd a [29],[7] és [19] cikkeket.

A 0 és π energiás transzfermátrixhoz tartozó kanonikus paraméterek átlagos $\langle \lambda_E \rangle$ értékei tehát a 5.23 egyenleten keresztül lehetővé teszik, hogy a $\theta_{1,2}(x)$ paraméterek tetszőleges térbeli eloszlása esetén meghatározzuk, hogy a vizsgált bolyongás melyik topologikus fázishoz tartozik. A későbbiekben bemutatjuk, hogyan használható fel ez az állítás különböző rendezetlen rendszerek fázistérképének felrajzolásához.

5.3. A homogén split step bolyongás szórásmátrixa

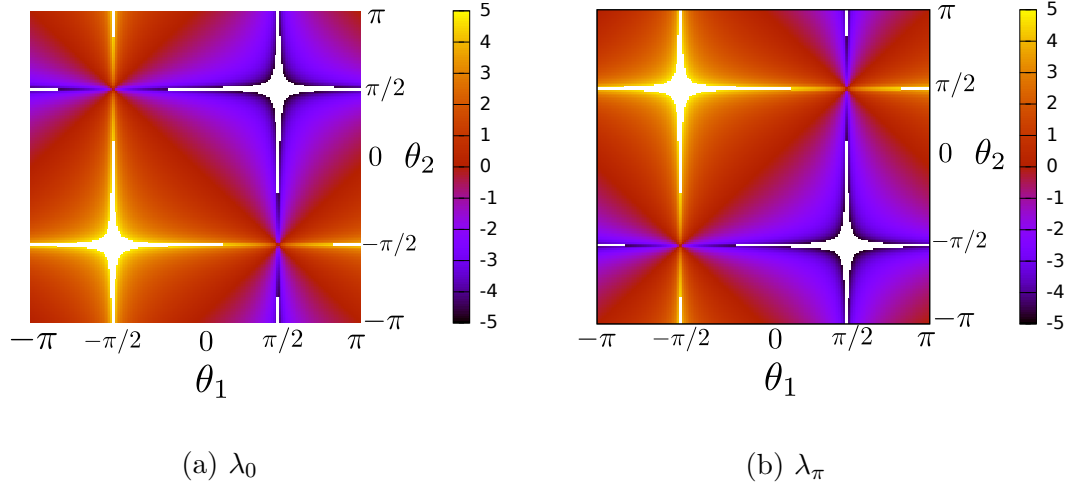
Mielőtt rátérnénk a rendezetlen rendszerek tárgyalására, ellenőrizzük, hogy a fent vázolt megközelítés homogén rendszerekre visszaadja-e a 6 ábrán bemutatott fázisdi-

agramot. Homogén rendszer esetén az 5.21 képlettel definiált függvények megadják a λ_E paramétereknek az egy rácspontra jutó átlagos értékét: $\langle \lambda_E \rangle = \lambda_E(\theta_1, \theta_2)$. Ezen függvények értékei jellemzik a paramétertér pontjait és az előjelük meghatározza a topologikus fázisokat. A fázishatárookra vonatkozó feltétel: $\lambda_E = 0$. Az $E = 0$ esetben ez akkor teljesül, ha $\theta_2 = -\theta_1$ vagy $\theta_2 = \theta_1 - \pi$, $E = \pi$ esetén pedig akkor, ha $\theta_2 = \theta_1$ vagy $\theta_2 = \pi - \theta_1$. Ezek azokkal a vonalakkal a paramétertérben ahol a gap záródik az adott E energiánál és így a megfelelő topologikus invariáns változhat. Ahhoz, hogy a fázistérképet visszkapjuk a 5.21 képletekből, még ellenőriznünk kell, hogy az egyes tartományokban a megfelelő előjelet adják-e a reflexió értékeire. Ezt legegyszerűbb úgy ellenőrizni, ha azt számítjuk ki, hogy hová tart λ_0 és λ_π értéke, miközben a paramétertérben tartunk valamelyik tartomány középpontjához. Mint a 5.21 képletekből leolvasható, ekkor a függvények divergálnak (ez a tökéletes reflexió jele). A topologikus fázisok beazonosítása szempontjából a lényeges kérdés a reflexiós amplitudó előjele, vagyis az, hogy a megfelelő λ paraméter a pozitív vagy a negatív végtelenhez tart-e. Ezt foglalja össze a 2 táblázat. A táblázatban szereplő eredményeket összehasonlítva a 5.22a egyenlettel látható, hogy valóban a 6 ábrán látható fázistérképet kapjuk vissza. A 5.21 képletben definiált $\lambda_E(\theta_1, \theta_2)$ függvények láthatóak a 9 ábrán.

	$\theta_1 = \pi/2$	$\theta_1 = -\pi/2$
λ_0	$-\infty$	$+\infty$
λ_π	$-\infty$	$+\infty$
	$\theta_2 = \pi/2$	$\theta_2 = -\pi/2$
λ_0	$-\infty$	$+\infty$
λ_π	$+\infty$	$-\infty$

2. táblázat. A λ_0 és λ_π paraméterek határértékei abban az esetben amikor θ_1 és θ_2 valamelyike $\pi/2$ -höz vagy $-\pi/2$ -höz tart

A 5.21 függvények tehát teljes leírását adják a kvantumos bolyongás topologikus fázisainak. Belőlünk kiszámíthatjuk a topologikus invariánsokat (reflexiós amplitúdókat), amelyek végtelen méretű homogén rendszer esetén megegyeznek a tömbi csavarodási számokból számított értékekkel. Véges méretű homogén rendszer esetén a topologikus invariánsok nem ugrásszerűen változnak, hanem folytonosan mennek át a fázishatáron, a λ_E paraméterek pedig a 5.22a képletben keresztül megadják ennek az átmenetnek a pontos alakját. Ezen túlmenően, a rendezetlen kvantum



9. ábra. A λ_0 és λ_π kanonikus paraméterek a θ_1 , θ_2 szögek függvényében, a 5.21 egyenletek alapján. Az ábrákon a fehér vonalak azokat a helyeket jelölik, ahol $|\lambda_E| > 5$. Összevetve a 6 ábrával, látható, hogy az exponensek előjelei megadják a topologikus invariánsokat a 5.23 összefüggésnek megfelelően.

bolyongás esetén nem csupán azt határozzák meg, hogy az egyes rácspontok melyik topologikus fázishoz tartoznak, hanem azt is, hogy mekkora járulékot adnak a teljes rendszer reflexiós amplitudójához. Ilyen módon a λ_E paraméterek olyan súlyfüggvényekként szolgálnak, amelyek segítségével a rendezetlen rendszer paramétereinek eloszlásából kiszámítható a teljes rendszert jellemző topologikus invariáns. Ezt fogjuk kihasználni a következő fejezetben.

6. Rendezetlen split step bolyongás topologikus invariánsai

A dolgozat további részében a rendezetlen split step bolyongást vizsgáljuk, vagyis olyan rendszereket, ahol a θ_1 és θ_2 paramétereket minden egyes rácspontban valamilyen véletlen eloszlás szerint választjuk. Feltesszük, hogy ez az eloszlás minden pontban ugyanaz és azt, hogy a rendezetlenség korrelálatlan. A rendezetlenséget tehát egy, a paramétertérben adott $\mu(\theta_1, \theta_2)$ valószínűségi mértékkel jellemezhetjük. Az előző fejezetben bevezetett valóstérbeli szórásmátrixokra, és azok additív paramétereire (5.21 egyenletek) alapozva először megvizsgáljuk az általános esetet, majd

két konkrét rendezetlen modellt. Belátjuk, hogy az általunk bevezetett topologikus invariánsokra teljesül a tömb-él korrespondencia, végül pedig röviden kitérünk a 4.1 fejezetben említett másik útra is, amellyel a rendezetlen rendszer topologikus invariánsai szintén meghatározhatóak.

6.1. Általános rendezetlen eset

Vizsgáljuk először azt az esetet, amikor a rendezetlenség valamilyen tetszőleges $\mu(\theta_1, \theta_2)$ valószínűségi mértékkel adott. A λ_E paraméterek additivitása miatt azt várjuk, hogy a minta méretének növelésével annak szórási jellemzői egyre jobban megközelítik az elméleti várható értéket. Ebből kiindulva nézzük azt a határesetet, amikor a rendszer méretével végtelenhez tartunk. Ekkor λ_E -nek egy rácspontra jutó átlagos értéke:

$$\langle \lambda_E \rangle_{L \rightarrow \infty} = \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{L} \sum_x \lambda_E^{(x)} \quad (6.1)$$

A fenti kifejezés formálisan egy időátlagnak tekinthető[18], ahol az idő szerepét a rendszer L hossza játssza (ez a megközelítés analóg azzal a módszerrel, amelyben a transzfermátrix sajátértékeinek "bolyongását" szokás vizsgálni a rendszerméter valamilyen kis δL megváltozásának hatására, lásd a [17] könyvet illetve a [7] cikket). Birkhoff ergodikus tételének értelmében ezt az időátlagot átírhatjuk a paramétertérre vett sokaságátlagra:

$$\langle \lambda_E \rangle_{L \rightarrow \infty} = \int \int d\mu(\theta_1, \theta_2) \lambda_E(\theta_1, \theta_2) \quad (6.2)$$

A 6.2 egyenlet a λ_E függvények 5.21 definíciójával összevetve tartalmazza a dolgozat fő eredményét. A fenti integrált kiszámítva annak előjele tetszőleges rendezetlenség esetén meghatározza a topologikus invariáns várható értékét (kihasználva azt, hogy végtelen nagy rendszer esetén $\tanh L \langle \lambda_E \rangle$ lényegében egy signum függvénynek felel meg).

6.2. Élállapotok megkonstruálása

Korábban láttuk, hogy a kvantumos bolyongás reflexiós amplitudója 0 illetve π energián egy 2-es szorzó erejéig megfelel az adott energiájú élállapotok számát meghatározó topologikus invariáns értékének. Most a 5.20 egyenleteket kihasználva exp-

liciten is megmutatjuk, hogy a λ_E paraméter előjele meghatározza, hogy létezhetnek-e E energiás állapotok, illetve az állapotok alakjára is a várt eredményt adja.

Tekintsünk egy határfelületet, amely egy homogén és egy rendezetlen bolyongást választ el egymástól: legyen $x \leq 0$ esetén $\theta_1(x) = \theta_1^L$ és $\theta_2(x) = \theta_2^L$ állandók, míg $x \geq 1$ esetén $\theta_{1,2}$ -t valamilyen véletlen eloszlásból vesszük. Olyan stacionárius megoldásokat akarunk konstruálni, amelyek az $x = 0$ határfelület közelében centráltak és mindkét irányban lecsengenek a végtelenben.

A valós térbeli transzfermátrix definíció szerint a stacionárius megoldás hullámfüggvényének komponenseit kapcsolja össze az alábbi módon:

$$\begin{pmatrix} \Psi_{x+1}^\uparrow \\ \Psi_x^\downarrow \end{pmatrix} = M(E) \begin{pmatrix} \Psi_x^\uparrow \\ \Psi_{x-1}^\downarrow \end{pmatrix} \quad (6.3)$$

Vizsgáljuk először az $E = 0$ esetet. Ekkor mint láttuk a transzfermátrix alakja: $M(0) = e^{\lambda_0 \sigma_x}$. Ebből látható, hogy ha a $(\Psi_1^\uparrow, \Psi_0^\downarrow)$ komponenseket a σ_x Pauli-mátrix valamelyik sajátvektorának választjuk, akkor rácson eggyel jobbra lépve a komponensek csak egy $e^{\pm \lambda_0^{(x)}}$ számmal szorozódnak, attól függen hogy a $+1$ vagy a -1 sajátértékhez tartozó sajátvektort választottuk. Ha a rácson balra lépünk akkor az $M(0)$ mátrix inverze lépteti a komponenseket és így a kapott szorzó $e^{\mp \lambda_0^{(x)}}$. Mivel a két irányban az exponens előjele ellentétes, így csak akkor kaphatunk mindkét irányban lecsengő megoldást, ha $\langle \lambda_0^R \rangle = \sum_{x=1}^{\infty} \lambda_0^{(x)} / L$ előjele különbözik $\langle \lambda_0^L \rangle = \lambda_0(\theta_1^L, \theta_2^L)$ előjelétől. Ha az előbbi pozitív és az utóbbi negatív akkor a $(\Psi_1^\uparrow, \Psi_0^\downarrow) = (1, -1)$, fordított esetben pedig a $(\Psi_1^\uparrow, \Psi_0^\downarrow) = (1, 1)$ választás esetén kapunk olyan megoldást, amely mindkét végtelenben lecseng.

Ugyanezt a gondolatmenetet megismételhetjük az $E = \pi$ energiájú állapotokra vonatkozóan, kihasználva hogy $M(\pi) = e^{-\lambda_\pi \sigma_y}$. Ekkor azt kapjuk, hogy ha $\langle \lambda_\pi^R \rangle > 0$ és $\langle \lambda_\pi^L \rangle < 0$ akkor $(\Psi_1^\uparrow, \Psi_0^\downarrow) = (1, i)$ a jó választás, ellenkező esetben pedig $(\Psi_1^\uparrow, \Psi_0^\downarrow) = (1, -i)$.

Összehasonlítva ezeket az eredményeket a 3.3 alfejezetben mutatott állapotokkal, figyelembe véve a klónozási eljárás részleteit, azt kapjuk hogy a fenti gondolatmenet az állapotok alakját is helyesen adja meg.

6.3. Bináris rendezetlenség

Annak érdekében, hogy némi intuíciót szerezzünk a rendezetlenség hatásairól, érdemes megvizsgálnunk egy leegyszerűsített modellt, amelyet *bináris rendezetlenség*nek fogunk nevezni. Ebben a modellben a (θ_1, θ_2) paraméterek csak két lehetséges értéket vehetnek fel, az egyiket q a másikat $1 - q$ valószínűséggel (q -t a továbbiakban keverési aránynak fogjuk nevezni):

$$\mu(\theta_1, \theta_2) = q \delta(\theta_1 - \theta_1^A) \delta(\theta_2 - \theta_2^A) + (1 - q) \delta(\theta_1 - \theta_1^B) \delta(\theta_2 - \theta_2^B) \quad (6.4)$$

A paramétertér A pontját a következőképpen rögzítjük:

$$\theta_1^A = 0.625\pi \quad (6.5a)$$

$$\theta_2^A = -0.125\pi \quad (6.5b)$$

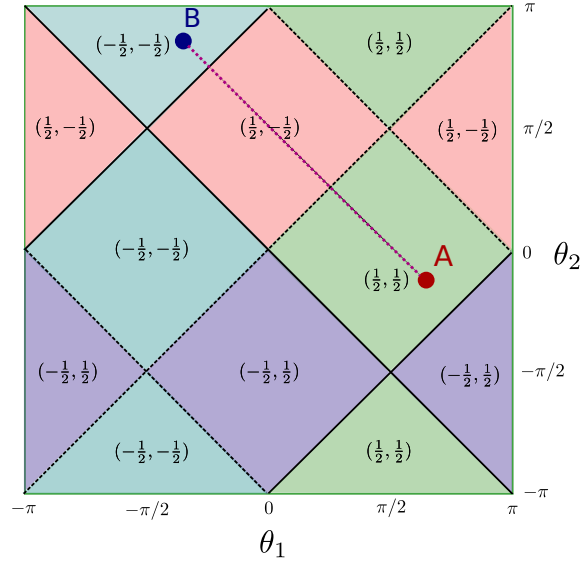
A B pontot pedig úgy választjuk, hogy az A ponton átmenő, a fázishatárokkal párhuzamos egyenesre essen:

$$\theta_1^B = \theta_1^A - m \pi \quad (6.6a)$$

$$\theta_2^B = \theta_2^A + m \pi \quad (6.6b)$$

ahol bevezettük az m paramétert, amely az A és a B pontok paramétertérbeli távolságát méri. m a $[0, 1]$ intervallumon vehet fel értékeket, $m = 0$ annak az esetnek felel meg amikor a két pont egybeesik, $m = 1$ pedig amikor a távolságuk mximális (ne feledjük, hogy mindkét paraméter periodikus 2π szerint). A lehetséges eseteket a 10 ábra mutatja.

A bináris rendezetlen modell előnye, hogy mindössze két paraméter jellemzi: q és m . Célunk az, hogy adott m esetén meghatározzuk azt a kritikus q_{crit} értéket amelynél a rendszer egyik topologikus fázisból átmegy a másikba.



10. ábra. *Bináris rendezetlenség.* A piros illetve kék körök az A és B pontok helyeit jelzik az $m = 1$ esetben, míg a szaggatott vonal B lehetséges értékeit mutatja, miközben m értékével megyünk 0-tól 1-ig.

Jelöljük a rendszerben előforduló kétféle rácspont számát L_A -val illetve L_B -vel. Ezekből λ_E^{tot} kifejezhető:

$$\lambda_E^{tot} = L_A \lambda_E^A + L_B \lambda_E^B \quad (6.7)$$

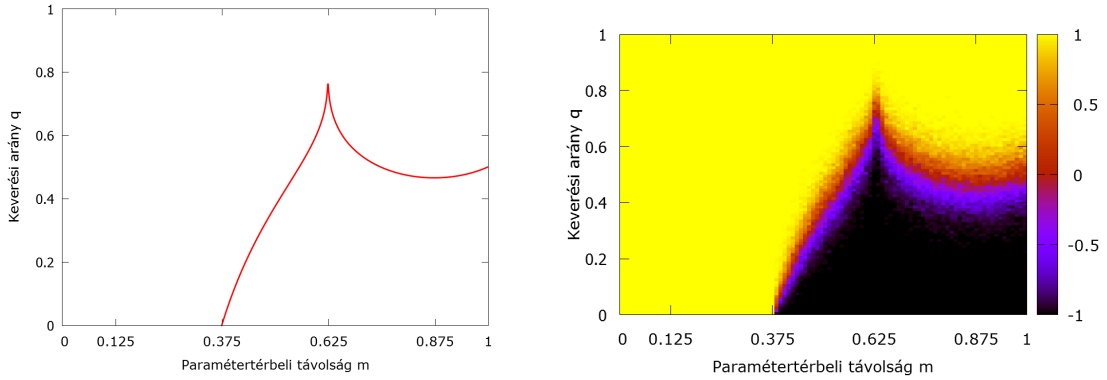
Az egyik topologikus fázisból a másikba való átmenet akkor megy végbe, amikor λ_E^{tot} eléri a 0 értéket és a bolyongás az adott energián vezetőként viselkedik. Tehát a kritikus vonalon:

$$\frac{L_B}{L_A} = -\frac{\lambda^A}{\lambda^B} \quad (6.8)$$

Ebből kifejezhetjük a kritikus q értéket:

$$q_{crit} = \frac{1}{1 + \frac{L_B}{L_A}} = \frac{1}{1 - \frac{\lambda^A}{\lambda^B}} \quad (6.9)$$

Ezt a kritikus vonalat ábrázoltuk a 11 ábrán, összevetve a szórási amplitudóra kapott numerikus eredményekkel.



(a) q_{crit} értéke m függvényében, ($E = \pi$)

(b) Reflexiós amplitudó az $E = \pi$ energián

11. ábra. Fázishatár a bináris rendezetlen bolyongás esetén. Az (a) ábra a 6.4 egyenletben definiált q keverési aránynak a 6.9 egyenlet alapján számított kritikus értékeit mutatja, a (b) ábra pedig a szórásmátrix numerikus számításából adódó reflexiós amplitudókat egy 40 rácspontból álló rendszerre. A numerikus szimulációból kapott $r = 0$ vonal jól egyezik az elméletből számolt kritikus vonal helyével

6.4. Uniform rendezetlenség

Az előbb tárgyalt bináris rendezetlenségnél fizikailag motiváltabb egy olyan modell, amelyben a $\theta_{1,2}$ értékeket valamilyen folytonos eloszlásból választjuk. Ezek közül a legegyszerűbb eset az, amikor a két paramétert egymástól független egyenletes eloszlásokból választjuk. Ekkor a szögek értékei az x helyen:

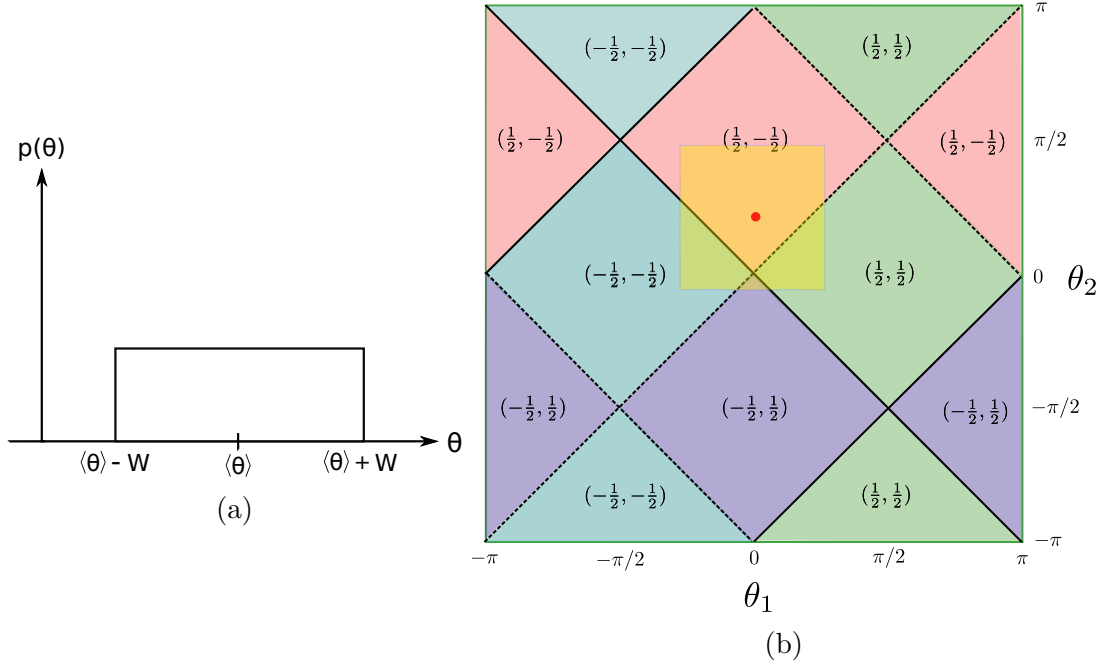
$$\theta_1(x) = \langle \theta_1 \rangle + W_1 \delta\theta_1(x) \quad (6.10a)$$

$$\theta_2(x) = \langle \theta_2 \rangle + W_2 \delta\theta_2(x) \quad (6.10b)$$

ahol $\delta\theta_1(x)$ és $\delta\theta_2(x)$ értékeit egymástól függetlenül húzzuk a $[-1, 1]$ egyenletes eloszlásból. A rendezetlenség erősségét a W_1 és W_2 együtthatók határozzák meg. Az egyszerűség kedvéért tekintsük azt az esetet, amikor $W_1 = W_2 = W$. Ekkor az eloszlást a 12 ábra mutatja. A megfelelő valószínűségi mértéknek megfelelő függvény képlettel kifejezve (a továbbiakban az átlagolást nem jelöljük és az átlagos értékeket egyszerűen θ_1 és θ_2 jelöli):

$$\mu(\theta_1, \theta_2) = \frac{1}{4W^2} (\Theta(\theta_1 - W) - \Theta(\theta_1 + W)) (\Theta(\theta_2 - W) - \Theta(\theta_2 + W)) \quad (6.11)$$

ahol $\Theta(x)$ a Heaviside-féle függvény.



12. ábra. *Uniform rendezetlenség a split step bolyongásban. (a) A szögeket egyenletes eloszlásból választjuk. (b) A sárga terület mutatja a paraméterter azon részét, ahonnan az egyes rácspontok paramétereit választjuk, a $W = W_1 = W_2$ esetben. A piros kör az átlagos értékek helyét mutatja, a sárga négyzet oldalainak hossza pedig $2W$.*

Az uniform rendezetlen modellt négy paraméter írja le: a szögek átlagos értékei, θ_1 és θ_2 , illetve a rendezetlenség erőssége a két paraméter esetén, vagyis W_1 és W_2 . Abban az esetben azonban, amikor valamelyik rendezetlenség eléri a maximális értéket (például $W_1 = \pi$), akkor az adott szöget a teljes $[-\pi, +\pi]$ intervallumról vesszük, így ez az eset az átlagos θ_1 értéktől függetlenül mindig ugyanazt a rendszert írja le. Azt az esetet, amikor $W_1 = W_2 = \pi$, és a paramétereket a teljes paraméterteréből választjuk egyenletes valószínűséggel, *erősen rendezetlen határesetnek* nevezzük.

Felhasználva a 6.11 képletet, a 6.2 integrál az alábbi alakra egyszerűsödik:

$$\langle \lambda_E \rangle_{L \rightarrow \infty} = \int_{\theta_1 - W}^{\theta_1 + W} d\theta'_1 \int_{\theta_2 - W}^{\theta_2 + W} d\theta'_2 \lambda_E(\theta'_1, \theta'_2) \quad (6.12)$$

Az integrál értéke könnyen meghatározható az erősen rendezetlen határesetben. Ekkor például 0 energián:

$$\langle \lambda_0 \rangle_{L \rightarrow \infty} = \int_{-\pi}^{\pi} d\theta [\ln(1 - \sin \theta) - \ln(1 + \sin \theta)] \quad (6.13)$$

Kihasználva, hogy $\int_{-\pi}^{\pi} d\theta \ln(1 - \sin \theta) = \int_{-\pi}^{\pi} d\theta \ln(1 + \sin \theta) = -2\pi \ln 2$ (valójában mindkét integrandus divergál az integrálási tartomány egy-egy pontján, így a megfelelő improprius integrálok összegét vettük) azt kapjuk, hogy az erősen rendezetlen határesetben a kanonikus paraméter $\langle \lambda_0 \rangle_{L \rightarrow \infty}$ várható értéke 0. Ez megfelel a várakozásainknak, hiszen ebben az esetben minden topologikus fázis egyforma súllyal van képviselve. Az erősen rendezetlen határpont tehát a topologikus fázisok határán helyezkedik el. A fázishatár alakjának meghatározásához a 6.12 integrált elvégeztük numerikusan. Ehhez θ_2 értékét rögzítettük $\pi/4$ -en, az integrált pedig különböző θ_1 és W értékek mellett számoltuk ki. Az így kapott $\langle \lambda_0 \rangle_{L \rightarrow \infty}$ átlagokból számított reflexiók illetve transzmissziók amplitúdók értékeit a 13a és 13b ábrák mutatják, összehasonlítva ezeket a valós térbeli szórásmátrix numerikus iterációjával kapott eredményekkel.

6.5. Összehasonlítás a valóstérbeli csavarodási számokkal

Ebben a fejezetben ezidáig a topologikus invariánsoknak a szórásmátrixon keresztül, a 4.5 képlet által megadott definíciójával foglalkoztunk. Ahogy korábban tárgyaltuk, létezik egy másik, a rendezetlen rendszerekre szintén alkalmazható definíciója a topologikus invariánsoknak, a csavarodási számok valós térbe átirított képletén keresztül, amelyet a 4.1 egyenletben adtunk meg. A csavarodási számnak ez a definíciója a [18] cikkből származik. Hasonlóképpen számolható a 2 dimenziós topologikus szigetelőkben fellépő topologikus invariáns, a Chern-szám a nemkommutatív geometria eszközeit felhasználva. [21]

A 4.1 képletet a numerikus implementáció céljából egy véges méretű, periodikus határfeltételekkel ellátott rendszerre akarjuk értelmezni. Az értelmezést megnehezíti, hogy periodikus határfeltételek esetén a helyoperátor szokásos definíciója nem alkalmazható [24], emiatt a képletben szereplő kommutátort is újra kell értelmezünk. Röviden vázoljuk, hogy ez hogyan tehető meg, a [21] cikket követve.

Egy véges sok, N darab rácspontból álló rendszer esetén a kváziimpulzustérbeli felbontást a $\Delta = 2\pi/N$ mennyiség adja meg. Ekkor valamilyen k -től függő $A(k)$

menyiség deriváltját véges differenciákkal kell közelítenünk:

$$\partial_k A(k) \rightarrow \delta_k A(k_n) = \sum_{m=1}^Q c_m [A(k_n + m\Delta) - A(k_n - m\Delta)] \quad (6.14)$$

ahol Q egy $N/2$ -nél kisebb szám. Célunk olyan c_m együtthatókat találni, amelyekkel a fenti kifejezés exponenciálisan pontos közelítése lesz az eredeti deriválnak. Feltesszük, hogy $A(k)$ kifejezhető $A(k) = \sum_n b_n e^{ikn}$ alakban, így elég az e^{ikn} alakú függvényekre megtalálni a megfelelő együtthatókat. Ezekre alkalmazva a 6.14 kifejezést:

$$(\partial_k - \delta_k) e^{ikx} = i(x - 2 \sum_m c_m \sin(m\Delta x)) e^{ikx} \quad (6.15)$$

A $\sin(m\Delta x)$ függvényt Taylor-sorba fejtvé, c_m -ek megfelelő választásával elérhetjük, hogy a zárójeles kifejezés x első $2Q - 1$ rendjében eltűnjön. Az ehhez szükséges c_m -eket az alábbi lineáris egyenletrendszer megoldásaként kapjuk ($\mathbf{c}^T$ a c_m együtthatókból képzett sorvektor transzponáltját jelöli):

$$\mathbf{M} \mathbf{c}^T = \frac{1}{2\Delta} (1, 0, 0, \dots, 0)^T \quad M_{ij} = j^{2i-1} \quad i, j = 1, \dots, Q \quad (6.16)$$

Ekkor $(\partial_k - \delta_k) e^{ikx} = \mathcal{O}(\Delta^{2Q-1})$. $Q = N/2$ választással a hiba $\mathcal{O}(\Delta^{N-1})$ -re csökkenthető.

A kváziimpulzustérből egy diszkrét Fourier-transzformációval térhetünk át valós térbe. Ennek hatására egy $\hat{A}(k)$ operátor esetén 6.14 képletben szereplő differenciák a következőképpen néznek ki:

$$\begin{aligned} \sum_{m=1}^Q c_m [\hat{A}(k_n + m\Delta) - \hat{A}(k_n - m\Delta)] &\rightarrow \\ &\rightarrow \sum_{m=1}^Q c_m (e^{-im\Delta\hat{x}} \hat{A} e^{im\Delta\hat{x}} - e^{im\Delta\hat{x}} \hat{A} e^{-im\Delta\hat{x}}) \end{aligned} \quad (6.17)$$

Ez nem más, mint az az $[\hat{x}, \hat{A}]$ kommutátor kifejezése egy véges méretű, periodikus rendszer esetén. Ezt felhasználva lehetővé válik a 4.1 képlet implementálása numerikus számolások céljából. A kvantumos bolyongás esetén ezt mindkét királis

timeframe-ben meg kell tennünk, így megkapjuk a ν' és ν'' csavarodási számokat. Ezekből a 3.21 képleteknek megfelelően kapjuk a 0, illetve π energiájú állapotok számát meghatározó topologikus invariánsokat. Ezt elvégezve a korábban részletesen tárgyalt, szórásmátrixokon alapuló módszerhez hasonlóan megkaptuk a rendezetlen bolyongás topologikus fázisait. A két módszer eredményeit a 14 ábrán hasonlítottuk össze. Megemlítjük, hogy a valóstérbeli szórásmátrixok módszerének nagy előnye, hogy a rendszermérettel lineárisan skálázódik, a 5.13 képleteknek megfelelően. Ezzel szemben a másik módszer rosszabbul skálázódik, elsősorban a mátrixműveletek miatt, amelyek mind Q_{AB} és Q_{BA} meghatározásához, mind a kommutátor kiszámításához szükségesek.

7. Összefoglalás

A dolgozatban részletesen megvizsgáltuk a kvantum bolyongásokban megjelenő topologikus fázisokat egy egyszerű rendszer, az ún. split step bolyongás példáján keresztül. Az 2 és 3 fejezetekben bemutattuk a már ismert eredményeket a homogén esetre, részletesen megvizsgálva a bolyongás királis szimmetriáját és az ennek következtében megjelenő állapotok illetve topologikus invariánsok fogalmát, kitérve a kettő közötti kapcsolatra.

A 4 fejezetben ismertettük a topologikus invariánsok definíciójának rendezetlen rendszerek esetére való általánosításával kapcsolatos közelmúltbeli eredményeket, amelyekre saját eredményeink épülnek.

A dolgozat második felében (5 és 6 fejezetek) ismertettük saját eredményeinket a rendezetlen split step bolyongás topologikus fázisaira vonatkozóan. Először bemutattunk egy módszert, amellyel a valóstérbeli szórásmátrix fogalmán keresztül a topologikus invariánsok meghatározhatóak, nem csak a split step bolyongásban, hanem más, összetettebb kvantum bolyongás protokollok esetén is. Módszerünket alkalmazva a split step bolyongásra, meg tudtuk adni a transzfermátrix kanonikus paraméterezését. Beláttuk, hogy az így megjelenő, részrendszerek egyesítésére nézve additív λ paraméterek átlagos értékének előjele helyesen adja meg a bolyongás topologikus invariánsait. Megmutattuk, hogy ezáltal a topologikus invariáns tetzőleges rendezetlenség esetén kiszámítható a λ paramétereknek a rendezetlenséget definiáló eloszlás szerinti integrálásával. Ez az állítás, a λ paramétereknek a bolyongás definíciójában szereplő θ_1 és θ_2 szögektől való függését megadó 5.21 képletekkel

együtt, megadja a split step bolyongás topologikus fázisainak leírását tetszőleges rendezetlen esetben. Ez jelenti a dolgozat fő eredményét. Eredményünket alátámasztottuk azzal is, hogy a transzfermátrix kanonikus paraméterezéséből kiindulva expliciten megmutattuk, hogy két tömb határán az élállapotok megkonstruálásának szükséges és elégséges feltételét adja az, hogy valamelyik additív paraméter előjele különbözzön a két tömbben.

A rendezetlen bolyongásra vonatkozó általános eredmény tárgyalása után megvizsgáltunk két konkrét modellt. Mindkét esetben felrajzoltuk a topologikus fázisok térképeit és megkerestük a fázishatárokat (az első esetben analitikusan, a másodikban az integrált numerikusan számolva). Eredményeinkből az is kitűnik, hogy a topologikus fázisok határán egy delokalizációs átmenet lép fel. Megmutattuk, hogy a teljesen rendezetlen esetben (amikor a paramétertér minden pontja azonos valószínűséggel fordul elő), a rendszer vezetőként viselkedik. Eredményeinket a valóstérbeli szórásmaátrixon alapuló számítógépes szimulációkkal is alátámasztottuk.

A dolgozat legvégén összevetettük a szórásmaátrixon alapuló eredményeket egy másik, a [21] és [18] cikkekben vázolt módszerrel, amely a nemkommutatív geometria eszközeit használja. Ezen cikkek alapján összefoglaltuk a módszer numerikus implementációjára vonatkozó ismereteket és bemutattuk ezeken alapuló saját numerikus eredményeinket.

8. Köszönetnyilvánítás

Szeretnék köszönetet mondani témavezetőmnek, Dr. Asbóth Jánosnak, aki megismertetett ezzel az izgalmas témával, mindig készségesen válaszolt felmerülő kérdéseimre, továbbá segített a dolgozatban előforduló hibák megtalálásában és kijavításában.

Továbbá szeretnék köszönettel tartozom családomnak és barátaimnak, különösen édedanyámnak, a dolgozat megírása közben nyújtott támogatásukért.

A. 1. függelék

Az elvégzett kutatási feladatok:

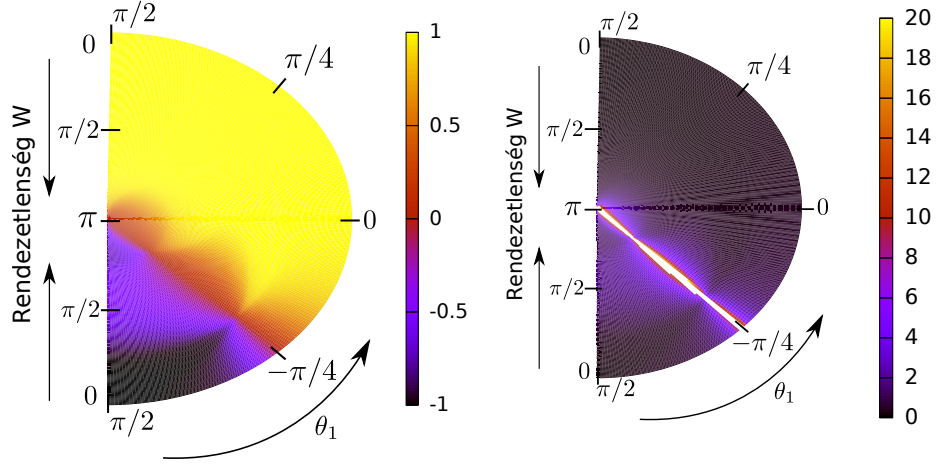
- Számítógépes szimuláció írása python nyelven a kvantum bolyongás időbeli fejlődésének szimulálására. Ezzel a [20] cikkben szereplő 2. ábrát reprodukáltam, valamint ehhez hasonló ábrákat készítettem a split step bolyongásra vonatkozólag.
- Szintén python nyelven programot írtam a rendezetlen bolyongás állapotsűrűségének meghatározására. Ez a [20] cikk 3. ábrájának reprodukálását és a split step bolyongásra történő általánosítását tette lehetővé.
- Témavezetőmmel közösen dolgoztuk ki a 5 fejezetben leírt számítási módszert (valós térbeli szórásmatrixok módszere). Ezt a módszert öneállóan alkalmaztam a split step bolyongás esetére. Kiszámítottam a bolyongást jellemző szórási, illetve transzfer matrixokat. Meghatároztam a transzfermatrixokat jellemző additív paramétereket.
- Leírtam a topologikus fázisok és az említett additív paraméterek átlagos értékei közötti kapcsolatot. A [18] cikk gondolatmenetét követve beláttam, hogy a rendszerméterrel végtelenhez tartva a rendszer az additív paraméterek sokaság-átlagával jellemezhető (6.1 fejezet). Megmutattam azt is, hogy az additív paraméterek helyesen adják meg mind az élállapotok létezésére vonatkozó feltételt, mind az állapotokra jellemző méretskálát (6.2 fejezet).
- A bolyongás szórási jellemzőit két konkrét példa rendszerre kiszámítottam mind az analitikus képleket segítségével (egyik esetben a szükséges integrálást numerikusan elvégezve), mind a szórásmatrix iterálásával numerikusan, python nyelven írt programok segítségével (6.3 és 6.4 fejezetek).
- Szintén numerikusan meghatároztam a topologikus invariánsokat egy másik, alternatív módon is, lásd 6.5 fejezetet.

Hivatkozások

- [1] Dorit Aharonov, Andris Ambainis, Julia Kempe, and Umesh Vazirani. Quantum walks on graphs. In *Proceedings of the thirty-third annual ACM symposium on Theory of computing*, STOC '01, pages 50–59. ACM, 2001.
- [2] Y. Aharonov, L. Davidovich, and N. Zagury. Quantum random walks. *Phys. Rev. A*, 48:1687–1690, Aug 1993.
- [3] J. K. Asbóth. Symmetries, topological phases, and bound states in the one-dimensional quantum walk. *Phys. Rev. B*, 86:195414, Nov 2012.
- [4] J. K. Asbóth and Hideaki Obuse. Bulk-boundary correspondence for chiral symmetric quantum walks. *Phys. Rev. B*, 88:121406, Sep 2013.
- [5] J. K. Asbóth and A. Oroszlány, L. Pályi. Topological insulators. http://fizipedia.bme.hu/images/1/14/Topological_insulators.pdf.
- [6] M. A. Broome, A. Fedrizzi, B. P. Lanyon, I. Kassal, A. Aspuru-Guzik, and A. G. White. Discrete single-photon quantum walks with tunable decoherence. *Phys. Rev. Letters*, 104, 2010.
- [7] P. W. Brouwer, C. Mudry, B. D. Simons, and A. Altland. Delocalization in coupled one-dimensional chains. *Phys. Rev. Letters*, 81, July 1998.
- [8] Andrew M. Childs. Universal computation by quantum walk. *Phys. Rev. Lett.*, 102:180501, May 2009.
- [9] Andrew M. Childs, Richard Cleve, Enrico Deotto, Edward Farhi, Sam Gutmann, and Daniel A. Spielman. Exponential algorithmic speedup by a quantum walk. In *Proceedings of the thirty-fifth annual ACM symposium on Theory of computing*, STOC '03, pages 59–68, New York, NY, USA, 2003. ACM.
- [10] I. C. Fulga, F. Hassler, and A. R. Akhmerov. Scattering theory of topological insulators and superconductors. *Phys. Rev. B*, 85:165409, Apr 2012.
- [11] I. C. Fulga, F. Hassler, A. R. Akhmerov, and C. W. J. Beenakker. Scattering formula for the topological quantum number of a disordered multimode wire. *Phys. Rev. B*, 83:155429, Apr 2011.

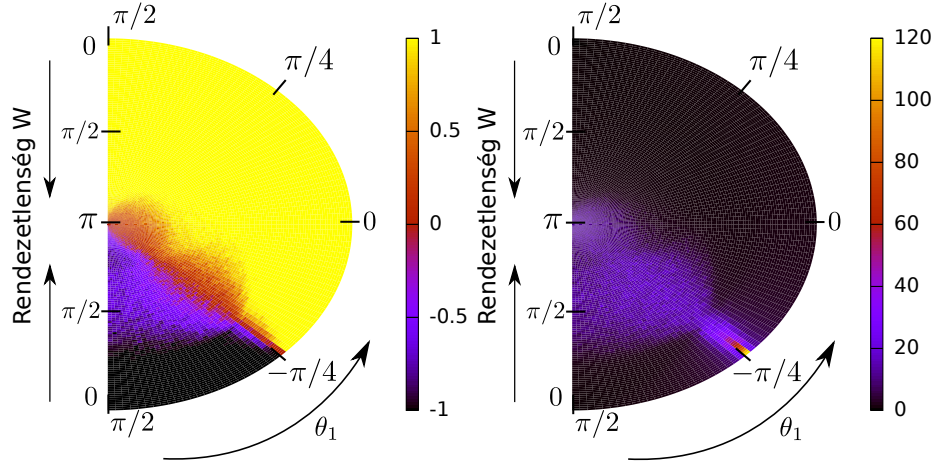
- [12] Michal Karski, Leonid Förster, Jai-Min Choi, Andreas Steffen, Wolfgang Alt, Dieter Meschede, and Artur Widera. Quantum walk in position space with single optically trapped atoms. *Science*, 325:174–177, July 2009.
- [13] Takuya Kitagawa. Topological phenomena in quantum walks; elementary introduction to the physics of topological phases. *Quantum Information Processing*, 11:1107–1148, Oct 2012.
- [14] Takuya Kitagawa, Matthew A. Broome, Alessandro Fedrizzi, Mark S. Rudner, Erez Berg, Ivan Kassal, Alán Aspuru-Guzik, Eugene Demler, and Andrew G. White. Observation of topologically protected bound states in a one dimensional photonic system. *Nature Communications*, 3:882, June 2012.
- [15] Takuya Kitagawa, Mark S. Rudner, Erez Berg, and Eugene Demler. Exploring topological phases with quantum walks. *Phys. Rev. A*, 82:033429, Sep 2010.
- [16] Neil B. Lovett, Sally Cooper, Matthew Everitt, Matthew Trevers, and Viv Kendon. Universal quantum computation using the discrete-time quantum walk. *Phys. Rev. A*, 81:042330, Apr 2010.
- [17] Pier A. Mello and Narendra Kumar. *Quantum Transport in Mesoscopic Systems: Complexity and Statistical Fluctuations*. Oxford University Press, 2004.
- [18] Ian Mondragon-Shem, Juntao Song, Taylor L Hughes, and Emil Prodan. Topological criticality in the chiral-symmetric AIII class as strong disorder. *Phys. Rev. Lett.*, 113, 2014.
- [19] C. Mudry, P. W. Brouwer, and A. Furusaki. The random magnetic flux problem in a quantum wire. *Phys. Rev. B*, 59, 1999.
- [20] Hideaki Obuse and Norio Kawakami. Topological phases and delocalization of quantum walks in random environments. *Phys. Rev. B*, 84:195139, Nov 2011.
- [21] Emil Prodan. Disordered topological insulators: A non-commutative geometry perspective. *Journal of Physics A*, 44, March 2011.
- [22] Xiao-Liang Qi and Shou-Cheng Zhang. The quantum spin hall effect and topological insulators.

- [23] Raffaele Resta. Geometry and topology in electronic structure theory. <http://www-dft.ts.infn.it/~resta/gtse/draft.pdf>.
- [24] Raffaele Resta. The quantum-mechanical position operator and the polarization problem. In *Fifth Williamsburg Workshop on First-Principles Calculations for Ferroelectrics*, 1998.
- [25] Mark S. Rudner, Netanel H. Lindner, Erez Berg, and Michael Levin. Anomalous edge states and the bulk-edge correspondence for periodically driven two-dimensional systems. *Phys. Rev. X*, 3:031005, Jul 2013.
- [26] Shinsei Ryu, Andreas P Schnyder, Akira Furusaki, and Andreas W W Ludwig. Topological insulators and superconductors: tenfold way and dimensional hierarchy. *New Journal of Physics*, 12:065010, 2010.
- [27] Miklos Santha. Quantum walk based search algorithms. *5th Theory and Applications of Models of Computation*, 2008.
- [28] B. Tarasinski, J. K. Asbóth, and J. P. Dahlhaus. Scattering theory of topological phases in discrete-time quantum walks. *Phys. Rev. A*, 89, 2014.
- [29] G. Theodorou and M. H. Cohen. Extended states in a one-dimensional system with off-diagonal disorder. *Phys. Rev. B*, 13, 1976.
- [30] F. Zähringer, G. Kirchmair, R. Gerritsma, E. Solano, R. Blatt, and C. F. Roos. Realization of a quantum walk with one and two trapped ions. *Phys. Rev. Lett.*, 104:100503, Mar 2010.
- [31] Haijun Zhang, Chao-Xing Liu, Xiao-Liang Qi, Xi Dai, Zhong Fang, and Shou-Cheng Zhang. Topological insulators in Bi₂Se₃, Bi₂Te₃ and Sb₂Te₃ with a single Dirac cone on the surface. *Nature Physics*, 5:438–442, 2009.



(a) $\langle \tau(0) \rangle = -\tanh \langle \lambda_0 \rangle$

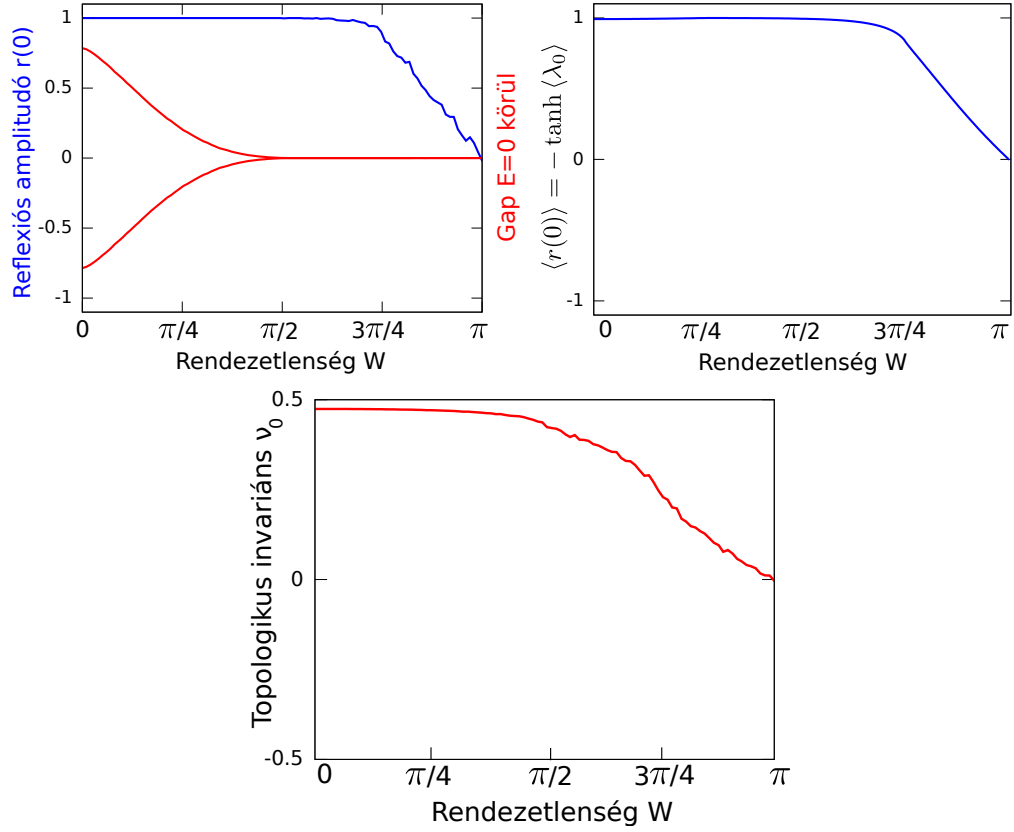
(b) $\langle \xi(0) \rangle = 1/\langle \lambda_0 \rangle$



(c) Reflexiós amplitudó $r(0)$

(d) Lokalizációs hossz $\xi(0)$

13. ábra. Az *uniform rendezetlen split step bolyongás* topologikus fázisai és szórási jellemzői 0 energián, a $\theta_2 = \pi/4$ metszetben. Az (a) ábra a 6.13 integrál numerikus számításából származó, $E = 0$ -hoz tartozó átlagos $\langle \lambda_0 \rangle_{L \rightarrow \infty}$ additív paraméterekből kapott $\tau(E = 0) = -\tanh \lambda_0$ valós térbeli reflexiós amplitudót, a (b) ábra pedig a $\xi(E = 0) = 1/|\lambda_0|$ lokalizációs hosszat ábrázolja. Az ábráról hiányzó fehér vonal azokat a helyeket jelöli, ahol $\xi(0) > 20$. Látható, hogy a különböző topologikus fázisok határa a homogén rendszerbeli fázishatárhoz tartozó pontot a teljesen rendezetlen ponttal összekötő egyenes mentén fekszik. A (c) és (d) ábrák a valós térbeli szórás mátrix iterálásával kapott reflexiós amplitudókat illetve lokalizációs hosszokat ábrázolják, egy $L = 80$ méretű rendszer esetén, 100 realizációra átlagolva.



14. ábra. A szórásmátrixsal és a valóstérbeli csavarodási számok segítségével számított topologikus invariánsok összehasonlítása. (a) A 0 energiás reflexiós amplitúdó várható értéke összevetve a 0 körüli gap bezárulásával a rendezetlenség erősségének függvényében. A piros görbe a legkisebb pozitív illetve legnagyobb negatív kvázienergiákat ábrázolja. Látható, hogy a rendezetlenség erősödésével a gap bezárul, majd, tovább növelve a rendezetlenséget, a reflexiós amplitúdó értéke elkezd csökkenni, amíg az erősen rendezetlen határesetben eléri a 0 értéket. A szimulációkat egy 200 rácspontból álló rendszerre végeztük és a paraméterek 1000 realizációjára átlagoltunk. (b) A megfelelő görbe végtelen rendszer esetére, a 6.12 képlet alapján. (c) A 4.1 képlet diszkretizálásával kapott topologikus invariánsok, egy 50 rácspontból álló rendszerre, 2500 realizációra átlagolva.