

Institut für Theoretische Physik
Universität zu Köln

Zeitabhängige Störung topologisch geschützter Zustände
realisiert mit einem Quantum Walk



Bachelorarbeit

Vorgelegt von:

Johannes Schmidt

E-Mail: j.o.h.schmidt@t-online.de

Erstprüfer: Prof. Dr. Achim Rosch

Zweitprüfer: Prof. Dr. Simon Trebst

Inhaltsverzeichnis

1	Motivation	5
2	Grundlagen	6
2.1	Vergleich Random Walk und Quantum Walk	6
2.2	Topologischer Isolator	7
2.3	Antiunitäre Operatoren	9
2.4	Time-Reversal Symmetry (TRS)	10
2.5	Particle-Hole Symmetry (PHS)	11
2.6	Topologische Klassifizierung	11
3	Split-Step Protokoll	13
3.1	Definition des Split-Step Protokoll	13
3.2	Bestimmung der Bandstruktur	14
3.3	Topologische Klassifizierung STQW	17
3.3.1	Particle-Hole-Symmetry	17
3.3.2	Chiral-Symmetry	18
3.3.3	Time-Reversal Symmetrie	19
3.3.4	Symmetrieklasse STQW	19
3.4	Phasendiagramm / Winding Number	19
4	Realisierung eines nicht trivialen topologischen Isolator mit Hilfe des Split-Step Protokoll	21
4.1	Erzeugung eines Systems mit zwei Phasen	21
4.2	Gebundener Zustand an Phasengrenze	21
4.3	Berechnung des gebunden Zustands	22
5	Zerfallsrate des gebundenen Zustands für zeitabhängige Störung	25
5.1	Numerische Ergebnisse von Jan Gelhausen	25
5.1.1	Statische Unordnung (Energieerhaltung)	25
5.1.2	Zeitabhängige Unordnung (keine Energieerhaltung)	26
5.2	Herleitung der Zerfallsrate. (Fermis goldene Regel)	27
5.3	Vergleich numerischer Ergebnisse mit den theoretischen Erwartungswerten.	31
6	Zusammenfassung	34
7	Literaturverzeichnis	35
8	Wertetabellen	37

1 Motivation

Diese Bachelorarbeit basiert auf den Ideen von Demler, Berg, Rudner und Kitagawa [8]. Sie fanden heraus, dass der Quantum-Walk mit diskreten Zeitschritten durch Modifikation alle möglichen in 1D und 2D auftretenden Symmetrien unterstützt. Weiter zeigten sie, dass der Quantum-Walk ein geeignetes Werkzeug ist den Charakter topologischer Phasen zu beschreiben. Hierzu erarbeiteten sie ein Quantum-Walk-Protokoll, welches ein System bestehend aus zwei verschiedenen topologischen Phasen unterstützt. An Phasengrenze existiert ein gebundener Zustand, dessen Existenz durch den topologisch nicht trivialen Charakter und den anwesenden Symmetrien garantiert wird.

Das Interesse an topologischen Phasen und durch Topologie und Symmetrie geschützten Zuständen an der Phasengrenze ist besonders durch die theoretische und experimentelle Entdeckung des topologischen Isolators begründet. Er zeichnet sich dadurch aus, dass er im Inneren isoliert und an seiner Oberfläche eine nahezu dissipationslose Leitung aufweist. Dieser Effekt kann bereits in naher Zukunft eine breite Anwendung in der elektronischen Datenverarbeitung finden [4].

Experimentelle Realisierungen von Quantum-Walks sind stets von Fehlern begleitet. Um diese unter Kontrolle zu bekommen ist es wichtig ihre Einflüsse zu kennen. In der vorangegangenen Bachelorarbeit von Jan Gelhausen [6] wurde durch numerische Analysen gezeigt, dass der gebundene Zustand robust gegen zeitunabhängige Störung ist, jedoch bei zeitabhängiger Störung exponentiell zerfällt. Wobei die Zerfallskonstante quadratisch mit der Störung skaliert.

Ziel dieser Bachelorarbeit ist es zu verstehen, von welchen Systemgrößen die Zerfallsrate des topologisch geschützten Zustands abhängt.

Hierzu wurde diese Bachelorarbeit wie folgt strukturiert: Im ersten Teil erhält der Leser eine kurze Einführung in die zum Verständnis nötigen theoretischen Grundlagen und Konzepte.

Im zweiten Teil wird das von Demler et. al. ausgearbeitete Quantum-Walk Protokoll vorgestellt und klassifiziert. Anschließend wird erläutert, wie man mit diesen ein topologisch nicht triviales System erzeugt.

Im Hauptteil dieser Arbeit werden zunächst die numerischen Ergebnisse von Jan Gelhausen vorgestellt und anschließend ein analytischer Ausdruck für die Zerfallsrate hergeleitet. Zuletzt wird die theoretische Erwartung mit numerischen Ergebnissen verglichen.

2 Grundlagen

2.1 Vergleich Random Walk und Quantum Walk

Ein diskreter Quantum Walk beschreibt die zeitliche Entwicklung des Zustands $|\Psi(t=0)\rangle$ stroboskopartig mit einem festen Zeitintervall Δt durch eine unitäre Transformation U

$$|\Psi(j \cdot \Delta t)\rangle = U^j |\Psi(t=0)\rangle$$

Im Heisenbergbild lässt sich der Zeitentwicklungsoperator in bekannter Form darstellen

$$U^j = \exp\left(-i\frac{\hat{H}}{\hbar}\Delta t \cdot j\right) \stackrel{\Delta t=\hbar=1}{=} \exp(-i\hat{H} \cdot j) ; \hat{H} \equiv \text{Hamilton-Operator}$$

Der Quantum Walk bildet das quantenmechanische Analogon zum klassischen Random Walk. Die Grundidee eines Random Walk's besteht darin, die Position eines Springers abhängig eines stochastischen Ergebnis zu verschieben. Beispielsweise kann die Brown'sche Bewegung sehr gut durch einen Random Walk simuliert werden[3].

Folgend werden eindimensionale Bewegungen auf einem Gitter mit der Gitterkonstante $a = 1$ stroboskopartig mit dem Zeitintervall $\Delta t = 1$ betrachtet. Klassisch wird der Springer in jedem Zeitschritt mit der Wahrscheinlichkeit $p_l = 1 - p$ nach links und mit $p_r = p$ nach rechts verschoben. Dieses System kann gut durch ein Galtonbrett visualisiert werden (siehe Abb. 1). Man kann sich leicht klarmachen, dass hier keine Zeitumkehrsymmetrie vorliegt. Nach jedem Zeitschritt geht die Information über den bisherigen Verlauf vollständig verloren, womit die möglichen Pfade unabhängig sind.

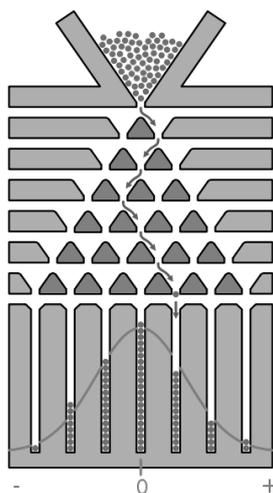


Abbildung 1: Galtonbrett $p_l = p_r = \frac{1}{2}$ Abbildung entnommen aus [1]

Motiviert durch die breite Anwendung klassische Probleme mittels eines Random-Walk's zu beschreiben wurde ein quantenmechanisches Analogon konstruiert, um die Dynamik quantenmechanischer Systeme zu simulieren.

Nach dem Bild der Pfadintegrale geht ein Walker in einem quantenmechanischen System alle möglichen Pfade gleichzeitig. Somit dürfen die Pfade nicht wie im klassischen Fall unabhängig sein. Als Walker wird ein spinbehaftetes Teilchen verwendet, welches rotiert und die Aufenthaltswahrscheinlichkeit abhängig der Spinorientierung verschoben wird (vgl. Abb. 2).

Hierbei handelt es sich im einzelnen um unitäre Transformationen. Die Gesamttransformation innerhalb

des Zeitintervalls Δt kann eine beliebige problemspezifische Komposition einzelner Transformationen sein. Die Zustände sind Element des Hilbertraum $\mathcal{H} = \mathcal{H}_C \otimes \mathcal{H}_P$ mit $\mathcal{H}_C = \{|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle\}$ und $\mathcal{H}_P = \{|x\rangle ; x \in \mathbb{Z}\}$

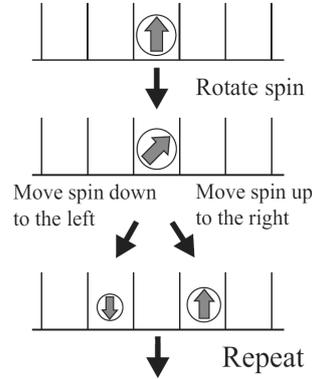


Abbildung 2: Quantum Walk realisiert mit einem spinbehafteten Teilchen
Abbildung entnommen aus [8]

Folgend wird ein Spin- $\frac{1}{2}$ Teilchen betrachtet und der Spin um die y-Achse rotiert. Damit kann das in Abbildung 2 dargestellte Protokoll wie folgt implementiert werden.

$$\begin{aligned}
 U &= T_{\uparrow,\downarrow} \cdot (R(\theta) \otimes \mathbb{1}_x) \\
 T_{\uparrow,\downarrow} &= \sum_x \{|x-1\rangle \langle x| \otimes |\downarrow\rangle \langle \downarrow| + |x+1\rangle \langle x| \otimes |\uparrow\rangle \langle \uparrow|\} \\
 R(\theta) &= e^{-i\frac{\theta}{2}\sigma_y} = \mathbb{1} \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) - i\sigma_y \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) = \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) & -\sin\left(\frac{\theta}{2}\right) \\ \sin\left(\frac{\theta}{2}\right) & \cos\left(\frac{\theta}{2}\right) \end{pmatrix} \\
 \mathbb{1}_x &= \sum_x |x\rangle \langle x|
 \end{aligned}$$

2.2 Topologischer Isolator

Ein einfacher Isolator leitet keinen Strom und kann leicht mit Hilfe des Bändermodell beschrieben werden. Hierbei sind Valenz- und Leitungsband durch eine große Energielücke getrennt. Die Fermikante befindet sich bei einem Isolator zwischen beiden Bändern. Somit ist das Valenzband vollständig besetzt und das Leitungsband leer.

Ein topologischer Isolator zeichnet sich dadurch aus, dass er im inneren isoliert und an der Oberfläche leitet. Es treten somit zusätzliche Randzustände auf, die zwischen Valenz- und Leitungsband liegen (vgl. Abb.4). Berücksichtigt man den Spin, so steht dieser senkrecht zur Bewegungsrichtung. Bei gegebener Energie gibt es nur ein weiteren Zustand (spin-up und -down), wodurch die Streuung stark unterdrückt und der Strom an der Oberfläche nahezu dissipationslos ist. Dieser Effekt kann in naher Zukunft eine breite Anwendung in der elektronischen Datenverarbeitung finden.[4]

Motiviert wurde diese Klassifizierung neuer Isolatoren durch die Entdeckung des Quantum-Hall-Effekt.

Beim klassischen Hall-Effekt fließt ein elektrischer Strom I durch ein dünnes Plättchen, welches senkrecht zur Oberfläche von einem Magnetfeld B durchdrungen wird. Der Strom wird durch die wirkende Lorentzkraft seitlich abgelenkt und es entsteht eine Spannung U_H quer zur Stromrichtung an den Kanten. Der Hall-widerstand wird somit definiert:

$$R_H = \frac{U_H}{I} \propto B$$

Bei hinreichend tiefer Temperatur und großen Magnetfeldern nimmt der Quantum-Hall-Widerstand unabhängig vom Material einen der folgenden Plateau-Werte an.

$$R_H = \frac{h}{\nu e^2}, \nu \in \mathbb{Z}$$

Bei Zunahme des Magnetfeld bleibt der Hall-Widerstand solange konstant bis der nächste Stufenwert ($\nu \rightarrow \nu - 1$) erreicht wird. Weiter fällt auf, dass die Spannung in Stromflussrichtung U_x verschwindet (somit auch der der Widerstand) für die Magnetfelder, bei denen der Hall-Widerstand einen Plateau-Wert einnimmt. Zwischen den Plateaus entstehen scharfe Widerstandsmaxima. (vgl. Abb. 3)

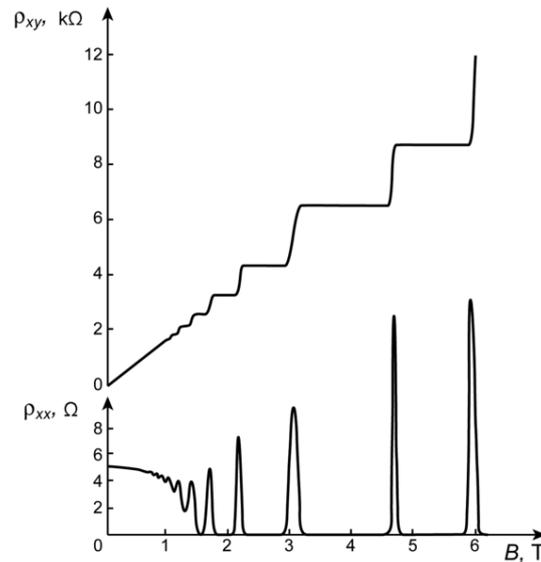


Abbildung 3: Idealisertes Beispiel für den Quantum-Hall-Effekt. ρ_{xy} Hall- und ρ_{xx} elektrischer Widerstand gegen das anliegende Magnetfeld aufgetragen. Abbildung entnommen aus [2]

Untersucht man den Quantum-Hall-Effekt für einem Isolator, tritt für die Plateauwerte des Hallwiderstands elektrische Leitung an der Oberfläche auf.

Wie oben bereits erwähnt bedarf es zum auftreten des Quantum-Hall-Effekts sehr niedrige Temperaturen und sehr große Magnetfelder, sowie zwei-dimensionale Systeme.

Hingegen übernimmt beim Quantum-Spin-Hall-Effekt die Spinkoppelung die Rolle starker Magnetfelder, wodurch sich Spin-polarisierte Randzustände bilden.

Somit existieren Materialien die bei Raumtemperatur, ohne extern anliegendes Magnetfeld, elektrische Leitung an der Oberfläche zeigen und im inneren Isolieren. Diese Effekte erweisen sich robust gegen Defekte, daher werden sie durch topologische Eigenschaften und nicht durch lokale Parameter bestimmt [5].

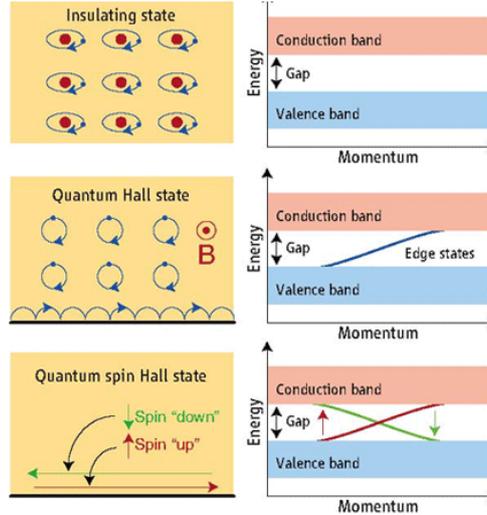


Abbildung 4: Oben: Einfacher Isolator. Die Elektronen befinden sich in lokalisierten Orbitalen und das Valenzband ist durch eine große Energielücke vom Leitungsband getrennt. Mitte: Zweidimensionaler Quantum-Hall Zustand mit einer Energielücke zwischen den Bändern im inneren und zusätzliche Randzustände, die in eine Richtung elektrische Leitung an der Probengrenze zulassen. Unten: Quantum-Spin-Hall Zustand mit einer Energielücke bedingt durch die Spinkoppelung. Es entstehen Spin-polarisierte Randzustände, die elektrische Leitung an der Probengrenze zulassen. Abbildung entnommen aus [7]

2.3 Antiunitäre Operatoren

Die nachfolgend besprochenen Symmetrien basieren auf der Existenz antiunitärer Operatoren. Um ihre Eigenschaften einzuführen wird Referenz [9] verwendet.

Ein Operator wird als antiunitär bezeichnet wenn er die folgenden Gleichungen erfüllt:

$$A(\alpha_1 |\psi\rangle + \alpha_2 |\psi\rangle) = \alpha_1^* A|\psi\rangle + \alpha_2^* A|\psi\rangle \quad (1)$$

$$\langle A\psi | A\phi \rangle = \langle \phi | \psi \rangle \quad (2)$$

Es wird gezeigt das die komplexe Konjugation K (1) und (2) erfüllt:

$$K(\alpha_1 |\psi\rangle + \alpha_2 |\psi\rangle) = \alpha_1^* K|\psi\rangle + \alpha_2^* K|\psi\rangle = \alpha_1^* \overline{|\psi\rangle} + \alpha_2^* \overline{|\psi\rangle}$$

$$\langle K\phi | K\psi \rangle = \overline{\langle \phi | \psi \rangle} = \langle \psi | \phi \rangle$$

Ferner: Ist U unitär, so ist das Produkt $A=UK$ antiunitär:

$$UK(\alpha_1 |\psi\rangle + \alpha_2 |\psi\rangle) = U(\alpha_1^* K|\psi\rangle + \alpha_2^* K|\psi\rangle) = \alpha_1^* UK|\psi\rangle + \alpha_2^* UK|\psi\rangle$$

$$\langle UK\phi | UK\psi \rangle = \langle K\phi | \underbrace{U^\dagger U}_1 | K\psi \rangle = \langle K\phi | K\psi \rangle = \langle \psi | \phi \rangle$$

Nun wird gezeigt, dass jeder antiunitäre Operator A in der Form $A = UK$ mit U unitär geschrieben werden kann.

Gegeben sei ein beliebiger antiunitärer Operator A , dann ist das Produkt $U = AK$ unitär

$$\begin{aligned} AK(\alpha_1|\psi\rangle + \alpha_2|\psi\rangle) &= A(\alpha_1^*K|\psi\rangle + \alpha_2^*K|\psi\rangle) = \alpha_1AK|\psi\rangle + \alpha_2AK|\psi\rangle \\ \langle AK\phi|AK\psi\rangle &= \langle A\phi^*|A\psi^*\rangle = \langle\psi^*|\phi^*\rangle = \langle\phi|\psi\rangle \Rightarrow (AK)^\dagger = (AK)^{-1} \\ \Rightarrow U &= AK \end{aligned}$$

Mit $KK = \mathbb{1}$ folgt schließlich $A = UK$

2.4 Time-Reversal Symmetry (TRS)

Zur kurzen Einführung der Zeitumkehrsymmetrie wird als Referenz [9] verwendet.

Zunächst wird die klassische Zeitumkehrinvarianz erläutert.

Gegeben sei ein System mit den Anfangsbedingungen

$$\begin{aligned} q(t=0) &= q_0 \\ p(t=0) &= p_0 \end{aligned}$$

welches die durch den Hamilton bestimmten Bewegungsgleichungen erfüllt. Die Bewegung soll zu einem Zeitpunkt $t = t_1$ umgekehrt werden, indem man als neue Anfangsbedingungen der Bewegungsgleichungen

$$\begin{aligned} \tilde{q}(t=t_1) &= q(t_1) \\ \tilde{p}(t=t_1) &= -p(t_1) \end{aligned}$$

festlegt. Gelten für die neuen Bewegungsgleichungen folgende Bedingungen, so heißt das System zeitumkehrinvariant.

$$\begin{aligned} \tilde{q}(t=2t_1) &= q_0 \\ \tilde{p}(t=2t_1) &= -p_0 \\ \forall t_1 &\geq 0 \end{aligned}$$

In der Quantenmechanik wird die Zeitumkehr durch einen antiunitären Operator \mathcal{T} beschrieben.

Analog zur klassischen Physik gilt in der Quantenmechanik für einen zum Zeitpunkt t bewegungsumgekehrten und nochmals um die Zeit t propagierten Zustand bei Zeitumkehrinvarianz Gleichheit zum bewegungsumgekehrten Zustand zum Zeitpunkt $t = 0$:

$$\begin{aligned} e^{-iHt}\mathcal{T}|\psi(t)\rangle &= \mathcal{T}|\psi(0)\rangle \\ e^{-iHt}\mathcal{T}e^{-iHt}|\psi(0)\rangle &= \mathcal{T}|\psi(0)\rangle \end{aligned} \tag{3}$$

Somit muss die Gleichung (3) bei Zeitumkehrinvarianz erfüllt sein.

Gleichung (3) gilt für beliebige Zustände $|\psi(0)\rangle$, somit folgt allgemein:

$$\begin{aligned} e^{-iHt}\mathcal{T}e^{-iHt} &= \mathcal{T} \\ e^{-iHt}\mathcal{T} &= \mathcal{T}e^{iHt} \end{aligned} \tag{4}$$

Differenziert man (4) nach t und setzt $t = 0$ erhält man:

$$\begin{aligned} -iHT &= \mathcal{T}iH \stackrel{(1)}{=} -i\mathcal{T}H \\ \Rightarrow \mathcal{T}HT^{-1} &= H \end{aligned} \tag{5}$$

Hiermit folgt, dass ein zeitumkehrinvarianter Hamilton Gleichung (5) erfüllt.

2.5 Particle-Hole Symmetry (PHS)

Teilchen Loch Symmetrie ist gegeben wenn die Energieeigenwerte E_n und $-E_n$ paarweise für jedes k auftreten [8, 6]. Damit erfüllt der PHS-Operator folgende Eigenschaften:

$$\begin{aligned} \mathcal{H} |n\rangle &= E_n |n\rangle \\ \mathcal{P}\mathcal{H}\mathcal{P}^{-1} |n\rangle &= -E_n |n\rangle = -\mathcal{H} |n\rangle \\ \Rightarrow \mathcal{P}\mathcal{H} + \mathcal{H}\mathcal{P} &= 0 \\ \Leftrightarrow \mathcal{P}\mathcal{H}\mathcal{P}^{-1} &= -\mathcal{H} \end{aligned}$$

2.6 Topologische Klassifizierung

Der nachfolgende Abschnitt orientiert sich an [8]

Die Klassifizierung topologischer Isolatoren unterscheidet sich je nach An- oder Abwesenheit von Symmetrien des Hamilton.

In die Klassifizierung gehen die zuvor besprochenen Time-Reversal, Particle-Hole und Chirale Symmetrien ein. Hierzu haben die Symmetrieoperatoren folgende Gleichungen zu erfüllen:

$$\text{(TRS)} \quad \mathcal{T}\mathcal{H}_{ss}\mathcal{T}^{-1} = \mathcal{H}_{ss} \tag{6}$$

$$\text{(PHS)} \quad \mathcal{P}\mathcal{H}_{ss}\mathcal{P}^{-1} = -\mathcal{H}_{ss} \tag{7}$$

$$\text{(CS)} \quad \Gamma^{-1}\mathcal{H}_{ss}\Gamma = -\mathcal{H}_{ss} \tag{8}$$

Die Operatoren der TRS- und PHS sind antiunitär und der CS unitär. Man behalte im Hinterkopf, dass die Symmetrieoperatoren nach dem Theorem von Wigner entweder unitär oder antiunitär sind.

Wobei TRS und PHS nochmals durch ihre Eigenschaft $\mathcal{T}^2 = \pm 1$ und $\mathcal{P}^2 = \pm 1$ unterschieden werden. Zusammen mit der Chiral Symmetrie ergeben sich 10 topologische Klassen (vgl. Abb. 5). Jede dieser Klassen besitzt eine natürliche (Z) oder binäre (Z_2) Zahl als topologisch invariante Größe.

Classification of Topological Insulators

		Particle-Hole Symmetry			Particle-Hole Symmetry		
		+1	-1	×	+1	-1	×
Time-Reversal Symmetry	+1	Z SSH					
	-1	Z_2	Z		Z_2		Z_2 QSH
	×	Z_2			Z	Z	Z IQH
		1D			2D		

Abbildung 5: Die unterstehenden Abkürzungen bedeuten, dass in den jeweiligen Klassen die Modelle Su-Schrieffer-Hegger (SSH), integer quantized Hall (IQH) und quantum-spin-Hall (QSH) angehören. Abbildung entnommen aus [8]

3 Split-Step Protokoll

Demler et. al. entwickelten einen Quantum Walk, um einen eindimensionalen topologischen Isolator zu simulieren. Hierzu stellten sie eine Komposition von unitären Operatoren (Split-Step Protokoll) zusammen, die zur gleichen topologischen Klasse wie das Su-Schrieffer-Hegger Modell ($\mathcal{T}^2 = \mathcal{P}^2 = +\mathbf{1}$) gehört und zwei Phasen besitzt. Weiter bestimmten sie für ihr Modell ein Phasendiagramm und legten fest für welche Energiewerte sich die Bänder an der Phasengrenze schließen. Im darauf folgenden Kapitel wird erläutert, wie es Demler et. al. schafften ein heterogenes System zu konstruieren und wie dadurch topologisch geschützte Randzustände eines topologischen Isolator entstehen.

3.1 Definition des Split-Step Protokoll

Das im Kapitel 2.1 vorgestellte Quantum Walk Protokoll gehört zur selben topologischen Klasse wie das Split-Step Protokoll, besitzt aber nur eine Phase [8] und ist somit nicht geeignet, Randzustände eines topologischen Isolators zu simulieren. Um einen Zugang zu weiteren Phasen zu erhalten, spalteten sie die Translationen von Spin-up und -down Komponenten und bauten dazwischen eine zusätzliche Rotation ebenfalls um die y-Achse ein. (vgl. Abb. 6)

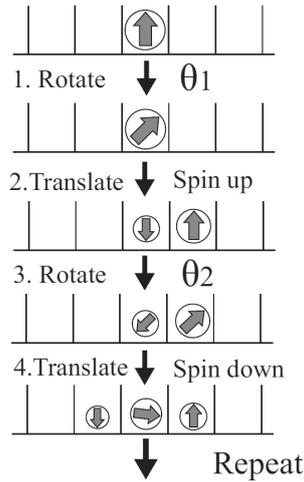


Abbildung 6: Split-Step Protokoll. Abbildung entnommen aus [8]

Damit ist das Split-Step Protokoll wie folgt definiert:

$$\begin{aligned}
 U_{ss} &= T_{\downarrow} R(\theta_2) T_{\uparrow} R(\theta_1) & (9) \\
 T_{\uparrow} &= \sum_x |x+1\rangle \langle x| \otimes |\uparrow\rangle \langle \uparrow| + \mathbf{1}_x \otimes |\downarrow\rangle \langle \downarrow| \\
 T_{\downarrow} &= \sum_x |x-1\rangle \langle x| \otimes |\downarrow\rangle \langle \downarrow| + \mathbf{1}_x \otimes |\uparrow\rangle \langle \uparrow| \\
 R(\theta_i) &= \mathbf{1}_x \otimes \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta_i}{2} & -\sin \frac{\theta_i}{2} \\ \sin \frac{\theta_i}{2} & \cos \frac{\theta_i}{2} \end{pmatrix} \\
 \theta_i &\in [-2\pi, 2\pi]
 \end{aligned}$$

3.2 Bestimmung der Bandstruktur

Der Zeitentwicklungsoperator U_{ss} kann nach dem Heisenbergbild wie folgt geschrieben werden:

$$U_{ss} = \exp\left(-i\frac{\mathcal{H}_{ss}}{\hbar}\Delta t\right) \stackrel{\Delta t=\hbar=1}{=} \exp(-i\mathcal{H}_{ss}) \quad (10)$$

$$\mathcal{H}_{ss} = \int_{-\pi}^{\pi} dk \left[\vec{L}(k, \theta_1, \theta_2) \cdot \vec{\sigma} \right] \otimes |k\rangle \langle k| \quad (11)$$

mit

$$E_{\theta_1, \theta_2}(k) = \pm \left| \vec{L}(k, \theta_1, \theta_2) \right| \quad (12)$$

$$\vec{\sigma} = \begin{pmatrix} \sigma_x & \sigma_y & \sigma_z \end{pmatrix}^t$$

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (13)$$

Unter Berücksichtigung der Identität

$$\exp(i\vec{a} \cdot \vec{\sigma}) = \mathbb{1} \cos(|\vec{a}|) + i\vec{n}_\alpha \cdot \vec{\sigma} \sin(|\vec{a}|) \quad (14)$$

$$\vec{a} \in \mathbb{R}^3$$

lässt sich Gleichung 10 in folgender Form schreiben:

$$\begin{aligned} U_{ss} &= \exp(-i\mathcal{H}_{ss}) \\ &\stackrel{(11)}{=} \int_{-\pi}^{\pi} dk \exp\left(-i\vec{L}(k, \theta_1, \theta_2) \cdot \vec{\sigma}\right) \otimes |k\rangle \langle k| \\ &\stackrel{(14),(12)}{=} \int_{-\pi}^{\pi} dk \left[\mathbb{1} \cos(E_{\theta_1, \theta_2}(k)) - i\vec{n}_L \cdot \vec{\sigma} \sin(E_{\theta_1, \theta_2}(k)) \right] \otimes |k\rangle \langle k| \\ &= \int_{-\pi}^{\pi} dk \left[c_0 \mathbb{1} + \sum_{j=1}^3 c_j \sigma_j \right] \otimes |k\rangle \langle k| \\ \Rightarrow \cos(E_{\theta_1, \theta_2}(k)) &= c_0 \quad (15) \\ n_j &= \frac{i}{\sin(E_{\theta_1, \theta_2}(k))} c_j \quad (16) \end{aligned}$$

Um die Koeffizienten c_0, c_j zu aus der nach der Fouriertransformation entstehenden 2×2 Matrix zu extrahieren, kann man folgende Eigenschaften verwenden:

$$\begin{aligned} \sigma_i \sigma_j &= \mathbb{1} \delta_{ij} + i \sum_k \epsilon_{ijk} \sigma_k \quad (17) \\ \text{Tr} \sigma_i &= 0 \\ A(k, \theta_1, \theta_2) &\in \mathbb{C}^{2 \times 2} \\ A &= c_0 \mathbb{1} + \sum_{j=1}^3 c_j \sigma_j \\ A \sigma_j &= c_0 \sigma_j + c_j \mathbb{1} + i \sum_{k,i} \epsilon_{ijk} \sigma_k \end{aligned}$$

Damit sind die Koeffizienten c_0, c_j bestimmt durch

$$\begin{aligned} c_0 &= \frac{1}{2} \text{Tr} A \\ c_j &= \frac{1}{2} \text{Tr} (A \sigma_j) \end{aligned}$$

und Gleichungen (15) (16) ergeben sich aus

$$\cos(E_{\theta_1, \theta_2}(k)) = \frac{1}{2} \text{Tr} A \quad (18)$$

$$n_j = \frac{i}{2 \sin(E_{\theta_1, \theta_2}(k))} \text{Tr} (A \sigma_j) \quad (19)$$

Es bleibt $A(k, \theta_1, \theta_2)$ zu bestimmen, dazu werden die einzelnen Komponenten von U_{ss} Fourier-Transformiert. Für die Rotationsmatrizen gilt:

$$R(\theta_i) = \mathbf{1}_k \otimes \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta_i}{2} & -\sin \frac{\theta_i}{2} \\ \sin \frac{\theta_i}{2} & \cos \frac{\theta_i}{2} \end{pmatrix}$$

Für die Translationsoperatoren folgt mit $|x\rangle = \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk}{\sqrt{2\pi}} e^{ikx} |k\rangle$:

$$\begin{aligned} T_{\uparrow} &= \sum_x |x+1\rangle \langle x| \otimes |\uparrow\rangle \langle \uparrow| + \mathbf{1}_x \otimes |\downarrow\rangle \langle \downarrow| \\ &= \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dk dk' \left[\underbrace{\left(\sum_x \frac{e^{i(k-k')x}}{2\pi} \right)}_{\delta(k-k')} |k\rangle \langle k'| e^{ik} \otimes |\uparrow\rangle \langle \uparrow| + \underbrace{\left(\sum_x \frac{e^{i(k-k')x}}{2\pi} \right)}_{\delta(k-k')} |k\rangle \langle k'| \otimes |\downarrow\rangle \langle \downarrow| \right] \\ &= \int_{-\pi}^{\pi} dk [|k\rangle \langle k| e^{ik} \otimes |\uparrow\rangle \langle \uparrow| + |k\rangle \langle k| \otimes |\downarrow\rangle \langle \downarrow|] \\ &= \int_{-\pi}^{\pi} dk |k\rangle \langle k| \otimes \begin{pmatrix} e^{ik} & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Analog folgt

$$T_{\downarrow} = \int_{-\pi}^{\pi} dk |k\rangle \langle k| \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{-ik} \end{pmatrix}$$

Für das Split-Step Protokoll erhält man insgesamt:

$$\begin{aligned} U_{ss} &= \int_{-\pi}^{\pi} dk |k\rangle \langle k| \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & e^{-ik} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta_2}{2} & -\sin \frac{\theta_2}{2} \\ \sin \frac{\theta_2}{2} & \cos \frac{\theta_2}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{ik} & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta_1}{2} & -\sin \frac{\theta_1}{2} \\ \sin \frac{\theta_1}{2} & \cos \frac{\theta_1}{2} \end{pmatrix} \\ &= \int_{-\pi}^{\pi} dk |k\rangle \langle k| \otimes \begin{pmatrix} e^{ik} \cos \frac{\theta_1}{2} \cos \frac{\theta_2}{2} - \sin \frac{\theta_1}{2} \sin \frac{\theta_2}{2} & -e^{ik} \sin \frac{\theta_1}{2} \cos \frac{\theta_2}{2} - \cos \frac{\theta_1}{2} \sin \frac{\theta_2}{2} \\ \cos \frac{\theta_1}{2} \sin \frac{\theta_2}{2} + e^{-ik} \sin \frac{\theta_1}{2} \cos \frac{\theta_2}{2} & -\sin \frac{\theta_1}{2} \sin \frac{\theta_2}{2} + e^{-ik} \cos \frac{\theta_1}{2} \cos \frac{\theta_2}{2} \end{pmatrix} \\ \Rightarrow A(k, \theta_1, \theta_2) &= \begin{pmatrix} e^{ik} \cos \frac{\theta_1}{2} \cos \frac{\theta_2}{2} - \sin \frac{\theta_1}{2} \sin \frac{\theta_2}{2} & -e^{ik} \sin \frac{\theta_1}{2} \cos \frac{\theta_2}{2} - \cos \frac{\theta_1}{2} \sin \frac{\theta_2}{2} \\ \cos \frac{\theta_1}{2} \sin \frac{\theta_2}{2} + e^{-ik} \sin \frac{\theta_1}{2} \cos \frac{\theta_2}{2} & -\sin \frac{\theta_1}{2} \sin \frac{\theta_2}{2} + e^{-ik} \cos \frac{\theta_1}{2} \cos \frac{\theta_2}{2} \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Damit sind die Gleichungen (18) und (19) bestimmt:

$$n_x = \frac{\sin k \cdot \sin \frac{\theta_1}{2} \cdot \cos \frac{\theta_2}{2}}{\sin E_{\theta_1, \theta_2}(k)} \quad (20)$$

$$n_y = \frac{\cos \frac{\theta_1}{2} \cdot \sin \frac{\theta_2}{2} + \cos k \cdot \sin \frac{\theta_1}{2} \cdot \cos \frac{\theta_2}{2}}{\sin E_{\theta_1, \theta_2}(k)} \quad (21)$$

$$n_z = -\frac{\sin k \cdot \cos \frac{\theta_1}{2} \cdot \cos \frac{\theta_2}{2}}{\sin E_{\theta_1, \theta_2}(k)} \quad (22)$$

$$\begin{aligned} \cos(E_{\theta_1, \theta_2}(k)) &= \cos k \cdot \cos \frac{\theta_1}{2} \cdot \cos \frac{\theta_2}{2} - \sin \frac{\theta_1}{2} \cdot \sin \frac{\theta_2}{2} \\ E_{\theta_1, \theta_2}(k) &= \pm \arccos \left[\cos k \cdot \cos \frac{\theta_1}{2} \cdot \cos \frac{\theta_2}{2} - \sin \frac{\theta_1}{2} \cdot \sin \frac{\theta_2}{2} \right] \end{aligned} \quad (23)$$

Für die Energie gilt $E_{\theta_1, \theta_2}(k) \in [-\pi, \pi]$.

Nun werden zunächst die Bedingungen zum Schließen der Bandlücke bestimmt:

Die anwesenden Symmetrien stellen sicher, dass ein Schließen der Bandlücke nur für Energien $E = n \cdot \pi$ mit $n \in \mathbb{Z}$ möglich ist (Siehe hierzu Kap. 3.3 und Abb. 7).

Betrachtet man Gleichung (23) ist dies nur für $k = 0, n \cdot \pi$ mit $n \in \mathbb{Z}$ möglich. Da E eine gerade Funktion in k ist, beschränken wir uns auf $k = 0, \pi$. Unter verwendung des Additionstheorems $\cos(x \pm y) = \cos x \cos y \mp \sin x \sin y$ erhält man:

$$\begin{aligned} E_{\theta_1, \theta_2}(k=0) &= \pm \arccos \left[\cos \left(\frac{\theta_1}{2} + \frac{\theta_2}{2} \right) \right] \\ E_{\theta_1, \theta_2}(k=\pi) &= \pm \arccos \left[-\cos \left(\frac{\theta_1}{2} - \frac{\theta_2}{2} \right) \right] \end{aligned}$$

Bedingung zum Schließen der Energielücke bei $E = \pi$:

$$\begin{aligned} \underline{k=0:} \\ -1 &\stackrel{!}{=} \cos \left(\frac{\theta_1}{2} + \frac{\theta_2}{2} \right) \\ \Rightarrow \theta_1 + \theta_2 &= \pm 2\pi \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \underline{k=\pm\pi:} \\ -1 &\stackrel{!}{=} -\cos \left(\frac{\theta_1}{2} - \frac{\theta_2}{2} \right) \\ \Rightarrow \theta_1 - \theta_2 &= 0 \end{aligned}$$

Bedingung zum schließen der Energielücke bei $E = 0$:

$$\begin{aligned} \underline{k=0:} \\ 1 &\stackrel{!}{=} \cos \left(\frac{\theta_1}{2} + \frac{\theta_2}{2} \right) \\ \Rightarrow \theta_1 + \theta_2 &= 0 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \underline{k=\pm\pi:} \\ 1 &\stackrel{!}{=} -\cos \left(\frac{\theta_1}{2} - \frac{\theta_2}{2} \right) \\ \Rightarrow \theta_1 - \theta_2 &= \pm 2\pi \end{aligned}$$

Die Bedingungen an θ_1, θ_2 für das Schließen der Bandlücke stimmen mit den von Demler et. al. bestimmten Bedingungen überein (vgl. Abb. 9).

Abbildung (7) zeigt die Bandstruktur für drei Systeme. Davon besitzt ein System die Parameter $-\theta_1 = \theta_2 = \frac{\pi}{2}$. Nach obiger Rechnung gilt, dass die Bandlücke bei $E = k = 0$ schließt, wie es auch in der Abbildung zu erkennen ist.

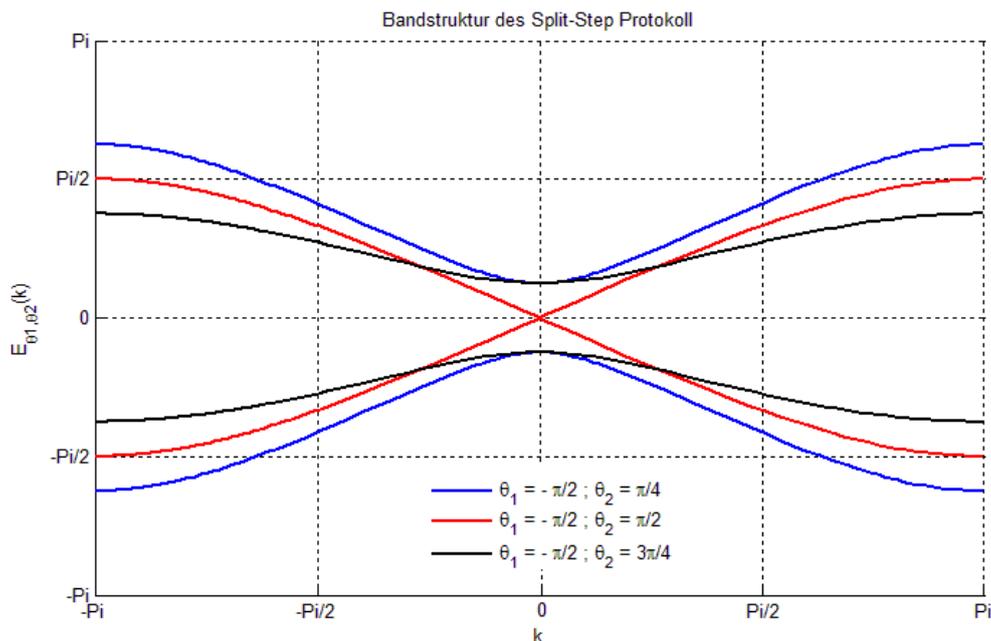


Abbildung 7: Die Symmetrie der Bandstruktur wird garantiert durch TRS ($E_{\theta_1, \theta_2}(-k) = E_{\theta_1, \theta_2}(k)$) und PHS ($E_{\theta_1, \theta_2}^{-1}(-y) = E_{\theta_1, \theta_2}^{-1}(y)$) (vgl. Kap.3.3)

3.3 Topologische Klassifizierung STQW

3.3.1 Particle-Hole-Symmetry

Die Teilchen-Loch Symmetrie wird durch den komplexen Konjugations Operator erfüllt. Beachte man hierzu, dass der Zeitentwicklungsoperator im Ortsraum reell ist, folgt damit:

$$\begin{aligned}
 KU_{ss}K^{-1} &= K \exp(-i\mathcal{H}_{ss}) K^{-1} \\
 &= \exp(i\mathcal{H}_{ss}^*) \\
 &\stackrel{!}{=} \exp(-i\mathcal{H}_{ss}) \\
 \Rightarrow K\mathcal{H}_{ss}K^{-1} &= -\mathcal{H}_{ss} \\
 \Rightarrow \mathcal{P} &= K \\
 \mathcal{P}^2 &= +1
 \end{aligned}$$

3.3.2 Chiral-Symmetry

Die Chiral Symmetrie wird durch den Operator

$$\begin{aligned}\Gamma &= \exp\left(-i\frac{\pi}{2}\vec{B}_{\theta_1}\cdot\vec{\sigma}\right) \stackrel{(14)}{=} \mathbb{1}\cos\frac{\pi}{2} - i\vec{B}_{\theta_1}\cdot\vec{\sigma}\sin\frac{\pi}{2} = -i\vec{B}_{\theta_1}\cdot\vec{\sigma} \\ \Gamma^{-1} &= \Gamma^\dagger = i\vec{B}_{\theta_1}\cdot\vec{\sigma}\end{aligned}\quad (24)$$

mit :

$$\vec{B}_{\theta_1} = \left(\cos\frac{\theta_1}{2} \quad 0 \quad \sin\frac{\theta_1}{2}\right)^t \quad (25)$$

$$|\vec{B}_{\theta_1}| = 1 \quad (26)$$

erfüllt, wobei \vec{B}_{θ_1} senkrecht zu dem in Kap. 3.2 bestimmten Vektor \vec{n}_L (20)-(22) steht:

$$\vec{B}_{\theta_1}\cdot\vec{n}_L = \cos\frac{\theta_1}{2}\cdot\frac{\sin k\cdot\sin\frac{\theta_1}{2}\cdot\cos\frac{\theta_2}{2}}{\sin E_{\theta_1,\theta_2}(k)} + \sin\frac{\theta_1}{2}\cdot\frac{-\sin k\cdot\cos\frac{\theta_1}{2}\cdot\cos\frac{\theta_2}{2}}{\sin E_{\theta_1,\theta_2}(k)} = 0 \quad (27)$$

Nun wird gezeigt, dass \mathcal{H}_{ss} mit Γ die Chiral Symmetrie erfüllt. Dazu sind folgende zwei Identitäten notwendig:

$$\begin{aligned}(\vec{n}_L\cdot\vec{\sigma})(\vec{B}_{\theta_1}\cdot\vec{\sigma}) &= \sum_{ij}n_iB_j\sigma_i\sigma_j \stackrel{(17)}{=} \sum_{ij}n_iB_j\left(\mathbb{1}\delta_{ij} + i\sum_k\epsilon_{ijk}\sigma_k\right) \\ &= \vec{n}_{\theta_1}\cdot\vec{B}_L + i(\vec{n}_{\theta_1}\times\vec{B}_L)\cdot\vec{\sigma} \stackrel{(27)}{=} -i(\vec{B}_L\times\vec{n}_{\theta_1})\cdot\vec{\sigma}\end{aligned}\quad (28)$$

$$\begin{aligned}(\vec{B}_{\theta_1}\cdot\vec{\sigma})(\vec{B}_{\theta_1}\times\vec{n}_L)\cdot\vec{\sigma} &= \sum_{ijkm}\epsilon_{ijk}B_mB_in_j\sigma_m\sigma_k = \sum_{ijkm}\epsilon_{ijk}B_mB_in_j\left(\mathbb{1}\delta_{mk} + i\sum_\alpha\epsilon_{mk\alpha}\sigma_\alpha\right) \\ &= \underbrace{\mathbb{1}\vec{B}_{\theta_1}\cdot(\vec{B}_{\theta_1}\times\vec{n}_L)}_{=0} - i\sum_{\alpha ijm}B_mB_in_j\sigma_\alpha \underbrace{\left(\sum_k\epsilon_{ijk}\epsilon_{mk\alpha}\right)}_{=\delta_{im}\delta_{j\alpha}-\delta_{i\alpha}\delta_{jm}} \\ &= i\underbrace{\sum_jB_jn_j}_{\stackrel{(27)}{=}0}\sum_iB_i\sigma_i - i\underbrace{\sum_iB_iB_i}_{\stackrel{(26)}{=}1}\sum_jn_j\sigma_j \\ &= -i\vec{n}_L\cdot\vec{\sigma}\end{aligned}\quad (29)$$

Damit folgt die Chiral Symmetrie:

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_{ss} &\stackrel{11}{=} \int_{-\pi}^{\pi} dk E_{\theta_1,\theta_2}(k) [\vec{n}_L(k,\theta_1,\theta_2)\cdot\vec{\sigma}] \otimes |k\rangle\langle k| \\ \Rightarrow \Gamma^{-1}\mathcal{H}_{ss}\Gamma &\stackrel{(24)}{=} \int_{-\pi}^{\pi} dk E_{\theta_1,\theta_2}(k) \left[(\vec{B}_{\theta_1}\cdot\vec{\sigma})(\vec{n}_L\cdot\vec{\sigma})(\vec{B}_{\theta_1}\cdot\vec{\sigma})\right] \otimes |k\rangle\langle k| \\ &\stackrel{28}{=} -i\int_{-\pi}^{\pi} dk E_{\theta_1,\theta_2}(k) \left[(\vec{B}_{\theta_1}\cdot\vec{\sigma})(\vec{B}_L\times\vec{n}_{\theta_1})\cdot\vec{\sigma}\right] \otimes |k\rangle\langle k| \\ &\stackrel{29}{=} -\int_{-\pi}^{\pi} dk E_{\theta_1,\theta_2}(k) [\vec{n}_L\cdot\vec{\sigma}] \otimes |k\rangle\langle k| \\ &= -\mathcal{H}_{ss}\end{aligned}$$

So ist die Chiral Symmetrie für das Split-Step Protokoll mit Γ aus Gleichung 24 erfüllt:

$$\Gamma^{-1}\mathcal{H}_{ss}\Gamma = -\mathcal{H}_{ss}$$

Die geometrische kann dies durch die Rotation des Hamiltonoperators um Winkel π und \perp zu \vec{n}_L interpretiert werden. (siehe Abb. 8)

3.3.3 Time-Reversal Symmetrie

Die Time-Reversal Symmetrie wird bei Existenz der CS und PHS durch $\mathcal{T} = \Gamma\mathcal{P}$ garantiert.

$$\mathcal{T}\mathcal{H}_{ss}\mathcal{T}^{-1} = \Gamma\mathcal{P}\mathcal{H}_{ss}\mathcal{P}^{-1}\Gamma^{-1} = -\Gamma\mathcal{H}_{ss}\Gamma^{-1} = \mathcal{H}_{ss}$$

$$\mathcal{T}^2 = \Gamma\mathcal{P}\Gamma\mathcal{P} = \Gamma K\Gamma K \stackrel{K=K^{-1}}{=} \Gamma K\Gamma K^{-1} \stackrel{B_{\theta_1, y=0} \Rightarrow \Gamma^* = -\Gamma}{=} \Gamma(-\Gamma) \stackrel{-\Gamma \equiv \Gamma^{-1}}{=} \Gamma\Gamma^{-1} = +\mathbb{1}$$

3.3.4 Symmetrieklasse STQW

Das System gehört zur Symmetrieklasse mit der Eigenschaft $\mathcal{T}^2 = \mathcal{P}^2 = +\mathbb{1}$ und wird somit durch eine topologisch invariante Größe $n_t \in \mathbb{Z}$ charakterisiert. Diese wird im folgenden Unterabschnitt erläutert.

3.4 Phasendiagramm / Winding Number

Dieser Abschnitt orientiert sich an den Ergebnissen aus [8].

Gleichung 27 zeigt das der Vektor \vec{n}_L (Gleichung 20-22) senkrecht zu \vec{B}_{θ_1} (Gleichung 25) $\forall k \in [-\pi, \pi]$ und $\forall \theta_2 \in [-2\pi, 2\pi]$ steht. Damit liegt \vec{n}_L stets in der Ebene definiert durch B_{θ_1} . Die topologisch invariante Größe ist durch die Windungszahl n_t von \vec{n}_L um den Ursprung beim Durchfahren von k durch die Brillouin-Zone gegeben (vgl. Abb. 8). Das $n_t \in \mathbb{Z}$ wird durch $n_L(k + 2\pi, \theta_1, \theta_2) = n_L(k, \theta_1, \theta_2)$ garantiert.

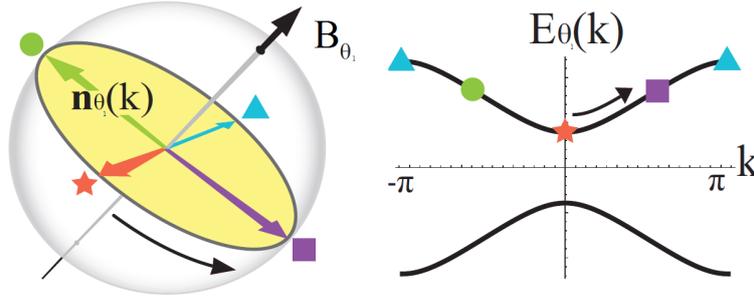


Abbildung 8: Beispiel mit winding number $n_t = 1$, es ist zu erkennen wie \vec{n}_L sich beim durchfahren von k einmal in der Ebene \vec{B}_{θ_1} um den Ursprung dreht. Abbildung entnommen aus [8]

Für das Split-Step Protokoll treten in Abhängigkeit von θ_1, θ_2 zwei Phasen mit den Windungszahlen $n_t = 0$ und $n_t = 1$ auf. Dabei bilden die Wertebereiche von θ_1 und θ_2 für eine Phase geschlossene Flächen. An der Phasengrenze wird die Bandlücke geschlossen und die Bereiche einer Phase werden durch die in Kap. 3.2 bestimmten Gleichungen begrenzt (vgl. Abb. 9).

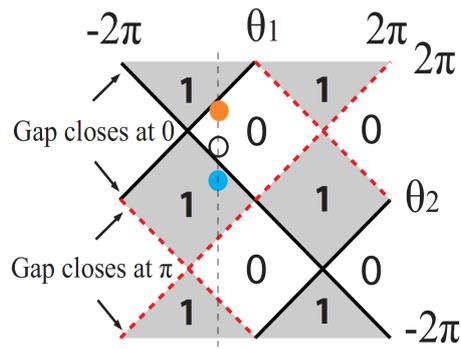


Abbildung 9: Phasendiagramm in Abhängigkeit von θ_1 und θ_2 , die grauen Flächen zeigen die Bereiche mit Windungszahl 1 und die weißen mit 0 an. Die Bereiche werden getrennt durch die Geraden, bei denen die Bandlücke geschlossen wird.

Die drei Punkte beziehen sich auf Kap. 4.1/4.2 und legen die Werte Weiß $\theta_1 = -\frac{\pi}{2}; \theta_{2-} = \frac{3\pi}{4}$ Blau $\theta_1 = -\frac{\pi}{2}; \theta_{2+} = \frac{\pi}{4}$ und Orange $\theta_1 = -\frac{\pi}{2}; \theta_{2+} = \frac{11\pi}{8}$ fest.

Abbildung entnommen aus [8]

4 Realisierung eines nicht trivialen topologischen Isolator mit Hilfe des Split-Step Protokoll

4.1 Erzeugung eines Systems mit zwei Phasen

Das Ziel ist die Erzeugung eines Systems bestehend aus zwei Phasen (topologischer Isolator $n_t = 1$ und trivialer Isolator $n_t = 0$), mit einem an der Phasengrenze auftretenden Randzustand des topologischen Isolators. Dieses System ist nicht mehr translations invariant, dennoch sollen die Symmetrieeigenschaften des Hamilton erhalten bleiben. Nach Kapitel 3.3.2 wird die Chiral Symmetrie durch den Winkel θ_1 festgelegt. Wählt man den Winkel θ_2 ortsabhängig, bleibt der Zeitentwicklungsoperator im Ortsraum reell und damit ist die Particle-Hole Symmetrie weiterhin durch komplexe Konjugation erfüllt. (Die Zeitumkehrsymmetrie wird durch die Anwesenheit erster beiden Symmetrien garantiert.) Somit steht der Winkel θ_2 als Systemparameter zur Verfügung.

Das System wird so konstruiert, dass es für $x \ll 0$ durch die festen Parametern (θ_1, θ_{2-}) mit Phase A und für $x \gg 0$ mit (θ_1, θ_{2+}) sowie anderer Phase $B \neq A$ beschrieben wird. Weiter soll sich der Winkel θ_2 monoton mit dem Ort x ändern.

Hierzu wurde in [8] folgende Funktion gewählt:

$$\theta_2(x) = \frac{1}{2}(\theta_{2+} + \theta_{2-}) + \frac{1}{2}(\theta_{2+} - \theta_{2-}) \tanh \frac{x}{\xi} \quad (30)$$

wobei der Parameter ξ zusätzlich eingebaut wurde. Dieser bestimmt die Ausdehnung des Übergangs und wird daher als charakteristische Breite bezeichnet. Hierbei gilt: Je größer ξ , desto breiter der Übergangsbereich.

4.2 Gebundener Zustand an Phasengrenze

In der Nähe der Phasengrenze ist die Existenz eines gebundenen Zustands (mit Energie $E = 0; \pi$) unabhängig lokaler Parameter und wird durch topologischen Eigenschaften des topologischen Isolators garantiert.

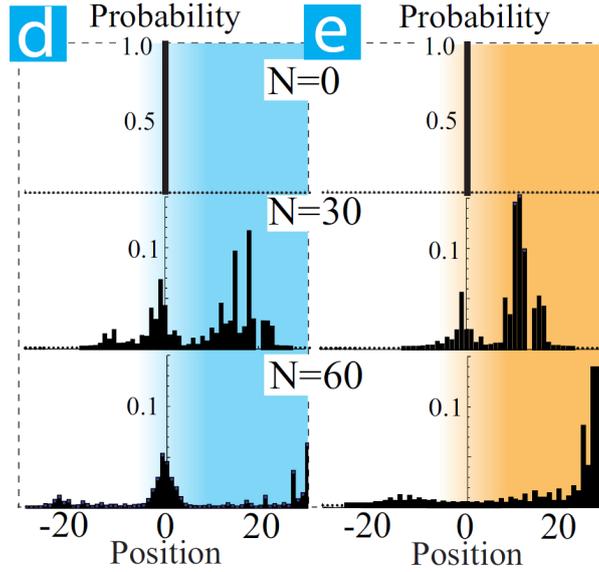


Abbildung 10: Zeitentwicklung eines zum Zeitpunkt $t = 0$ bei $x = 0$ mit Spin up positionierten Teilchens, in einem System mit den Parametern Weiß $\theta_1 = -\frac{\pi}{2}$; $\theta_{2-} = \frac{3\pi}{4}$ Blau $\theta_1 = -\frac{\pi}{2}$; $\theta_{2+} = \frac{\pi}{4}$ und Orange $\theta_1 = -\frac{\pi}{2}$; $\theta_{2+} = \frac{11\pi}{8}$ (vgl. Abb. 9).

Links (d): Das System besteht aus zwei Phasen, die topologischen Eigenschaften garantieren einen gebundenen Zustand an der Phasengrenze, mit dem der Anfangszustand einen nicht verschwindenden Überlap besitzt. Über die Zeitentwicklung hinweg erkennt man eine um $x=0$ lokalisierte Wahrscheinlichkeitsverteilung.

Rechts (e): Das System besteht aus einer Phase $Z=0$, somit liegt kein topologisch geschützter gebundener Zustand um $x = 0$ vor. Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit läuft nach links und rechts raus.

Abbildung entnommen aus [8].

Als Probe für die Existenz des gebundenen Zustands kann ein Teilchen an der Phasengrenze so platziert werden, dass es einen nicht verschwindenden Überlap besitzt und in der Zeit entwickelt werden. Es sollte eine um die Phasengrenze lokalisierte Aufenthaltswahrscheinlichkeit zu beobachten sein. (vgl Abb. 10-d).

4.3 Berechnung des gebunden Zustands

Die analytische Berechnung des geb. Zustands wurde von Jan Gelhausen in seiner Bachelorarbeit [6] durchgeführt und zeigt eine gute Übereinstimmung mit der numerischen Realisierung des Protokolls (vgl. Abb. 11). Die folgende Berechnung des geb. Zustands ist durch die Rechnung von Jan Gelhausen motiviert.

Der Einfachheit halber wird $\theta_{2\pm}$ symmetrisch um die Phasengrenze gewählt mit $\theta_{2\pm} \in (-\frac{\pi}{2}, \frac{3\pi}{2}) \setminus \{\frac{\pi}{2}\}$ und $\theta_2 = \frac{1}{2}(\theta_{2+} + \theta_{2-}) \stackrel{!}{=} \frac{\pi}{2}$. Damit die Phasengrenze bei $x = 0$ liegt und die Bandlücke bei Energie $E = k = 0$ schließt wird $\theta_1 = -\frac{\pi}{2}$ gesetzt.

Der Ausgangspunkt ist der um die Phasengrenze ($k = 0, \theta_2 = \frac{\pi}{2}$) entwickelte Bulk-Hamilton:

$$\mathcal{H}_{bulk} = -\frac{k}{2}(\sigma_x + \sigma_z) + \left(\frac{\theta_2(x)}{2} - \frac{\pi}{4}\right)\sigma_y \quad (31)$$

Stellt man die Dirac-Gleichung auf und beachtet, dass für den gebundenen Zustand gilt $E = 0$, folgt

$$\begin{aligned}
\mathcal{H}_{bulk} \vec{\Psi}(x) &= E \vec{\Psi}(x) \stackrel{E=0}{=} 0 \\
\Rightarrow 0 &= \left[\frac{i}{2} (\sigma_x + \sigma_z) \partial_x + \left(\frac{\theta_2(x)}{2} - \frac{\pi}{4} \right) \sigma_y \right] \vec{\Psi}(x) \\
\Leftrightarrow 0 &= \left[\mathbf{1} \partial_x - 2i (\sigma_x + \sigma_z)^{-1} \sigma_y \underbrace{\left(\frac{\theta_2(x)}{2} - \frac{\pi}{4} \right)}_{q(x)} \right] \vec{\Psi}(x) \\
&= [\mathbf{1} \partial_x - i (\sigma_x + \sigma_z) \sigma_y \cdot q(x)] \vec{\Psi}(x) \\
&= [\mathbf{1} \partial_x + (-\sigma_x + \sigma_z) \cdot q(x)] \vec{\Psi}(x) \\
&= \left[\mathbf{1} \partial_x + \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ -1 & -1 \end{pmatrix} \cdot q(x) \right] \vec{\Psi}(x)
\end{aligned}$$

Mit dem Lösungsansatz $\vec{\Psi}(x) = e^{\lambda(x)} \vec{a}$ erhält man

$$(-\sigma_x + \sigma_z) \vec{a} = \left(\frac{1}{q(x)} \partial_x \lambda(x) \right) \vec{a} = \gamma \vec{a} \quad (32)$$

Die Eigenvektoren und Eigenwerte zur Matrix $(-\sigma_x + \sigma_z)$ lauten

$$\begin{aligned}
\vec{a}_- &= \begin{pmatrix} \sqrt{2} - 1 \\ 1 \end{pmatrix} & \vec{a}_+ &= \begin{pmatrix} -\sqrt{2} - 1 \\ 1 \end{pmatrix} \\
\gamma_- &= -\sqrt{2} & \gamma_+ &= \sqrt{2}
\end{aligned}$$

Nach Integration von Gleichung 32 erhält man

$$\begin{aligned}
\lambda(x)_\pm &= \pm \sqrt{2} \int_0^x q(x') dx' + \underbrace{\kappa}_{const} \\
\stackrel{(30)}{=} & \mp \frac{\theta_{2+} - \theta_{2-}}{2\sqrt{2}} \int_0^x \tanh\left(\frac{x'}{\xi}\right) dx' + \kappa_\pm \\
&= \mp \xi \frac{\theta_{2+} - \theta_{2-}}{2\sqrt{2}} \ln\left(\cosh \frac{x}{\xi}\right) + \kappa_\pm
\end{aligned}$$

(Stammfunktion aus [10] entnommen). Die Allgemeine Lösung lautet:

$$\vec{\Psi}(x) = \vec{a}_- e^{\lambda_-(x)} + \vec{a}_+ e^{\lambda_+(x)}$$

Die normierbarkeits Bedingung $\lim_{x \rightarrow \pm\infty} |\Psi(x)| < \infty$ schränkt abhängig der Wahl von θ_{2+} u. θ_{2-} die Lösung auf \vec{a}_- oder \vec{a}_+ ein.

Als Lösung des gebundenen Zustand's folgt:

$$\Psi_\pm(x) = \mathcal{N} \begin{pmatrix} \mp \sqrt{2} - 1 \\ 1 \end{pmatrix} \cosh\left(\frac{x}{\xi}\right)^{\mp \xi \frac{\theta_{2+} - \theta_{2-}}{2\sqrt{2}}}$$

mit :

$$\Psi_+ \quad \forall \quad \theta_{2+} - \theta_{2-} > 0$$

$$\Psi_- \quad \forall \quad \theta_{2+} - \theta_{2-} < 0$$

Weiter ist zu erwähnen, dass es sich hier um eine Näherungslösung handelt, da der Hamilton um $k = 0$ und $\theta_2 = \frac{\pi}{2}$ entwickelt wurde. Daher stimmt die hier bestimmte Lösung des geb. Zustands umso besser mit der tatsächlichen überein, je näher $\theta_{2\pm}$ an $\frac{\pi}{2}$ gewählt werden. (vgl. Abb. 11)

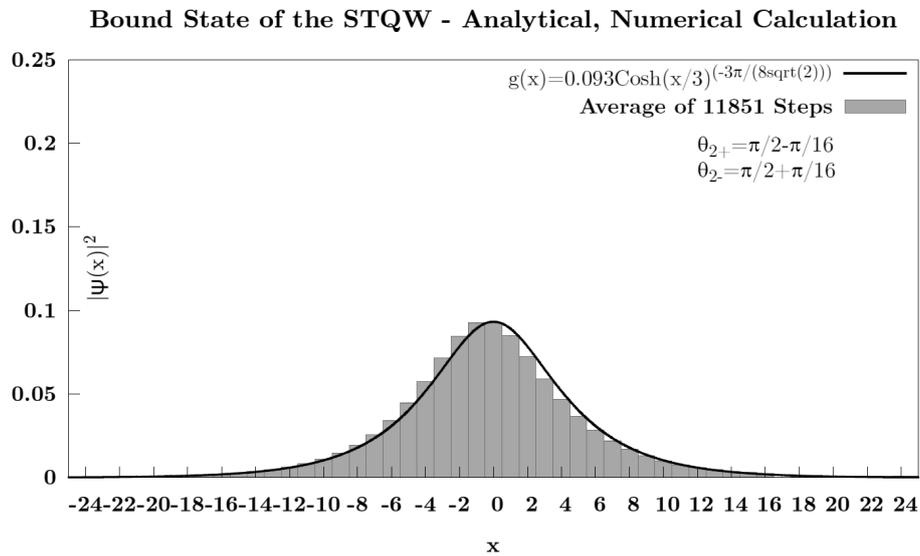


Abbildung 11: Der Vergleich zwischen numerisch und analytisch bestimmten gebundenen Zustand zeigt eine gute Übereinstimmung.
Abbildung entnommen aus [6]

5 Zerfallsrate des gebundenen Zustands für zeitabhängige Störung

5.1 Numerische Ergebnisse von Jan Gelhausen

Jan Gelhausen untersuchte in seiner Bachelorarbeit [6] die Einflüsse von statischer und zeitabhängiger Störung (in dem Parameter θ_2) auf den gebundenen Zustand.

5.1.1 Statische Unordnung (Energieerhaltung)

Das STQW-Protokoll wird in der $\theta_2(x)$ Winkelfunktion ortsabhängig gestört. Die neue Winkelfunktion ergibt sich nach:

$$\tilde{\theta}_2(x) = \theta_2(x) + \delta \cdot y(x)$$

Wobei $y(x)$ eine unkorrelierte Zufallsvariable ist, die durch folgende symmetrische Boxverteilung festgelegt wird.

$$\rho(z) = \begin{cases} \frac{1}{2} & : -1 \leq z \leq 1 \\ 0 & : \text{sonst} \end{cases}$$

Die Werte $y(x)$ werden für jede Realisierung neu ausgewürfelt. (vgl. Abb. 12)

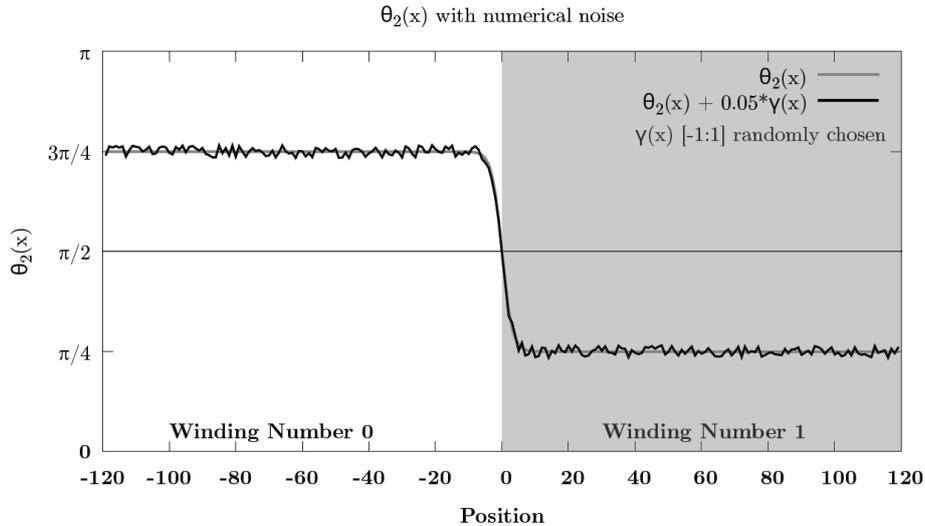


Abbildung 12: Es ist eine mögliche Realisierung einer gestörten Ort-Winkelfunktion zu sehen. Die Funktionsparameter sind $\theta_{2+} = \frac{\pi}{4}$; $\theta_{2-} = \frac{3\pi}{4}$ und $\delta = 0.05$.

Es ist zu erkennen, dass bei kleiner Störung die Phasengrenze nur geringfügig verschoben wird. Abbildung entnommen aus [6]

Trotz Störung befindet sich weiterhin die Phasengrenze in der Umgebung von $x = 0$. Die Existenz eines gebundenen Zustands wird durch die topologischen Eigenschaften garantiert und hängt nicht von einzelnen Details der Phasengrenze ab. Daher erwartet man, dass der gebundene Zustand stabil gegen zeitunabhängige Störung ist. Diese Erwartung konnte von Jan Gelhausen durch numerische Analyse bestätigt werden. (vgl. Abb. 13)

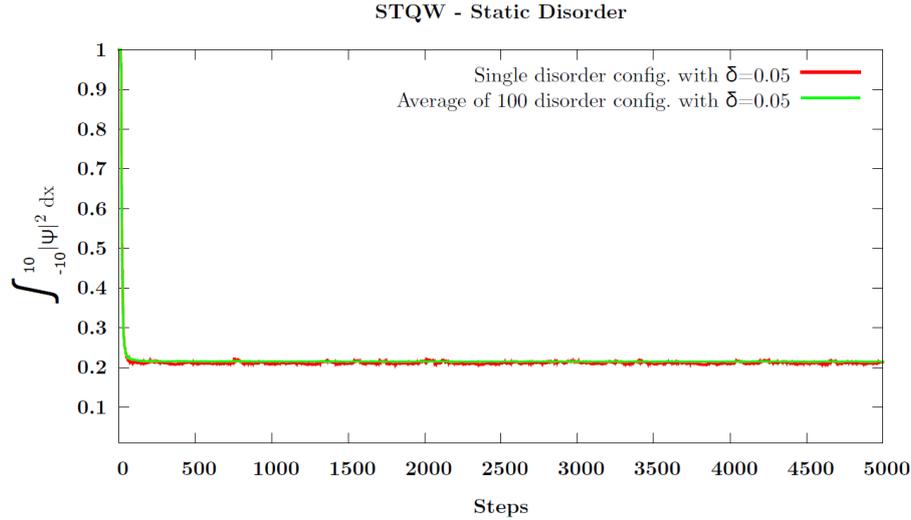


Abbildung 13: Als Anfangszustand wurde jeweils ein Teilchen mit Spin up bei $x = 0$ platziert. In der Abbildung ist erkennbar, dass der geb. Zustand resistent gegen statische Unordnung ist. Somit decken sich numerische Ergebnisse mit der theoretischen Erwartung.

Abbildung entnommen aus [6]

5.1.2 Zeitabhängige Unordnung (keine Energieerhaltung)

Das STQW-Protokoll wird in der $\theta_2(x)$ Winkelfunktion ortsabhängig und für jeden Zeitschritt durch eine neue statistisch unabhängige Verteilung gestört. Die neue Winkelfunktion ergibt sich nach:

$$\tilde{\theta}_2(x) = \theta_2(x) + \delta \cdot y(x, t)$$

wobei $y(x)$ eine unkorrelierte Zufallsvariable $\in [-1; 1]$ ist, die durch folgende symmetrische Boxverteilung festgelegt wird.

$$\rho(z) = \begin{cases} \frac{1}{2} & : -1 \leq z \leq 1 \\ 0 & : \text{sonst} \end{cases}$$

Bei zeitabhängiger Störung liegt keine Energieerhaltung vor und man erwartet daher, dass der gebundene Zustand zerfällt. Jan Gelhausen zeigte, dass der Zerfall zunächst exponentiell stattfindet und nach einer Zeit, abhängig der Störungsstärke, durch diffusives Verhalten beschrieben werden kann.

Eine numerische Analyse der Abhängigkeit zwischen Zerfallskonstante Γ und Störstärke δ zeigte in führender Ordnung ein quadratisches Verhalten $\Gamma = a\delta^2 + \mathcal{O}(\delta^3)$. (vgl Abb. 14)

In dieser Bachelorarbeit wird ein analytischer Ausdruck für die führende Ordnung $a\delta^2$ der Zerfallskonstante bestimmt.

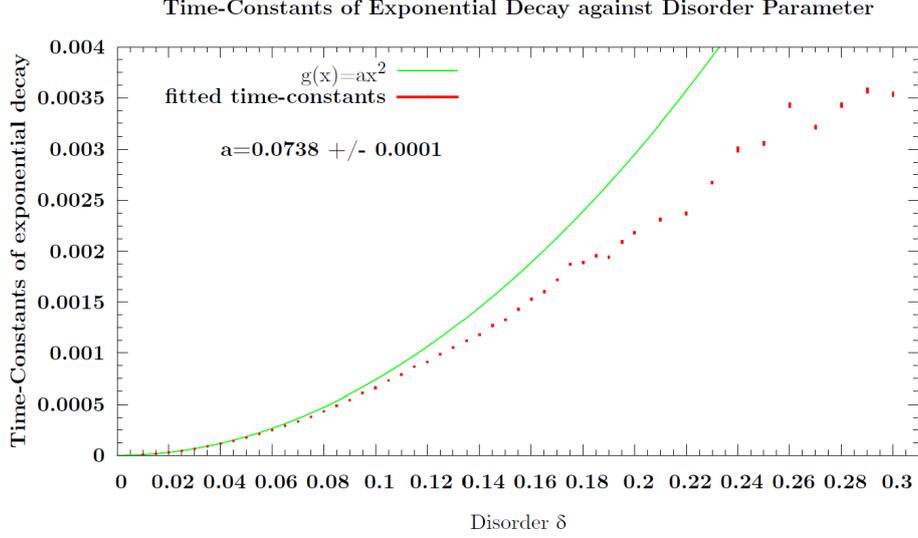


Abbildung 14: Abbildung entnommen aus [6]

5.2 Herleitung der Zerfallsrate. (Fermis goldene Regel)

Das Quantum-Walk Protokoll wird in der Koordinate Θ_2 für jeden Ort und Zeitschritt gestört $\Rightarrow \tilde{\Theta}_2(x, t) = \Theta_2(x) + \delta \cdot y(x, t)$. Da die unitären Transformationen stroboskopartig wirken gilt $t = j \cdot \Delta t$. Folgend wird zur Vereinfachung der Zeitschritt im Index notiert $a(t = j \cdot \Delta t) \equiv a_j$ und $\hbar = \Delta t = 1$ gesetzt.

Zur Bestimmung der Übergangsrates wird $\tilde{U} = T_{\downarrow} R(\tilde{\Theta}_2) T_{\uparrow} R(\Theta_1)$ bis zur ersten Ordnung in der Störung δ entwickelt und folgender Ansatz gewählt:

$$\begin{aligned}
 |\psi_j\rangle &= \tilde{U} |\psi_0\rangle = \prod_{k=j}^1 \tilde{U}_k |\psi_0\rangle \stackrel{!}{=} \sum_m \alpha_j^m |m\rangle e^{-i\varepsilon_m j} \\
 \tilde{U}_k &= U + S_k + \mathcal{O}(\delta^2)
 \end{aligned} \tag{33}$$

Mit $|m\rangle$ Eigenzustand und ε_m Eigenenergie des ungestörten Protokoll:

$$U |m\rangle = e^{-i\varepsilon_m} |m\rangle \tag{34}$$

Unter Vernachlässigung von Rückstreuung ($\overline{P}_{m \rightarrow n} = 0$) ergibt sich die gemittelte Zerfallsrate des Zustand $|n\rangle$ nach:

$$\frac{1 - \exp(-\overline{\Gamma}t)}{t} \approx \frac{1 - 1 + \overline{\Gamma}t}{t} = \overline{\Gamma} = \frac{\sum_{m \neq n} \overline{P}_{n \rightarrow m}}{t} = \frac{\sum_{m \neq n} |\overline{\alpha_j^m}|^2}{j}$$

Zunächst wird \tilde{U} erster Ordnung in δ entwickelt

$$\begin{aligned}
\tilde{U}_k &= T_\downarrow R(\tilde{\Theta}_{2,k}(x)) T_\uparrow R(\Theta_1) = T_\downarrow R(\delta \cdot y_k(x)) R(\Theta_2(x)) T_\uparrow R(\Theta_1) \\
&= T_\downarrow \left(\mathbf{1} - \delta \sum_x y_k^x \frac{i}{2} |x\rangle \langle x| \otimes \sigma_2 \right) R(\Theta_2(x)) T_\uparrow R(\Theta_1) + \mathcal{O}(\delta^2) \\
&= U + S_k + \mathcal{O}(\delta^2) \\
S_k &:= -T_\downarrow \delta \left(\sum_x \frac{y_k^x}{2} |x\rangle \langle x| \otimes i\sigma_2 \right) R(\Theta_2(x)) T_\uparrow R(\Theta_1) \\
&= -\delta \left(\sum_x \frac{y_k^x}{2} T_\downarrow |x\rangle \langle x| \otimes i\sigma_2 \right) \underbrace{T_\downarrow^{-1} T_\downarrow}_{\mathbf{1}} R(\Theta_2(x)) T_\uparrow R(\Theta_1) \\
&= -\delta \sum_x \frac{y_k^x}{2} \underbrace{T_\downarrow (|x\rangle \langle x| \otimes i\sigma_2) T_\downarrow^{-1}}_{M_x} U \\
&= -\delta \sum_x \frac{y_k^x}{2} M_x U
\end{aligned} \tag{35}$$

Die Matrix M_x hat folgende Eigenschaften:

$$(M_x)_{ab} \in \mathbb{R} \tag{36}$$

$$M_x^\dagger = -M_x \tag{37}$$

$$\sum_x M_x M_x = -\mathbf{1} \tag{38}$$

mit

$$|n\rangle = \sum_x |x\rangle \otimes (c_{n,x}^\uparrow |\uparrow\rangle + c_{n,x}^\downarrow |\downarrow\rangle) \tag{39}$$

$$\langle 0| M_x |0\rangle = 0 \text{ falls } c_{0,x}^{\uparrow/\downarrow} \in \mathbb{R} \tag{40}$$

Beweis:

$$\begin{aligned}
M_x^\dagger &= \left(T_\downarrow (|x\rangle \langle x| \otimes i\sigma_2) T_\downarrow^{-1} \right)^\dagger = \left(T_\downarrow^{-1} \right)^\dagger (|x\rangle \langle x| \otimes i\sigma_2)^\dagger T_\downarrow^\dagger = T_\downarrow (|x\rangle \langle x| \otimes -i\sigma_2) T_\downarrow^{-1} \\
&= -M_x \\
M_x &= T_\downarrow (|x\rangle \langle x| \otimes i\sigma_2) T_\downarrow^{-1} = T_\downarrow [|x\rangle \langle x| \otimes (|\uparrow\rangle \langle \downarrow| - |\downarrow\rangle \langle \uparrow|)] T_\downarrow^{-1} \\
&= \left[\sum_{x'} (|x' - 1\rangle \langle x'| \otimes |\downarrow\rangle \langle \downarrow| + |x'\rangle \langle x'| \otimes |\uparrow\rangle \langle \uparrow|) \right] [|x\rangle \langle x| \otimes (|\uparrow\rangle \langle \downarrow| - |\downarrow\rangle \langle \uparrow|)] T_\downarrow^{-1} \\
&= (-|x - 1\rangle \langle x| \otimes |\downarrow\rangle \langle \uparrow| + |x\rangle \langle x| \otimes |\uparrow\rangle \langle \downarrow|) T_\downarrow^{-1} \\
&= (-|x - 1\rangle \langle x| \otimes |\downarrow\rangle \langle \uparrow| + |x\rangle \langle x| \otimes |\uparrow\rangle \langle \downarrow|) \left[\sum_{x'} (|x'\rangle \langle x' - 1| \otimes |\downarrow\rangle \langle \downarrow| + |x'\rangle \langle x'| \otimes |\uparrow\rangle \langle \uparrow|) \right] \\
&= -|x - 1\rangle \langle x| \otimes |\downarrow\rangle \langle \uparrow| + |x\rangle \langle x - 1| \otimes |\uparrow\rangle \langle \downarrow| \\
M_x M_x &= (-|x - 1\rangle \langle x| \otimes |\downarrow\rangle \langle \uparrow| + |x\rangle \langle x - 1| \otimes |\uparrow\rangle \langle \downarrow|) (-|x - 1\rangle \langle x| \otimes |\downarrow\rangle \langle \uparrow| + |x\rangle \langle x - 1| \otimes |\uparrow\rangle \langle \downarrow|) \\
&= -|x - 1\rangle \langle x - 1| \otimes |\downarrow\rangle \langle \downarrow| - |x\rangle \langle x| \otimes |\uparrow\rangle \langle \uparrow| \\
\Rightarrow \sum_x M_x M_x &= -\mathbf{1}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
|n\rangle &= \sum_x |x\rangle \otimes (c_{n,x}^\uparrow |\uparrow\rangle + c_{n,x}^\downarrow |\downarrow\rangle) \\
\langle 0| M_x |0\rangle &= \langle 0| \sum_{x''} (-|x-1\rangle \langle x| \otimes |\downarrow\rangle \langle \uparrow| + |x\rangle \langle x-1| \otimes |\uparrow\rangle \langle \downarrow|) |x''\rangle \otimes (c_{0,x''}^\uparrow |\uparrow\rangle + c_{0,x''}^\downarrow |\downarrow\rangle) \\
&= \sum_{x'} \langle x'| \otimes (c_{0,x'}^{*\uparrow} \langle \uparrow| + c_{0,x'}^{*\downarrow} \langle \downarrow|) \left(-|x-1\rangle \otimes c_{0,x}^\uparrow |\downarrow\rangle + |x\rangle \otimes c_{0,x-1}^\downarrow |\uparrow\rangle \right) \\
&= c_{0,x}^{*\uparrow} c_{0,x-1}^\downarrow - c_{0,x}^\uparrow c_{0,x-1}^{*\downarrow} \\
&= 0 \text{ falls } c_{0,x}^{\uparrow/\downarrow} \in \mathbb{R}
\end{aligned}$$

Alternative Berechnung für $\langle 0| M_x |0\rangle = 0$. Sei K der komplexe Konjugationsoperator, so gilt:

$$\begin{aligned}
K|0\rangle &= |0\rangle \\
[K, M_x] &= 0 \\
\langle Kb|Ka\rangle &= \langle a|b\rangle \\
\langle 0| M_x |0\rangle &= \langle K0| M_x K|0\rangle = \langle K0| K(M_x|0\rangle) \\
&= \langle M_x 0|0\rangle = \langle 0| M_x^\dagger |0\rangle \\
&\stackrel{37}{=} -\langle 0| M_x |0\rangle \\
\Rightarrow \langle 0| M_x |0\rangle &= 0
\end{aligned}$$

Berechnung der Koeffizienten α_j^m : Hierzu sei $|\psi_0\rangle = |0\rangle$ der gebundene Zustand. Für den vollen Zeitentwicklungsoperator \check{U} gilt:

$$\begin{aligned}
\check{U} &= \prod_{k=j}^1 \tilde{U}_k = \prod_{k=j}^1 (U + S_k) + \mathcal{O}(\delta^2) \\
&= U^j + \sum_{k=0}^{j-1} U^k S_{j-k} U^{j-1-k} + \mathcal{O}(\delta^2) \\
&\stackrel{(35)}{=} U^j - \delta \sum_x \sum_{k=0}^{j-1} \frac{y_k^x}{2} U^k M_x U^{j-k} + \mathcal{O}(\delta^2) \tag{41}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\alpha_j^m &\stackrel{n \neq 0}{=} e^{i\varepsilon_m j} \langle m|\psi_j\rangle \stackrel{(33)(41)}{=} -\delta \sum_x \sum_{k=0}^{j-1} \frac{y_k^x}{2} e^{i\varepsilon_m j} \langle m| U^k M_x U^{j-k} |0\rangle + \mathcal{O}(\delta^2) \\
&\stackrel{\varepsilon_{ab} := \varepsilon_a - \varepsilon_b; (34)}{=} -\delta \sum_x \sum_{k=0}^{j-1} \frac{y_k^x}{2} \langle m| M_x |0\rangle e^{i\varepsilon_{m0}(j-k)} + \mathcal{O}(\delta^2) \\
|\alpha_j^m|^2 &= \frac{\delta^2}{4} \sum_{x,x'} \sum_{k,k'=0}^{j-1} y_k^x y_{k'}^{x'} \langle m| M_x |0\rangle (\langle m| M_{x'} |0\rangle)^* e^{i\varepsilon_{m0}(k'-k)} + \mathcal{O}(\delta^3)
\end{aligned}$$

Bildet man nun den Mittelwert über unendlich viele Realisierungen und bemerkt hierbei, dass die Störung zu verschiedenen Orten und Zeiten nicht korreliert, erhält man:

$$\begin{aligned} \overline{y_k^x y_{k'}^{x'}} &= \langle y^2 \rangle \delta_{x,x'} \delta_{k,k'} \\ \langle y^2 \rangle &= \int dx \cdot x^2 \rho(x) \\ &\text{und } \rho(x) \text{ gerade Verteilungsfunktion der Zufallsvariable } y_k^x \\ \Rightarrow \overline{|\alpha_j^m|^2} &= j \cdot \delta^2 \frac{\langle y^2 \rangle}{4} \sum_x |\langle m | M_x | 0 \rangle|^2 \end{aligned}$$

Für die gemittelte Zerfallsrate folgt:

$$\begin{aligned} \overline{\Gamma} &= \frac{\sum_{m \neq 0} \overline{|\alpha_j^m|^2}}{j} = \delta^2 \frac{\langle y^2 \rangle}{4} \sum_x \sum_{m \neq 0} |\langle m | M_x | 0 \rangle|^2 \\ &\stackrel{(37)}{=} -\delta^2 \frac{\langle y^2 \rangle}{4} \sum_x \langle 0 | M_x \left(\sum_{m \neq 0} |m\rangle \langle m| \right) M_x | 0 \rangle \\ &\stackrel{\sum_{m \neq 0} |m\rangle \langle m| = \mathbb{1} - |0\rangle \langle 0|}{=} -\delta^2 \frac{\langle y^2 \rangle}{4} \sum_x \langle 0 | M_x (\mathbb{1} - |0\rangle \langle 0|) M_x | 0 \rangle \end{aligned} \quad (42)$$

$$\begin{aligned} &= \delta^2 \frac{\langle y^2 \rangle}{4} \left[\langle 0 | \left(-\sum_x M_x M_x \right) | 0 \rangle - \sum_x |\langle 0 | M_x | 0 \rangle|^2 \right] \\ &\stackrel{(38)}{=} \delta^2 \frac{\langle y^2 \rangle}{4} \left(1 - \sum_x |\langle 0 | M_x | 0 \rangle|^2 \right) \end{aligned} \quad (43)$$

Weiter kann man zeigen, dass $\langle 0 | M_x | 0 \rangle$ für den gebunden Zustand verschwindet. Gebundene Zustände können, aufgrund der anwesenden Symmetrien, nur mit den Energien 0 oder π auftreten. (vgl. Abbildung Paper 'gap closes at 0 and pi', sowie Kap. 3.2) Damit sind die Eigenwerte zu U $\lambda = \pm 1$. Weiter besitzt die Matrix U in Ortsraumdarstellung nur reelle Einträge. Der gebundene Zustand ergibt sich aus $\ker(U - \lambda \mathbb{1}) = \ker(U \mp \mathbb{1})$, hier treten keine weiteren komplexen Werte auf, somit sind die Koeffizienten $c_{0,x}^{\uparrow/\downarrow} \in \mathbb{R} \forall x$ und das Matrixelement $\langle 0 | M_x | 0 \rangle$ verschwindet $\forall x$ (Gleichung 40).

Somit gilt für die Zerfallsrate des gebunden Zustand:

$$\boxed{\overline{\Gamma} = \delta^2 \frac{\langle y^2 \rangle}{4}} \quad (44)$$

Hier ist zu bemerken, dass die Zerfallsrate eines Zustand mit der Energie $E = n \cdot \pi$ und $n \in \mathbb{Z}$ ausschließlich von der Verteilungsfunktion der Störung abhängt und unabhängig jeglicher Systemparameter, insbesondere der Wahl von $\Theta_2(x)$ und somit unabhängig von Breite und Form des Zustandes ist. Bemerkte das gebundene Zustände mit $E = n \cdot \pi$ dort auftreten wo das System einen Phasenwechsel besitzt. Der Phasenwechsel wird ebenfalls durch $\Theta_2(x)$ bestimmt.

Für hinreichend kleine Störungen und Zeiten erwartet man einen exponentiellen Zerfall:

$$P_0 \approx e^{-\Gamma j}$$

5.3 Vergleich numerischer Ergebnisse mit den theoretischen Erwartungswerten.

Als Verteilungsfunktion der Störung wird die Boxverteilung verwendet und man erhält für $\langle y^2 \rangle$:

$$\rho(x) = \begin{cases} \frac{1}{2} & : -1 \leq x \leq 1 \\ 0 & : \text{sonst} \end{cases}$$

$$\langle y^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dx \cdot x^2 \rho(x) = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 dx \cdot x^2 = \frac{1}{3}$$

Damit ergibt sich die theoretisch erwartete Zerfallskonstante:

$$\bar{\Gamma}_{theo} = \frac{\delta^2}{12}$$

Mit Hilfe des von Matthias Sitte geschriebenen Programm wurde über mehrere Realisierungen ein gemittelter Zerfallsverlauf des geb. Zustand abhängig der Zeit bestimmt. Hierzu nutzt man, dass nur der geb. Zustand eine hohe Wahrscheinlichkeitsdichte um die Phasengrenze besitzt und Beiträge anderer Zustände verschwindend gering sind. Die Wahrscheinlichkeit, dass sich das System im gebundenen Zustand befindet, erhält man in guter Näherung durch Integration der Wellenfunktion um die Phasengrenze. Die Integrationsgrenzen sind abhängig der Ausdehnung des geb. Zustands zu wählen. Tendenziell gilt: Je stärker die Störung δ , desto mehr streuen die Aufenthaltswahrscheinlichkeiten für jeden Zeitschritt um den Mittelwert. Daher ist die Anzahl der Realisierungen, über die gemittelt wird, mit der Störungsstärke anzupassen. Für die numerische Analyse werden die von Jan Gelhausen vorgeschlagenen Werte verwendet:

δ	Anzahl der Realisierungen
< 0.04	10
(0.04 – 0.08)	50
> 0.08	100

Um sicher zu gehen, dass für das untersuchte System mit $\xi = 1$ keine weiteren um $x = 0$ stark lokalisierten Zustände auftreten, wurde mit Hilfe von Mathematica ein endliches System mit periodischen Randbedingungen realisiert. Dieses wurde für verschiedene hinreichend große Systeme diagonalisiert und die Wahrscheinlichkeitsdichte um $x = 0$ untersucht. Tendenziell konnte festgestellt werden: Je größer ξ , desto mehr um die Phasengrenze lokalisierte Zustände treten auf. Für $\xi = 3$ konnten zwei weitere stark um $x = 0$ lokalisierte Zustände entdeckt werden, diese verschwanden auch nicht, wenn man das System im Rahmen der Möglichkeiten vergrößerte. Man beachte das die in Gleichung 44 bestimmte Zerfallskonstante nur für einen um $x = 0$ lokalisierten Zustand gilt. Sind mehrere Zustände um die Phasengrenze lokalisiert, ist der Anfangszustand entsprechend anzupassen. Um abzuschätzen, ob bei mehreren geb. Zuständen die Zerfallsrate weiterhin unabhängig der Systemparameter bleibt, kann man die Zerfälle einzelner gebundener Zustände auf ungebundene Zustände betrachten. Hierfür ist der Projektor in Gleichung 42 mit weiteren gebundenen Zuständen zu ergänzen. Es treten dann Matrixelemente auf, die aufgrund von Energien $E \neq 0, \pm\pi$ i. a. ungleich null sind (vgl. Gleichung 40 und Diskussion für das Verschwinden des Matrixelement $\langle 0 | M_x | 0 \rangle$). Folglich ist die Zerfallskonstante bei Anwesenheit mehrerer geb. Zustände von Systemparametern abhängig, womit die Abweichung von etwa 10% zu der von Jan Gelhausen bestimmten Zerfallskonstante $\bar{\Gamma}_{Num} = 0.0738 \cdot \delta^2$ (Abb.14) zustande kommt.

Trägt man die Wahrscheinlichkeit auf, dass sich das System im geb. Zustand befindet logarithmisch gegen die Anzahl der Zeitschritte auf, zeigt der lineare Verlauf den Gültigkeitsbereich des exponentiellen Zerfalls an. In diesem Bereich wird die Kurve mit der Funktion $f(j) = Ae^{-j \cdot \bar{\Gamma}_{Num}}$ angefitet. Um die numerischen Ergebnisse mit den theoretischen Erwartungen vergleichen zu können, teilt man diese durcheinander. Beachtet man, dass die theoretische Zerfallskonstante für $\delta \rightarrow 0$ gilt, muss im Falle einer Übereinstimmung folgen:

$$g(\delta) = \frac{\bar{\Gamma}_{Num}(\delta)}{\bar{\Gamma}_{theo}(\delta)}$$

$$\lim_{\delta \rightarrow 0} g(\delta) = 1$$

Beim Bestimmen der Zerfallskonstante stellt man fest, dass je größer die Störung ist, desto früher weicht der Zerfall des geb. Zustands vom exponentiellen Zerfall ab.

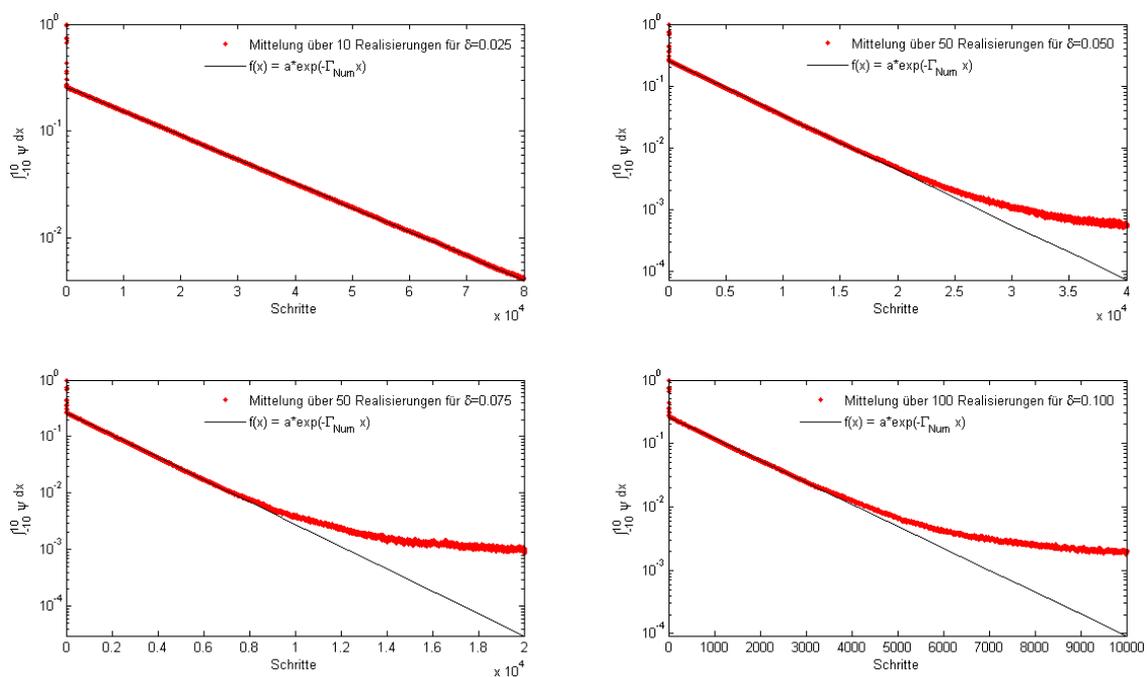


Abbildung 15: Bestimmung der Zerfallskonstanten für $\Theta_1 = \frac{\pi}{2}$ und $\Theta_2 = \frac{\pi}{2} - \frac{\pi}{4} \tanh(x)$

Um die theoretische Erwartung zu überprüfen, wurden drei verschiedene Systeme untersucht, für welche jeweils $\Theta_2(x)$ variiert wurde. Betrachtet man für diese $g(\delta)$, ist in den folgenden Abbildungen zu erkennen, dass die numerischen Ergebnisse für $\delta \rightarrow 0$ sehr gut mit der theoretischen Erwartung übereinstimmen.

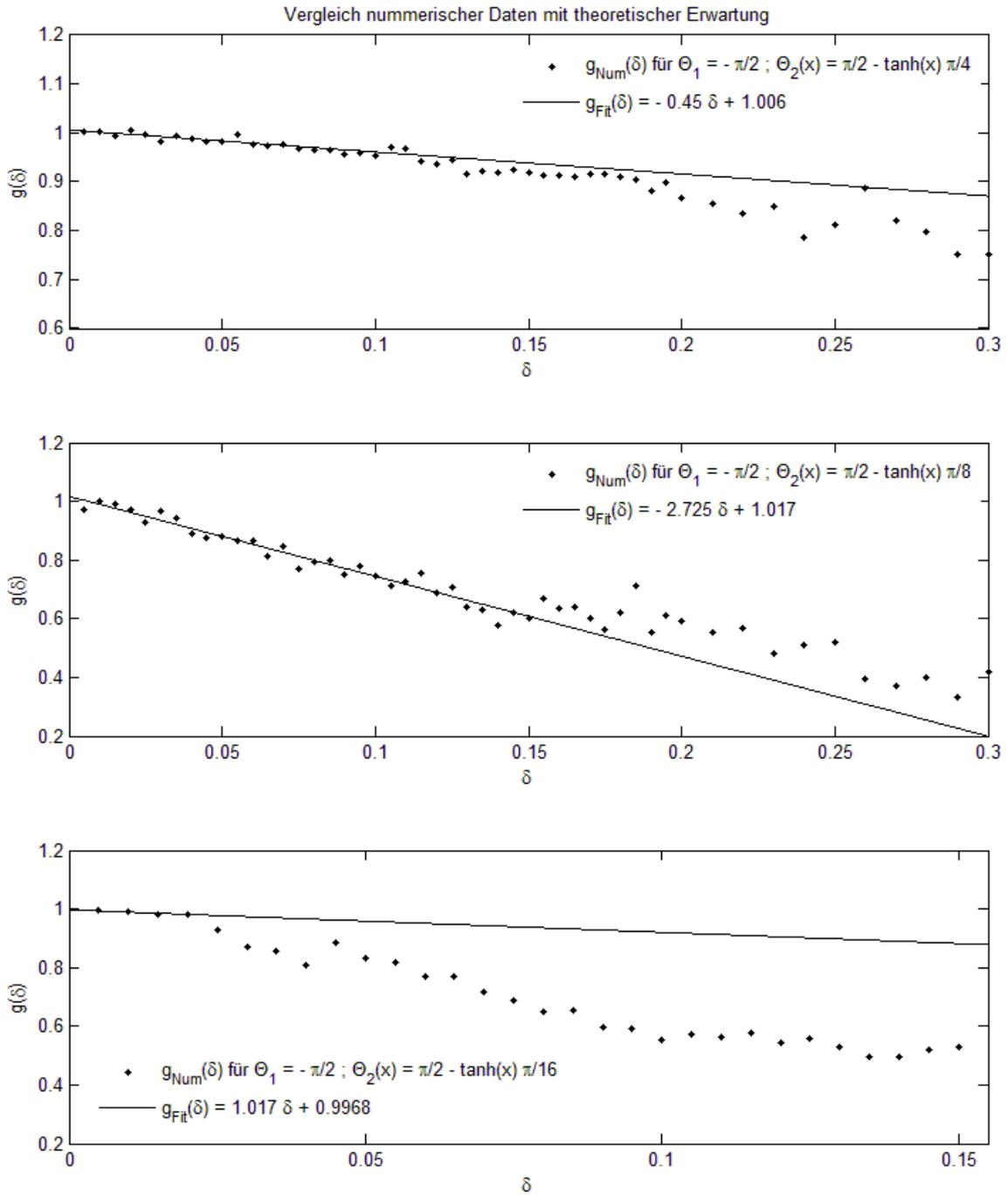


Abbildung 16: Der Geradenfit wurde jeweils für die ersten i) 15 ii) 10 iii) 4 Punkte durchgeführt

In Abbildung 16 fällt auf, dass $g(\delta)$ mit steigendem δ für die drei untersuchten Systeme abfällt und somit hier Korrekturen höherer Ordnung die Zerfallsrate senken. Da alle drei Systeme einen stark unterschiedlichen Verlauf zeigen, sind die Korrekturen höherer Ordnung nicht mehr von den Systemparametern unabhängig.

6 Zusammenfassung

Es konnte gezeigt werden, dass die Zerfallsrate des gebundenen Zustands in führender Ordnung ausschließlich von der Verteilungsfunktion der Störung abhängt.

$$\bar{\Gamma} = \delta^2 \frac{\langle y^2 \rangle}{4}$$

Dies wird durch zwei Voraussetzungen bedingt.

Zunächst ist in die Rechnung eingegangen, dass es nur einen an der Phasengrenze gebundenen Zustand gibt. Numerische Analysen ergaben: Ist die Korrelationslänge ξ klein genug tritt nur ein gebundener Zustand auf.

Die Zerfallsrate eines beliebigen Zustands ist gegeben durch:

$$\bar{\Gamma} = \delta^2 \frac{\langle y^2 \rangle}{4} \left(1 - \sum_x |\langle n | M_x | n \rangle|^2 \right)$$

Für im Ortsraum reelle Zustände verschwindet das Matrixelement $\langle n | M_x | n \rangle$. Die anwesenden Symmetrien garantieren ein Schließen der Bandlücke bei Energien $E = n \cdot \pi$ mit $n \in \mathbb{Z}$, wodurch der gebundene Zustand im Ortsraum reell ist.

7 Literaturverzeichnis

Literatur

- [1] Galtonbrett on the german wikipedia. <http://de.wikipedia.org/wiki/Galtonbrett>. Online resource accessed on 14rd of July 2012.
- [2] Quanten-hall-effekt. <http://de.wikipedia.org/wiki/Quanten-Hall-Effekt>. Online resource accessed on 14rd of July 2012.
- [3] Wiener-prozess -> simulation von brownschen pfaeden. http://de.wikipedia.org/wiki/Wiener-Prozess#Simulation_von_brownschen_Pfaden. Online resource accessed on 14rd of July 2012.
- [4] Taylor L. Hughes B. Andrei Bernevig and Shou-Cheng Zhang. Quantum spin hall effect and topological phase transition in hgte quantum wells. *Science*, Dec 2006.
- [5] Liang Fu and C. L. Kane. Topological insulators with inversion symmetry. *Phys. Rev. B*, 76:045302, Jul 2007.
- [6] Jan Gelhausen. Bachelor theses: Time-dependent disorder in a topological insulator realised with a quantum walk. <http://www.thp.uni-koeln.de/rosch/bachelorJanGelhausen.pdf>. Januar 26, 2012.
- [7] Charles L. Kane and Eugene J. Mele. A new spin on the insulating state. *Science*, Dec 2006.
- [8] Takuya Kitagawa, Mark S. Rudner, Erez Berg, and Eugene Demler. Exploring topological phases with quantum walks. *Phys. Rev. A*, 82:033429, Sep 2010.
- [9] F. Schwabl. *Quantenmechanik für Fortgeschrittene(QM II)*. Springer-Lehrbuch. Springer, 2008.
- [10] Horst Stöcker. *Taschenbuch mathematischer Formeln und moderner Verfahren* -. Harri Deutsch Verlag, Thun, Frankfurt am Main, nachdruck der 4. auflage. edition, 2009.

8 Wertetabellen

$\xi = 1; \theta_1 = -\frac{\pi}{2}$	$\theta_{2-} = \frac{3\pi}{4}; \theta_{2+} = \frac{\pi}{4}$		$\theta_{2-} = \frac{3\pi}{4}; \theta_{2+} = \frac{\pi}{4}$		$\theta_{2-} = \frac{3\pi}{4}; \theta_{2+} = \frac{\pi}{4}$	
δ	$\bar{\Gamma}_{Num}$	$\Delta\bar{\Gamma}_{Num}$	$\bar{\Gamma}_{Num}$	$\Delta\bar{\Gamma}_{Num}$	$\bar{\Gamma}_{Num}$	$\Delta\bar{\Gamma}_{Num}$
0.005	2.08909e-006	2.544e-011	2.02397e-006	1.596e-010	2.07052e-006	7.842e-010
0.010	8.35474e-006	8.004e-011	8.35062e-006	3.064e-010	8.23942e-006	8.90e-010
0.015	1.86346e-005	2.674e-010	1.85474e-005	7.574e-010	1.84427e-005	1.494e-009
0.020	3.35322e-005	3.940e-010	3.24383e-005	1.943e-009	3.27606e-005	5.829e-009
0.025	5.18580e-005	8.680e-010	4.83767e-005	9.694e-009	4.83767e-005	9.694e-009
0.030	7.37397e-005	2.298e-009	7.26618e-005	9.085e-009	6.51937e-005	2.150e-008
0.035	0.000101401	7.045e-009	9.61364e-005	1.860e-008	8.73642e-005	4.496e-008
0.040	0.000131712	6.977e-009	0.000118719	2.661e-008	0.000107851	5.523e-008
0.045	0.000165874	8.921e-009	0.000147937	4.370e-008	0.000149486	1.137e-007
0.050	0.000204530	1.500e-008	0.000183371	7.501e-008	0.000173544	1.412e-007
0.055	0.000250937	2.282e-008	0.000218845	5.920e-008	0.000206076	2.669e-007
0.060	0.000292733	3.888e-008	0.000260464	1.646e-007	0.000230356	3.071e-007
0.065	0.000342870	4.325e-008	0.000286904	1.696e-007	0.000271087	3.860e-007
0.070	0.000398636	7.276e-008	0.000345765	2.281e-007	0.000291920	5.034e-007
0.075	0.000454153	5.602e-008	0.000361272	3.764e-007	0.000323003	5.920e-007
0.080	0.000515296	8.050e-008	0.000424517	3.379e-007	0.000346700	7.972e-007
0.085	0.000580982	1.443e-007	0.000482212	3.598e-007	0.000392940	9.614e-007
0.090	0.000644514	1.290e-007	0.000506887	6.189e-007	0.000401987	1.109e-006
0.095	0.000722161	1.306e-007	0.000587562	6.760e-007	0.000446819	1.741e-006
0.100	0.000794961	2.538e-007	0.000620317	1.000e-006	0.000461247	1.579e-006
0.105	0.000892770	2.906e-007	0.000654679	1.145e-006	0.000527188	2.359e-006
0.110	0.000974669	1.769e-007	0.000731767	1.298e-006	0.000566174	3.262e-006
0.115	0.001038830	2.144e-007	0.000833710	1.643e-006	0.000635395	4.066e-006
0.120	0.001121790	3.832e-007	0.000826012	1.795e-006	0.000653319	3.171e-006
0.125	0.001228530	4.509e-007	0.000918279	2.330e-006	0.000728981	3.297e-006
0.130	0.001287850	5.824e-007	0.000902173	3.127e-006	0.000748745	4.147e-006
0.135	0.001398670	5.776e-007	0.000957664	2.579e-006	0.000755565	4.181e-006
0.140	0.001500580	1.026e-006	0.000939695	2.939e-006	0.000810293	4.039e-006
0.145	0.001617440	1.381e-006	0.001086020	3.427e-006	0.000912974	5.610e-006
0.150	0.001723840	1.416e-006	0.001126050	3.105e-006	0.000990034	5.010e-006
0.155	0.001828510	1.922e-006	0.001342460	7.295e-006		
0.160	0.001947220	1.753e-006	0.001355390	6.567e-006		
0.165	0.002066450	1.437e-006	0.001451490	6.900e-006		
0.170	0.002203980	2.419e-006	0.001453280	8.137e-006		
0.175	0.002334950	2.299e-006	0.001434480	1.373e-005		
0.180	0.002459630	3.874e-006	0.001677220	1.261e-005		
0.185	0.002578590	1.851e-006	0.002037270	1.436e-005		
0.190	0.002648460	2.576e-006	0.001659320	1.753e-005		
0.195	0.002846300	3.263e-006	0.001932220	1.593e-005		
0.200	0.002888920	3.278e-006	0.001966120	1.397e-005		

Tabelle 1: Zerfallskonstanten für den exponentiellen Zerfall des gebundenen Zustands

Danksagungen

Hiermit möchte ich einen großen Dank an Prof. Dr. Achim Rosch aussprechen dafür, dass er mir ein sehr interessantes Thema vorgeschlagen und mich jederzeit sehr gut betreut hat.

Weiterer Dank gebührt Jan Gelhausen, der mich in das Thema eingeführt hat und ein sehr guter Ansprechpartner bei Fragen war.

Christoph Schütte möchte ich für seine Anregungen bei der Bestimmung der Zerfallsrate danken, da sie mir sehr bei der Zielfindung geholfen haben.

Dank geht natürlich auch an Matthias Sitte, der mit seinem geschriebenen Programm, zur Simulation des Quantum Walk, sehr gute Vorarbeit zur Auswertung der numerischen Ergebnisse geleistet hat. Ich möchte ihm auch dafür danken, dass er mir die zur Auswertung nötigen Datensätze organisierte.

Großen Lob möchte ich für die gesamte Betreuung aussprechen, da ich mich zu keiner Zeit mit Problemen allein gelassen und stets freundschaftlich behandelt gefühlt habe.

Eigenständigkeitserklärung

“Hiermit bestätige ich, dass ich die vorliegende Arbeit selbstständig verfasst und alle verwendeten Hilfsmittel angegeben habe. Die Stellen der Arbeit, die anderen Werken in Wortlaut oder dem Sinn entnommen sind, wurden unter Angabe der Quelle kenntlich gemacht.”

Köln, den 25.07.2012,

(Johannes Schmidt)