



M Ű E G Y E T E M 1 7 8 2

PhD téziszfüzet

Töltés- és spindinamika  
alacsony dimenziós rendszerekben

Vajna Szabolcs

Témavezető: Dr. Balázs Dóra  
Egyetemi tanár  
Fizika Tanszék  
BME

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem

2017

# Előzmények

A nemegyensúlyi dinamika kutatása a szilárdtestfizika egyik központi területévé nőtte ki magát az elmúlt 10-15 évben [Polkovnikov et al., 2011], elsősorban a hideg atomi rendszerekkel végzett kísérletek rohamos fejlődésének köszönhetően [Bloch et al., 2008]. Az egyensúlyból különféle módokon kimozdított rendszerek tanulmányozása nem pusztán elméletileg érdekes kérdés, hanem ígéretes alkalmazása lehet például a kvantum számítógépek, ill. a kvantum információ feldolgozás területén, valamint akár anyagok új tulajdonságokkal való felruházására is használható [Bukov et al., 2015]. A leggyakrabban vizsgált nemegyensúlyi protokoll a *kvencs* és a periodikus gerjesztés. Az előbbi a rendszert leíró kölcsönhatások - például egy külső mágneses vagy elektromos tér - egyszeri, hirtelen megváltoztatását jelenti, míg az utóbbi ezen mennyiségek időben periodikus modulációját takarja. Mindkét esetben mind a rövid időket leíró tranziens dinamika, mind pedig a hosszú idő után kialakuló stacionárius állapotok mutathatnak érdekes tulajdonságokat.

Egy fontos fejlemény volt például a dinamikus szabadenergiának nevezett mennyiség nemanalitikus időfejlődésének 2013-as felfedezése [Heyl et al., 2013] bizonyos kvencs protollokat követően a merőleges mágneses térbe helyezett kvantum Ising modellben. A rendszer időfejlődése és a klasszikus, hőmérsékleti fázisátalakulások analógiája alapján a jelenséget dinamikus fázisátalakulásnak nevezték el. Felfedezése óta jelentős figyelem irányult a jelenség alapos megértésének irányába, lásd pl. a [Canovi et al., 2014; Heyl, 2014; Heyl, 2015; Huang et al., 2016] cikkeket.

Egy másik érdekes problémát boncoltak a [Dóra and Moessner, 2010] cikkben, ahol a szerzők a hirtelen bekapcsolt elektromos tér hatására bekövetkező elektronlyuk párkeltés jelenségét tanulmányozták grafénban, ami a kvantum elektrodinamikából ismert Schwinger-féle párkeltés [Schwinger, 1951] szilárdtestfizikai megfelelője. A kétdimenziós grafén nem az egyetlen példa, melyben az alacsony energiás gerjesztések relativisztikus diszperziós relációval bírnak. A nemrégiben felfedezett topologikus szigetelők [Qi and Zhang, 2011] él és felületi állapotait, valamint a Dirac és Weyl topologikus félfémek [Burkov and Balents, 2011] alacsony energiás gerjesztéseit szintén az egy-, két-, illetve háromdimenziós Dirac egyenlet írja le, így ezen anyagok további lehetőséget nyújtanak érdekes kvantumelektrodinamikai jelenségek, például a Schwinger-párikeltés, Klein-alagutazás vagy a királis anomália szilárdtestfizikai vizsgálatára.

A perturbáció bekapcsolását követő hosszúidejű választ tekintve a nemegyensúlyi fizikának fontos célja a stacionárius állapotok jellemzése, hasonlóan ahhoz, ahogy a statisztikus fizika leírja az egyensúlyi állapotok betöltődését a környezettel való gyenge kölcsönhatás mellett. Az egyik kulcsfontosságú kérdés, hogy

környezetüktől izolált rendszerek is tudnak-e hőmérsékleti egyensúlyt elérni, ha valamilyen nemegyensúlyi kezdőállapotból indulnak [Rigol et al., 2008; Cassidy et al., 2011]. Ugyanez a kérdés feltehető a környezetüktől elzárt [Lazarides et al., 2014; D’Alessio and Rigol, 2014] illetve azzal gyengén kölcsönható periodikusan hajtott rendszerekre is [Dehghani et al., 2014; Iadecola et al., 2015; Shirai et al., 2016].

## Célkitűzések

A doktori kutatásom célja analitikusan megoldható rendszerek nemegyensúlyi viselkedésének tanulmányozása volt, olyan mennyiségekre fókuszálva, mint a perturbáció hatására keletkező gerjesztések száma, az ebből fakadó áram, illetve a dinamikus szabadenergia.

A dinamikus fázisátalakulásokat mutató első néhány példa a dinamikus fázisátalakulások megjelenése és a rendszerek egyensúlyi fázisdiagramja között szoros kapcsolatot sugallt. Az első célkitűzésem ezen kapcsolat mélyebb megértésére irányult, amihez különféle, gazdag fázisdiagrammal rendelkező modellek dinamikáját vizsgáltam. Valamint arra is kerestem a választ, hogy miképpen jelennek meg dinamikus fázisátalakulások kétdimenziós rendszerekben.

A kutatásom második célkitűzése a [Dóra and Moessner, 2010] cikk eredményeinek általánosítása volt Weyl félfémek esetére, vagyis a Schwinger féle párkeltés tanulmányozása háromdimenziós szilárdtestekben, melyek alacsony energiás viselkedését a Dirac egyenlet írja le.

Végül a periodikusan hajtott rendszerek stacionárius állapotainak betöltődését kívántam tanulmányozni, illetve ennek hatását a vezetési tulajdonságokra. A cirkulárisan polarizált fényel megvilágított kvantum spin Hall szigetelőben ébredő áramot tanulmányozták korábban egy heurisztikus módszerrel, ami a stacionárius állapotok betöltését az átlagos energia alapján határozza meg [Dóra et al., 2012]. Céлом volt megvizsgálni mennyiben változtatja meg a fenti eredményeket, ha az állapotok betöltődését mikroszkopikus megköltésből, vagyis a rendszer hőfürdővel történő gyenge csatolás figyelembe vételével határozom meg.

## Módszerek

A különféle körülmények között vizsgált rendszerek tanulmányozása során többféle analitikus és numerikus módszert is használtam. A kvencs problémák során az egyszerű spin- és szupravezető rendszerek Hamilton operátorát diagonalizálva határoztam meg az időfejlődést, amihez jól ismert transzformációkat (Jordan-Wigner, ill. Bogoliubov transzformáció) alkalmaztam. A dinamikus fá-

zisátalakulásokat a dinamikus állapotösszeg komplex zerushelyeinek, vagyis a Fisher zerushelyek segítségével tanulmányoztam. A hirtelen bekapcsolt elektromos tér hatására keletkező gerjesztéseket az időfüggő Schrödinger egyenlet analitikus közelítő megoldásaival vizsgáltam, melyek teljesítőképességét az egyenlet numerikus (explicit Runge-Kutta módszeren alapuló) megoldásával is ellenőriztem. A periodikusan hajtott rendszereket a Floquet-elmélet keretein belül elemeztem, a hőfürdőhöz való csatolást pedig egy általánosított Lindblad-egyenlettel, pontosabban a Bloch-Redfield egyenlettel vettem figyelembe.

## Új tudományos eredmények

Fő eredményeimet az alábbi tézispontokban foglaltam össze.

1. Az egydimenziós kvantum XY spinlánc példáján keresztül analitikusan megmutattam, hogy a merőleges mágneses térbe helyezett egydimenziós kvantum Ising modellben találtakkal ellentétben [Heyl et al., 2013] dinamikus fázisátalakulások nem csak olyan esetben jelenhetnek meg, amikor a nem-egyensúlyi kvencs protokoll különböző egyensúlyi fázisokat köt össze, hanem akkor is, ha a kvencs előtti és utáni Hamilton operátor ugyanabba a fázisba tartozik. A kvencs előtti paraméterek függvényében meghatározom a kvencs utáni paraméterek azon tartományát az egyensúlyi fázisdiagramon, amik dinamikus fázisátalakulások megjelenéséhez vezetnek.

Az eredmények a [P1] cikkben kerültek publikálásra.

2. A csavarodási számmal vagy az ún.  $\mathbb{Z}_2$  invariánssal jellemzett egydimenziós két-sáv topologikus szigetelőkben és topologikus szupravezetőkben tanulmányoztam a dinamikus fázisátalakulások megjelenését. A modellek ezen osztályára bizonyítottam, hogy ha a kvencs protokoll különböző topologikus számmal jellemzett egyensúlyi fázisokat köt össze, abból következik a dinamikus fázisátalakulások megjelenése. Megmutattam, hogy a dinamikus szabadenergia szingularitásainak helyeit megadó nemegyensúlyi időskálák száma legalább akkora, mint a fent említett topologikus számok különbsége. Az eredményt a Su-Schrieffer-Heeger modell egy általánosított formáján szemléltettem.

Az eredmények a [P2] cikkben kerültek publikálásra.

3. A Chern számmal jellemzett kétdimenziós két-sáv topologikus szigetelőkben és topologikus szupravezetőkben tanulmányoztam a dinamikus fázisátalakulások megjelenését. A modellek ezen osztályára bizonyítottam, hogy ha a

kvensz protokoll olyan fázisokat köt össze, amelyek Chern számának abszolút értéke különbözik, abból következik a dinamikus fázisátalakulások megjelenése. Kvalitatív különbséget találtam a dinamikus fázisátalakulások között egy illetve két dimenzióban. Míg az előbbi esetben a dinamikus szabenergia idő szerinti első deriváltja nem folytonos, az utóbbi esetben az ugrások csak a második időderiváltban jelennek meg. Megmutattam, hogy ez a Fisher zérushelyek elhelyezkedésének különbségéből fakad: az egy dimenzióban látott vonalak formálása helyett két dimenzióban területeket töltenek ki. Az eredményeket Haldane méhsejtrács modelljén keresztül szemléltettem.

Az eredmények a [P2] cikkben kerültek publikálásra.

4. Az elektromos tér bekapcsolására adott nemlineáris választ és a Schwinger-féle párkeltést tanulmányoztam Weyl félfémekben. Meghatároztam a tér által keltett elektron-lyuk párok teljes számának eloszlását megadó karakterisztikus függvény, valamint az elektromos áram teljes időfejlődését. A párok számának eloszlása a rövid időkre jellemző Poisson statisztikából Gauss eloszlássá alakul hosszú perturbáció hatására. Egy Weyl pont környezete érdekes, időben nem monoton járulékot ad a teljes áramhoz: a polarizációs áram kezdeti gyors növekedését egy lassú csökkenés követi, amit végül a folyamatosan növekvő vezetési áram járuléka dominálni kezd. Az áram időfejlődése alapján becslést adtam egy szennyezett minta vezetőképességére egy általánosított Drude elmélet segítségével.

Az eredmények a [P3] cikkben kerültek publikálásra.

5. Meghatároztam a Floquet kvázienergia sávok betöltődését és az elektromos áramot egy környezetével gyengén kölcsönható, élei mentén cirkulárisan polarizált fényel megvilágított kvantum spin Hall szigetelőben, amivel általánosítottam a [Dóra et al., 2012] cikk eredményeit, ami egy hasonló rendszert vizsgált környezetétől elzárva, egy heurisztikus, átlag-energián alapuló betöltődést feltételezve. Azt találtam, hogy a zárt rendszerre tett jóslat, miszerint a perturbáció frekvenciájának függvényében egy fázisátalakulást látnak kvantált és nem kvantált áram között, igaz marad a zérus hőmérsékletű hőfürdőhöz csatolt disszipatív rendszerben is, azonban az átalakulási frekvencia egy kettős faktossal kisebb az utóbbi esetben. Ugyan a Floquet sávok betöltődése kvalitatívan hasonló a két módszerben, az egyszerű, átlag energián alapuló eljárás nem tud számot adni vizsgált mennyiségeknek a hőfürdő spektrális paraméterétől való erős függéséről. Kidolgoztam egy analitikus közelítő eljárást a rendszer és hőfürdő közötti kölcsönhatás véges értékei mellett megfigyelhető foton-elnyelési rezonanciák tanulmányozására,

amelyek a Floquet sávok betöltődésének keveredését és alacsony frekvenciás gerjesztés esetén az áram kvantáltságának gyenge sértését eredményezik.

Az eredmények a [P4] cikkben kerültek publikálásra.

## Publikációk

Tézispontokhoz kapcsolódó tudományos közlemények:

[P1] S. Vajna and B. Dóra, "Disentangling dynamical phase transitions from equilibrium phase transitions", Phys. Rev. B **89**, 161105(R) (2014)

[P2] S. Vajna and B. Dóra, "Topological classification of dynamical phase transitions", Phys. Rev. B **91**, 155127 (2015)

[P3] S. Vajna, B. Dóra, and R. Moessner, "Nonequilibrium transport and statistics of Schwinger pair production in Weyl semimetals", Phys. Rev. B **92**, 085122 (2015)

[P4] S. Vajna, B. Horovitz, B. Dóra, and G. Zaránd, "Floquet topological phases coupled to environments and the induced photocurrent", Phys. Rev. B **94** 115145 (2016)

További tudományos közlemények:

[P5] S. Vajna, E. Simon, A. Szilva, K. Palotás, B. Ujfalussy, and L. Szunyogh, "Higher-order contributions to the Rashba-Bychkov effect with application to the Bi/Ag(111) surface alloy", Phys. Rev. B **85**, 075404 (2012)

[P6] S. Vajna, B. Tóth, and J. Kertész, "Modelling bursty time series", New J. Phys. **15** 103023 (2013)

[P7] M. Vigh, L. Oroszlány, S. Vajna, P. San-Jose, Gy. Dávid, J. Cserti, and B. Dóra "Diverging dc conductivity due to a flat band in disordered pseudospin-1 Dirac-Weyl fermions", Phys. Rev. B **88**, 161413(R) (2013)

[P8] P. Weinberg, M. Bukov, L. D'Alessio, A. Polkovnikov, S. Vajna, and M. Kolodrubetz, "Adiabatic perturbation theory and geometry of periodically-driven systems", ArXiv: 1606.02229 (2016)

# Hivatkozások

## References

[D'Alessio and Rigol, 2014] L. D'Alessio and M. Rigol, “Long-time behavior of isolated periodically driven interacting lattice systems”, *Phys. Rev. X* **4**, 041048 (2014).

[Bloch et al., 2008] I. Bloch, J. Dalibard, and W. Zwerger, “Many-body physics with ultracold gases”, *Rev. Mod. Phys.* **80**, 885 (2008).

[Bukov et al., 2015] M. Bukov, L. D'Alessio, and A. Polkovnikov, “Universal high-frequency behavior of periodically driven systems: from dynamical stabilization to Floquet engineering”, *Advances in Physics* **64**, 139 (2015).

[Burkov and Balents, 2011] A. A. Burkov and L. Balents, “Weyl semimetal in a topological insulator multilayer”, *Phys. Rev. Lett.* **107**, 127205 (2011).

[Canovi et al., 2014] E. Canovi, P. Werner, and M. Eckstein, “First-order dynamical phase transitions”, *Phys. Rev. Lett.* **113**, 265702 (2014).

[Cassidy et al., 2011] A. C. Cassidy, C. W. Clark, and M. Rigol, “Generalized thermalization in an integrable lattice system”, *Phys. Rev. Lett.* **106**, 140405 (2011).

[Dehghani et al., 2014] H. Dehghani, T. Oka, and A. Mitra, “Dissipative Floquet topological systems”, *Phys. Rev. B* **90**, 195429 (2014).

[Dóra et al., 2012] B. Dóra, J. Cayssol, F. Simon, and R. Moessner, “Optically engineering the topological properties of a spin Hall insulator”, *Phys. Rev. Lett.* **108**, 056602 (2012).

[Dóra and Moessner, 2010] B. Dóra and R. Moessner, “Nonlinear electric transport in graphene: Quantum quench dynamics and the Schwinger mechanism”, *Phys. Rev. B* **81**, 165431 (2010).

[Heyl et al., 2013] M. Heyl, A. Polkovnikov, and S. Kehrein, “Dynamical quantum phase transitions in the transverse-field Ising model”, *Phys. Rev. Lett.* **110**, 135704 (2013).

- [Heyl, 2014] M. Heyl, “Dynamical quantum phase transitions in systems with broken-symmetry phases”, *Phys. Rev. Lett.* **113**, 205701 (2014).
- [Heyl, 2015] M. Heyl, “Scaling and universality at dynamical quantum phase transitions”, *Phys. Rev. Lett.* **115**, 140602 (2015).
- [Huang et al., 2016] Z. Huang and A. V. Balatsky, “Dynamical quantum phase transitions: Role of topological nodes in wave function overlaps”, *Phys. Rev. Lett.* **117**, 086802 (2016).
- [Iadecola et al., 2015] T. Iadecola, T. Neupert, and C. Chamon, “Occupation of topological Floquet bands in open systems”, *Phys. Rev. B* **91**, 235133 (2015).
- [Lazarides et al., 2014] A. Lazarides, A. Das, and R. Moessner, “Periodic thermodynamics of isolated quantum systems”, *Phys. Rev. Lett.* **112**, 150401 (2014).
- [Polkovnikov et al., 2011] A. Polkovnikov, K. Sengupta, A. Silva, and M. Venugatallore, “Colloquium : Nonequilibrium dynamics of closed interacting quantum systems”, *Rev. Mod. Phys.* **83**, 863 (2011).
- [Qi and Zhang, 2011] X.-L. Qi and S.-C. Zhang, “Topological insulators and superconductors”, *Rev. Mod. Phys.* **83**, 1057 (2011).
- [Rigol et al., 2008] M. Rigol, V. Dunjko, and M. Olshanii, “Thermalization and its mechanism for generic isolated quantum systems”, *Nature* **452**, 854 (2008).
- [Schwinger, 1951] J. Schwinger, “On gauge invariance and vacuum polarization”, *Phys. Rev.* **82**, 664 (1951).
- [Shirai et al., 2016] T. Shirai, J. Thingna, T. Mori, S. Denisov, P. Hänggi, and S. Miyashita, “Effective Floquet–Gibbs states for dissipative quantum systems”, *New Journal of Physics* **18**, 053008 (2016).