MŰEGYETEM 1782

PhD Tézisfüzet

Paraméterfüggő kvantumrendszerek energiadegenerációi geometriai nézőpontból

Frank György

Témavezető: Pályi András

Budapesti Műszaki és Gazdaságtudományi Egyetem

2025

Bevezető

A fizikai rendszerek viselkedése függ a rájuk jellemző paraméterektől. A kvantumrendszerek ebből a szempontból nem különböznek: működésüket és tulajdonságaikat olyan paraméterek befolyásolják, mint a mágneses tér, a csatolási állandók vagy a geometriai konfiguráció. E paraméterek változása megváltoztatja a rendszer Hamilton-operátorát, ami az energiaszintekben, sajátállapotokban és más mérhető mennyiségekben is módosulásokat eredményez.

Egy kristályos anyag Hamilton-operátora, amikor a Bloch-elektronokat írja le, paraméterfüggő kvantumrendszerként tekinthető, amely az elektronok hullámszám-vektorától függ. Ahogy a hullámszám végigfut a Brillouin-zónán, a Hamilton-operátor sajátértékei adják meg a diszperziós relációt, így a vegyérték-, vezetési- és tiltott sávok szerkezetét is. E sávok változásai írják le a fémes, szigetelő vagy topologikus fázisok közötti átmeneteket.

Weyl-félfémekben [1, 2] a Brillouin-zónában a vezetési- és a vegyértéksáv speciális pontokban, az ún. Weyl-pontokban érintkezik. Ezek környezetében a diszperziós reláció lineáris, vagyis a vezetési- és vegyértéksáv közötti energiafelhasadás a Weyl-ponttól való távolsággal arányosan növekszik. A Weyl-pontok robusztusak a perturbációkkal szemben, például külső mágneses tér vagy rugalmas feszültség (strain) hatására nem hasadnak fel, hanem csupán eltolódnak az impulzustérben. Ez a robusztusság a Weyl-pontok topologikus természetéből fakad. Minden Weyl-pont hordoz egy egységnyi topologikus töltést, vagy kiralitást, amely pozitív vagy negatív lehet. A topologikus töltés perturbációk hatására megmaradó mennyiség, forrása pedig maga a sávszerkezeti degeneráció. Ennek következtében bármely perturbált Hamilton-operátornak továbbra is tartalmaznia kell olyan degenerációt, amely megőrzi a topologikus töltést.

A kölcsönható spinsrendszerek esetében [3] a külső mágneses tér a rendszer konfigurációs terének egy paramétereként kezelhető. A spinrendszer Hamilton-operátora lineáris a mágneses térre nézve: a Zeeman-tag adja a homogén lineáris komponenst, míg a spinek közötti kölcsönhatás konstans tagként szerepel. A spinrendszerek degenerációs pontjait az irodalom gyakran *diabolikus pontokként* említi. Mind a kristályok impulzustérben megjelenő Weyl-pontjai, mind a mágneses rendszerek diabolikus pontjai lineáris diszperzióval, pozitív vagy negatív egységnyi topologikus töltéssel rendelkeznek, és nem igényelnek finomhangolást vagy speciális szimmetriát. Ezért e degenerációk ekvivalensnek tekinthetők, és a továbbiakban mindegyikre a *Weyl-pont* elnevezést használjuk, függetlenül a vizsgált fizikai rendszertől.

Egy másik típusú degenerációs pont akkor jön létre, amikor két, ellentétes topologikus töltésű Weyl-pont összeütközik [4]. Ez a degenerációs pont nulla topologikus töltéssel rendelkezik, és instabil perturbációkkal szemben. Az ilyen típusú pont környezetében a diszperziós reláció kvadratikus abban az irányban, amely mentén a két Weyl-pont összeolvadt. Ezen különbségek miatt ezek a kvadratikus degenerációs pontok nem ekvivalensek a Weyl-pontokkal.

További Weyl-pontok összeolvadása egyre összetettebb degenerációkhoz vezet [5, 6], amelyeket egzotikusabb diszperzió és jellemzően nagyobb topologikus töltés határoz meg. Az ilyen degenerációk azonban jóval pontosabb finomhangolást igényelnek, ezért perturbációkkal szemben egyre instabilabbak. A pontszerű kétszeresen degenerációk mellett léteznek többszörös degenerációk [7, 8], valamint nem pontszerű degenerációk is [9, 10].

Bár bizonyos finomhangolt degenerációk speciális szimmetriák révén stabilitást nyerhetnek, mások eleve instabilak, ezért kevésbé vizsgáltak. Bár történtek osztályozási kísérletek, ezek eredményei korlátozottak, és gyakran figyelmen kívül hagyják az instabil degenerációkat [8, 11]. Egy olyan szisztematikus elméleti keret, amely egységes osztályozást adna, mindmáig hiányzik. Egy ilyen keret felállítása nyitott probléma, amely mélyebb betekintést ígér ezen összetett energiadegenerációk szerkezetébe és stabilitásába.

Célkitűzések

A degenerációk osztályozásának első lépése a konkrét példák vizsgálata. A spinsrendszerek Hamilton-operátora lineáris, ami egyszerűbbé teszi a degenerációk keresését. A legegyszerűbb összetett spinrendszer két kölcsönható feles spinű részecskéből áll, amely kísérletileg dupla kvantumdotban valósítható meg, ahol mindkét dot egy-egy elektront tartalmaz [3]. Az energiadegenerációkkal kapcsolatban természetesen felmerülő kérdések a következők: hány Weyl-pont lehet jelen egy ilyen rendszer paraméterterében? Milyen más, nem Weyl-jellegű degenerációk bukkanhatnak fel és ezek hogyan hasadnak fel perturbáció hatására Weyl-pontokká? Milyen a diszperziós relációjuk? Mennyire instabilak? Előfordulhatnak-e vonal- vagy felületszerű degenerációk a spinrendszerben? Milyen geometriai mintázatot rajzolnak ki együtt a degenerációk, és hogyan oszlik meg közöttük a topologikus töltés? Ezek a kérdések nemcsak két kölcsönható spin rendszerére vonatkoznak, hanem a kristályok delokalizált elektronjait leíró, hullámszámfüggő Hamilton-operátorokra is relevánsak.

Ezen kérdések megválaszolásához célszerűbb a degenerációk környezetében a kétállapotú effektív Hamilton-operátort kiszámítani, mintsem az egész négyállapotú rendszer teljes diagonalizációját elvégezni. Ez a Schrieffer–Wolff-transzformációval érhető el, amely olyan módszer, amely bemenetként egy majdnem degenerált Hermitikus mátrixot vesz, és kimenetként egy redukált Hermitikus mátrixot ad, amely a közel degenerált alteret írja le [12, 13, 14, 15].

Egy természetes, és a dolgozatban gyümölcsözőnek bizonyuló ötlet az, hogy a fenti kérdéseket, valamint a Schrieffer–Wolff-transzformációt a Hermitikus mátrixok terében vizsgáljuk. Ezen tér nagy részét olyan mátrixok alkotják, amelyek sajátértékspektruma nem degenerált, ugyanakkor létezik benne egy részhalmaz is, amely degenerált spektrumú mátrixokat tartalmaz [16, 17]. Ez a részhalmaz érdekes geometriai tulajdonságokat hordoz, és célunk ezen tulajdonságok megértése és kihasználása a fenti kérdések vizsgálatakor.

Egy további természetes, és a dolgozatban is hasznosnak bizonyuló ötlet a hatékony Hamilton-operátor nyommentes részének Pauli-felbontása, amely lehetővé teszi, hogy azt vektorértékű függvényként ábrázoljuk. Ebben a reprezentációban az energiadegenerációk ennek a függvénynek a gyökeinek felelnek meg. Ez a megközelítés várhatóan hasznos lesz a fenti kérdések vizsgálatakor, mivel a függvények gyökeinek jellemzése és osztályozása, valamint ezek perturbációkra adott reakciója a matematikában, és különösen a szingularitáselméletben intenzíven kutatott irány [18]. Például egy degeneráció topologikus töltése megfelel a vektormezőként tekintett kétállapotú effektív Hamilton-leképezés lokális fokszámának, azaz annak, hogy a függvény hányszor tekeredik körbe az origó körül. Ez természetes módon felveti a kérdést, hogy mi a lokális fok komplex analógiájának, a lokális multiplicitás a fizikai jelentése. Célunk a szingularitáselmélet eredményeinek felhasználása energiadegenerációk jellemzésére paraméterfüggő kvantumrendszerekben.

Új tudományos eredmények

A disszertációmban ismertetett új tudományos eredmények az alábbi tézispontokban összegezhetőek:

1. **Degenerációk karakterizációja egy két-spin rendszerben.** A kutatómunkám során elsőként megvizsgáltam egy dupla kvantumdotban létrejövő kétspin-rendszer alapállapoti degenerációit. A degenerációk helyére analitikus eredményt adtam, ami alapján osztályozni tudtam a rendszerben létrejövő degenerációs konfigurációkat. Meghatároztam melyek a stabil konfigurációk és mi a generikus átmenet közöttük. Kiszámoltam a finomhangolt esetek instabilitását, azaz mennyi paraméter hangolásával érhetőek el.

   Ezenkívül meghatároztam a különböző konfigurációkban a topologikus töltés eloszlását. A görbementi és felületi degenerációk esetén bevezettem a megfelelő topologikus töltéssűrűséget, és azt találtam, hogy a vonaldegenerációk általában zérus töltéssűrűséggel rendelkeznek, ezzel szemben a felületek töltéssűrűsége folytonos.

   Kapcsolódó publikáció: I.,II.

2. **Effektív Hamilton-operátor és kapcsolata a degenerációkkal.** Megvizsgáltam, hogy mi a kapcsolat egy Hamilton-operátor degenerációja és a belőle kvázi-degenerált perturbációszámítással (Schrieffer–Wolff traszformáció) képzett nyomnélküli effektív Hamilton-operátora között. Megmutattam, hogy a Schrieffer–Wolff-transzformáció természetes lokális koordinátarendszert ad a Hermitikus mátrixok degenerációs sokaságának közelében, amelyben a hatékony Hamilton-operátor a degenerációra merőleges koordinátákban fejezhető ki.

   Bizonyítottam, hogy egy Hamilton-operátor sajátértékeinek felhasadása arányos a Hamilton-operátornak a Hermitikus mátrixok terében vett távolságával a degenerációs sokaságtól. Mivel a degenerációk az effektív kétállapotú Hamilton-leképezés zérushelyeiként jelennek meg, azt javasoltam, hogy ezeket magával a leképezéssel azonosítsuk. Ez a keret lehetővé teszi a degenerációk vizsgálatát a szingularitáselmélet eszközeivel.

   Ebben a keretben többféle definíciót adtam a Weyl-pontokra, igazoltam ezek ekvivalenciáját, és bebizonyítottam, hogy a Weyl-pontok stabil és generikus degenerációk, hasonlóan két síkbeli görbe transzverz metszéséhez.

   Kapcsolódó publikációk: III.

3. **Nem generikus pontszerű degenerációk születési kvótája.** Megmutattam, hogy nem generikus pontszerű degenerációk perturbációja során keletkező Weyl-pontok számának nemcsak a topologikus töltés által meghatározott minimuma van, hanem létezik egy maximális szám is, amelyet születési kvótának neveztünk el. Három módszert is adtam a születési kvóta meghatározására; mindegyik a Schrieffer–Wolff-transzformáció alkalmazásával indul a Hamilton-operátorra, majd az így kapott kétállapotú effektív Hamilton-operátor vektorértékű függvényként való értelmezésével folytatódik.

   Megmutattam, hogy a degeneráció születési kvótája megfelel ennek a függvénynek a multiplicitásának, hasonlóan ahhoz, ahogy a topologikus töltés (a minimális szám) megfelel a fokszámnak.

   Kiszámítottam a születési kvótát a többrétegű ABCA-rendben rétegzett grafén elektronikus sávszerkezetének izolált, nem generikus kétszeres degenerációs pontjaira, valamint minden szimmetria által stabilizált degenerációs pontra háromdimenziós kristályos anyagokban.

   Kapcsolódó publikációk: IV.

A tézispontokhoz kapcsolódó publikációk:

I. Gy. Frank, Z. Scherübl, Sz. Csonka, G. Zaránd, and A. Pályi, *Magnetic degeneracy points in interacting two-spin systems: Geometrical patterns, topological charge distributions, and their stability.* Physical Review B **101** 245409 (2020).

II. Gy. Frank, D. Varjas, P. Vrana, G. Pintér, and A. Pályi, *Topological charge distributions of an interacting two-spin system.* Physical Review B **105** 035414 (2022).

III. G. Pintér, Gy. Frank, D. Varjas, A. Pályi, *The geometry of the Hermitian matrix space and the Schrieffer–Wolff transformation.* Quantum Journal, under review, arXiv:2407.10478.

IV. G. Pintér, Gy. Frank, D. Varjas, A. Pályi, *Upper bound on the number of Weyl points born from a nongeneric degeneracy point.* Physical Review B **110** 245124 (2024).

További publikációk:

V. A. Sen, Gy. Frank, B. Kolok, J. Danon, and A. Pályi, *Classification and magic magnetic field directions for spin-orbit-coupled double quantum dots.* Physical Review B **108** 245406 (2023).

VI. Gy. Frank, D. Varjas, G. Pintér, and A. Pályi, *Weyl-point teleportation.* Physical Review B **109** 205415 (2024).

VII. G. Naselli, Gy. Frank, D. Varjas, I. C. Fulga, G. Pintér, A. Pályi, and V. Könye, *Stability of Weyl node merging processes under symmetry constraints.* Physical Review Letters **133** 196602 (2024).

VIII. Gy. Frank, G. Pintér, and A. Pályi, *Singularity theory of Weyl-point creation and annihilation.* Physical Review B, under review, arXiv:2309.05506.

IX. Z. Guba, Gy. Frank, G. Pintér, and A. Pályi, *Weyl points in ball-and-spring mechanical systems.* Physical Review B, under review, arXiv:2302.08241.

Hivatkozások

[1] N. P. Armitage, E. J. Mele, and A. Vishwanath, „Weyl and Dirac semimetals in three-dimensional solids,” *Rev. Mod. Phys.*, vol. 90, p. 015001, Jan 2018.

[2] B. Yan and C. Felser, „Topological materials: Weyl semimetals,” *Annual Review of Condensed Matter Physics*, vol. 8, no. 1, pp. 337–354, 2017.

[3] Z. Scherübl, A. Pályi, G. Frank, I. E. Lukács, G. Fülöp, B. Fülöp, J. Nygård, K. Watanabe, T. Taniguchi, G. Zaránd, and S. Csonka, „Observation of spin-orbit coupling induced Weyl points in a two-electron double quantum dot,” *Communications Physics*, vol. 2, pp. 1–6, Sept. 2019.

[4] J. Liu and D. Vanderbilt, „Weyl semimetals from noncentrosymmetric topological insulators,” *Physical Review B*, vol. 90, no. 15, p. 155316, 2014.

[5] C. Fang, M. J. Gilbert, X. Dai, and B. A. Bernevig, „Multi-Weyl topological semimetals stabilized by point group symmetry,” *Phys. Rev. Lett.*, vol. 108, p. 266802, Jun 2012.

[6] T. Zhang, R. Takahashi, C. Fang, and S. Murakami, „Twofold quadruple Weyl nodes in chiral cubic crystals,” *Phys. Rev. B*, vol. 102, p. 125148, Sep 2020.

[7] B. Bradlyn, J. Cano, Z. Wang, M. Vergniory, C. Felser, R. J. Cava, and B. A. Bernevig, „Beyond dirac and weyl fermions: Unconventional quasiparticles in conventional crystals,” *Science*, vol. 353, no. 6299, p. aaf5037, 2016.

[8] Z.-M. Yu, Z. Zhang, G.-B. Liu, W. Wu, X.-P. Li, R.-W. Zhang, S. A. Yang, and Y. Yao, „Encyclopedia of emergent particles in three-dimensional crystals,” *Science Bulletin*, vol. 67, pp. 375–380, feb 2022.

[9] C. Fang, Y. Chen, H.-Y. Kee, and L. Fu, „Topological nodal line semimetals with and without spin-orbital coupling,” *Phys. Rev. B*, vol. 92, p. 081201, Aug 2015.

[10] W. Wu, Y. Liu, S. Li, C. Zhong, Z.-M. Yu, X.-L. Sheng, Y. X. Zhao, and S. A. Yang, „Nodal surface semimetals: Theory and material realization," *Phys. Rev. B*, vol. 97, p. 115125, Mar 2018.

[11] H. Teramoto, K. Kondo, S. Izumiya, M. Toda, and T. Komatsuzaki, „Classification of Hamiltonians in neighborhoods of band crossings in terms of the theory of singularities," *Journal of Mathematical Physics*, vol. 58, no. 7, 2017.

[12] J. M. Luttinger and W. Kohn, „Motion of electrons and holes in perturbed periodic fields," *Phys. Rev.*, vol. 97, pp. 869–883, Feb 1955.

[13] R. Winkler, S. Papadakis, E. De Poortere, and M. Shayegan, *Spin-orbit coupling in two-dimensional electron and hole systems*, vol. 41. Springer, 2003.

[14] S. Bravyi, D. P. DiVincenzo, and D. Loss, „Schrieffer–Wolff transformation for quantum many-body systems," *Annals of Physics*, vol. 326, no. 10, pp. 2793–2826, 2011.

[15] I. A. Day, S. Miles, H. K. Kerstens, D. Varjas, and A. R. Akhmerov, „Pymablock: an algorithm and a package for quasi-degenerate perturbation theory," *arXiv preprint arXiv:2404.03728*, 2024.

[16] V. I. Arnold, „On matrices depending on parameters," *Russian Mathematical Surveys*, vol. 26, no. 2, p. 29, 1971.

[17] V. I. Arnold, „Remarks on eigenvalues and eigenvectors of Hermitian matrices, Berry phase, adiabatic connections and quantum Hall effect," *Selecta Mathematica-new Series*, vol. 1, pp. 1–19, Mar. 1995.

[18] D. Mond and J. J. Nuño-Ballesteros, *Singularities of mappings: The local behaviour of smooth and complex analytic mappings*, vol. 357. Springer, 2020.