Rendezett fázis vizsgálata fcc rácsban
és
nyílt dinamikák visszatérési idejének meghatározása

SINKOVICZ PÉTER

Doktori disszertáció

TÉMAVEZETŐ:
DR. SZIRMAI GERGELY
Tudományos munkatárs
MTA WIGNER FK SZFKI

PÉCSI TUDOMÁNYEGYETEM
Természettudományi Kar
(2016)

KÖSZÖNETNYILVÁNÍTÁS

A doktori disszertációm több éves kutatómunkám eredménye, mely során számos nehézséggel szembesültem: a kutatási téma kiválasztása és a nemzetközi szakirodalom megismerése, feldolgozása. Habár a doktori kutatómunka alapvetően önálló munka, mégis a felmerülő problémákban számíthattam a témavezetőm és kollégáim útmutatásaira, melyek nélkül ez a disszertáció sem születhetett volna meg.

Szeretnék kiemelt köszönetet mondani témavezetőmnek, Szirmai Gergelynek, aki szakmai segítségével az MSc diplomamunkám kezdetétől irányt mutatott tudományos érdeklődésemnek, majd doktori kutatásaim, illetve a disszertáció elkészítése során mindvégig mederben tartotta gondolataimat.

Köszönöm Kiss Tamásnak emberi és szakmai pártfogását doktori képzésem során, valamint Asbóth Jánossal együtt nyújtott szakmai támogatását a nyílt kvantum rendszereken való visszatérési idő vizsgálatának terén.

Szeretném a hálámat kifejezni Penc Karlónak, akivel lehetőségem adódott az egyes spinábrázolási modellekről diszkutálni, továbbá az SU(4) szimmetrikus Heisenberg-modell fcc rácson kialakuló alapállapoti fázis vizsgálatának problémafelvetésével lehetőséget adott arra, hogy vezetésével beletanulhassak a spin-hullám számolásba.

Köszönöm Kurucz Zoltánnak, hogy a kutatásaim során felmerülő kérdéseimet és ötleteimet megoszthattam vele, melyeket az általa megszokott precizitással és kritikával fogadta. A közös diszkusszióink jelentősen hozzájárultak a szakmai látásmódom formálódásához.

Szeretném megköszönni Domokos Péternek, hogy MSc és doktori tanulmányaim során helyet biztosított nekem a csoportjában, és hogy lehetővé tette számos hazai és külföldi iskolán, látogatáson és konferencián való részvételemet.

Továbbá köszönöm kollégáinak, Kónya Gábornak, Kis Zsoltnak, Szalay Viktornak, Kollár Bálintnak, Ádám Péternek, Darázs Zoltánnak, Kálmán Orsolyának, Gilyén Andrásnak, Dombi Andrásnak, Janszky Józsefnek, Nagy Dávidnak, Vukics Andrásnak és Tóth Gézának, hogy kutatásaim során formális és informális beszélgetéseinkkel, visszajelzéseikkel hozzájárultak szemléletmódom alakulásához.

Végezetül hálásan köszönöm Édesanyámnak, családtagjaimnak és barátaimnak, hogy személyes támogatásukkal és bátorításukkal hozzájárultak doktori kutatásaim sikeres lefolytatásához és a disszertáció létrejöttéhez.

Tartalomjegyzék

Köszönetnyilvánítás . . . iii
Tartalomjegyzék . . . v
Ábrák jegyzéke . . . ix

Bevezető **1**

I Irodalmi áttekintés **3**

1 Nyílt kvantumrendszerek **5**

1.1 Sztochasztikus dinamika nyíltrendszerekben . . . 5
1.1.1 Klasszikus dinamika homogén Markov-láncokban . . . 6
A dinamika átmeneti mátrixos tárgyalása . . . 7
Az átmeneti mátrix kanonikus alakja . . . 8
Egyensúlyi eloszlás . . . 9
Reguláris Markov-láncok . . . 10
1.1.2 Iterált nyílt kvantum csatornák . . . 13
A dinamika kvantumcsatornával megadott tárgyalása . . . 15
Kvantumcsatorna mint nyílt dinamika . . . 17
A Hilbert-tér szerkezete a csatorna aszimptotikus viselkedése alapján . . . 18
Kvantumcsatornák spektrális tulajdonsága . . . 19
Ergodikus kvantumcsatornák . . . 20
1.2 Átlagos első visszatérési idő . . . 21
1.2.1 Átlagos első visszatérési idő klasszikus rendszerekben . . . 22
Pólya féle visszatérési szám . . . 22
Átlagos első visszatérési idő definíciója . . . 23
Kac lemma . . . 24
Kvantált átlagos első visszatérési idő duplán sztochasztikus rendszerekben . . . 26
1.2.2 Átlagos első visszatérési idő zárt kvantum rendszerekben . . . 26
A mérés problémája . . . 27
Átlagos első visszatérési idő definíciója . . . 28
Kvantált átlagos első visszatérési idő zárt kvantumrendszerekben . . . 30

2 Az SU(N) Heisenberg-modell **33**
2.1 Mágneses fázisok . . . 33
2.2 Heisenberg-modell . . . 34
2.2.1 Az egyes rácspontokon lévő spinek közti kölcsönhatás eredete . . . 35
Pauli-elv következménye . . . 35
Direkt kicserélődés (exchange) . . . 37
Kinetikus kicserélődés (superexchange) . . . 38
2.2.2 Az SU(N) szimmetrikus Heisenberg-modell . . . 38
2.2.3 Az antiferromágneses Heisenberg-modell alapállapota . . . 39
2.3 Optikai csapdák . . . 41
2.3.1 A Hesienberg-modell, mint a Hubbard modell határesete . . . 41
2.3.2 A Hubbard-modell optikai csapdákkal való megvalósítása . . . 42
2.4 Átlagtér közelítések . . . 43
2.4.1 Spinhullám-közelítés . . . 44
Holstein-Primakoff transzformáció . . . 45
Magas spinekre kiterjesztett Holstein-Primakoff transzformáció . . . 46
Order-by-disorder mechanizmus . . . 46
2.5 Rendezettség kísérleti bizonyítéka . . . 48

II Saját eredmények **51**

1 Átlagos első visszatérési idő iterált dinamikákban **53**
1.1 Átlagos első visszatérési idő nyílt rendszerekben . . . 53
1.2 Kvantált visszatérési idő . . . 55
1.2.1 Kvantált átlagos első visszatérési idő iterált nyílt rendszerekben . . . 57
1.2.2 Példák . . . 59
Releváns Hilbert-tér bemutatása különböző analitikus példákon . . . 59
Szimmetria törő, de nem unitalitás sértő dinamika vizsgálata teljes gráfon . . . 61
Egyetlen populációtranszferrel sértet unitális dinamika teljes gráfon . . . 63
1.3 A csatorna fixpontja és az átlagos első visszatérési idő kapcsolata . . . 65
1.3.1 Általánosított Kac lemma . . . 65
1.3.2 Példák . . . 67

2 Order-by-disorder mechanizmus során kialakuló alapállapot az SU(4) Heisenberg-modellben **71**
2.1 Az su(4) Heisenberg-modell vizsgálata fcc rácson . . . 71
2.1.1 Klasszikus alapállapot . . . 72
Helikális rendeződés . . . 74
Spin-spin korrelációs függvény . . . 75
2.1.2 Kvantum fluktuációk . . . 76
A kvantum fluktuációk teljes energiajáruléka vezető rendben . . . 77
A $\vartheta = 0$ alapállapot energiájának egzakt meghatározása . . . 79
A $\vartheta = \pi/2$ maximális energiájú állapot energiájának egzakt meghatározása . . . 81

2.1.3 A másodszomszéd kölcsönhatással kiterjesztett modell 81
2.1.4 A $\vartheta = 0$ konfiguráció stabilitásvizsgálata véges hőmérsékleten 82
A $\vartheta = 0$ konfiguráció alrácsmágnesezettsége véges hőmérsékleten 83

Függelék **87**
A Átlagos elérési idő 87
B A Hubbard-modell $n_i = M$ és $U >> t$ effektív modelljének származtatása 88
C Schwinger-reprezentáció 89
D Rácspont betöltés és az SU(N) szimmetria kapcsolata 91
D.1 Az SU(N) és az U(N) szimmetria reprezentációja 92
D.2 Az SU(N) és az U(N) csoportok közös Casimir-operátorai 93
D.3 A rácspont egyszeres betöltése és az su(N) szimmetria fundamentális reprezentációjának kapcsolata 94
E Releváns Hilbert-tér tulajdonságai 95
F Átlagos első visszatérési idő egyszerűbb alakja 96
G Egyenletes eloszlású véletlen szám generálása a komplex egységkörön 97
H A kezdőállapotba való visszatérés definíciója és teljesülése 98

Summary **101**
1 Antecedents and motivations of our work 101
1.1 Average recovery time in physical systems 101
1.2 Ground state of the SU(N) Heisenberg model 102
2 Summary of results 103
2.1 The average first return time of open quantum systems 103
2.2 SU(4) symmetric anti-ferromagnetic Heisenberg model on an fcc lattice 104

Új tudományos eredmények **107**

Publikációs lista **109**
[I] Generalized Kac's Lemma for Recurrence Time in Iterated Open Quantum Systems 111
[II] Order by disorder in a four-flavor Mott insulator on the fcc lattice 117
[III] Quantized recurrence time in unital iterated open quantum dynamics 129

Irodalomjegyzék **139**

Ábrák jegyzéke

I.1.1. Az ábrázolt klasszikus (magenta), illetve kvantumos (kék) folyamatokban kialakuló megtalálási valószínűségek (jobb oldal: feltételes dinamika mellett, bal oldal: unitér dinamika esetén) numerikus meghatározásához egy $N = 900$ rácspontból álló gyűrűt használtam. Az egyes eloszlások a $t_1 = 600$ (felső két ábra) és $t_2 = 1200$ (alsó két ábra) futási idő mellett alakultak ki. 29

I.2.1. Szomszédos rácspontok spinjei között lehetséges superexchange mechanizmus. Két szomszédos, ellenetetés állású spin a Hamilton-operátor kinetikus tagjának köszönhetően rövid időre egy rácspontra kerülhet (mely U kölcsönhatással büntetve van), majd a H_{kin} segítségével újra szétválhatnak és a visszaugrás során a kezdeti állapothoz képest kicserélődhetnek. 42

I.2.2. A Heisenberg-modell klasszikus alapállapotának meghatározása során fellépő frusztrációk és szabadságok. (a) Az háromszög geometriára tett SU(2) szimmetrikus Heisenberg-modell frusztrációhoz vezet. (b) Az inhomogén SU(2) Heisenberg-modell fcc rácsban történő vizsgálatánál az alapállapoti konfiguráció megválasztásának szabadsága figyelhető meg. (c) Az SU(3) homogén Heisenberg-modell bipartit rácson való megoldása degenerált klasszikus spinkonfigurációra vezet. 47

II.1.1. Különböző $|t|$ és d futási paraméterek mellett a p_t első visszatérés valószínűsége. A $d = 0$ esetben a folyamatot vezérlő $\mathcal{T}[\cdot]$ csatorna a II.1.18 Hamilton operátorral megadott $C[\cdot]$ koherens csatornának felel meg, míg $d = 1$ esetén a dinamika helyettesíthető egy homogén Markov folyamattal. 57

II.1.2. Az első visszatérés valószínűségeloszlásai az $M = 6$ rácspontot tartalmazó csillaggráfban, melyek a $\tilde{t}$ átmeneti amplitúdó változtatásával különbözőképpen viselkednek. Véges dekoherencia esetén $T_0 = 6$, míg a $d = 0$ speciális esetben $T_0 = 2$. 60

II.1.3. A T_N részleges átlagos első visszatérési idő az $M = 6$ rácspontot tartalmazó csillaggráf $|0\rangle$ kezdőállapotba $N = 700$ (magenta) és $N = 7000$ (sárga) lépésig, valamint a II.1.35 egyenletből adódó egzakt eredmény (piros). A színessel jelölt tartomány 2000 különböző darab, véletlen $\{t_i\}$ hoppingokkal generált, dinamikák szórásából adódó szimmetrikus eltérés, azaz becsülten, 65% valószínűséggel a $\lim T_N$ a jelölt tartomány belül lesz. 61

II.1.4. Az első visszatérés valószínűségeloszlása egy $M = 6$ rácspontú teljes gráfban, ahol a dinamikában egy unitér időlépést egy aszimmetrikus populációtranszfer követ (lsd. (a) ábra). A bolyongás unitér időfejlődését egy $U = e^{-iH}$ operátor definiálja, ahol H egy véletlen hermitikus mátrix, mely minden $t_{i,j}$ elemének az abszolútértéke 0.1-nél kisebb. Habár a (b) ábrán látható p_t valószínűségi eloszlások jelentősen eltérnek, mégis a hozzájuk tartozó $T_0 = \sum tp_t$ átlagos első visszatérési idők megegyeznek ($T_0 = 6$). 62

II.1.5. A T_0 átlagos első visszatérési idő egy $M = 6$ pontú teljes gráfon, ahol minden unitér időlépést különböző populációátvitel követi. Az egyes inkoherens folyamatok elrontják a csatorna unitalitását, így a T_0 több lehetséges értéket vehet fel, a kiszélesedések tipikus értékeit a besatírozott tartományok jelölik. 64

II.2.1. A klasszikus konfiguráció két speciális esete. Az ábrán a $\{\xi_{i,\alpha}\}$ vektorok által kifeszített lokális négydimenziós tér különböző bázisvektorait eltérő színekkel jelöltem, mely irányok páronként merőlegesek egymásra. 73

II.2.2. Az fcc rács egy oktaéderének klasszikus alapállapoti spinkonfigurációjának megválasztásának elemi lépései. A konstrukciós gráf mindhárom végállapotában marad egy rácspont, melyen egy szabad ϑ paraméter, mellyel két szélsőérték között folytonosan megválaszthatjuk annak a konfigurációját. 74

II.2.3. A helikális állapot ordering wave vektorjainak ábrázolása különböző ϑ értékek mellett. (a) A Brillouin zóna és a magas szimmetriájú pontok. (b) A $\vartheta = 0$ triviális konfigurációban a ordering wave vektorok az X magaszimmetriájú pontban találhatóak. (c) Egy közbülső ϑ érték mellet a Q_1 és a Q_2 ordering wave vektorok felhasadnak. (d) A $\vartheta = \pi/2$ csavart állapotban a ordering wave vektorok a W_1 és a W_2 magas szimmetriájú pontokba kerülnek ($Q_1^+ = Q_1^-$ és $Q_2^+ = Q_2^-$). 75

II.2.4. (a) A spinhullámok által okozott energiakorrekció a ϑ függvényében. A korrekció a $\vartheta = 0$-ban veszi fel a minimum és $\vartheta = \pi/2$-ben pedig a maximum értékét. A kapott korrekció a ϑ páros függvénye, azaz $E^{(2)}(\vartheta) = E^{(2)}(-\vartheta)$, valamint π-ben periodikus, azaz $E^{(2)}(\vartheta) = E^{(2)}(\vartheta + \pi)$. A π periodicitás és a $\pi/2$ pontra vett szimmetriája az $E^{(2)}$-nek a modell globális su(4) szimmetriájából fakad. (b) Az energiakorrekció $E^{(2)}/N_s = e_0 + \sum e_d \cos(2d\vartheta)$ Fourier-transzformációjában szereplő e_d együtthatók $\propto d^{-3.5}$-es skálázásából látható, hogy közel sem analitikus a viselkedése, habár ránézésre annak tűnik. Az első két Fourier-együttható $e_0 = -1.843MJ$-nek és $e_1 = -0.043MJ$-nek adódott. 79

II.2.5. A spinhullámszámolás kvantum fluktuációinak diszperziós relációja (a) az első szomszéd és (b) a másodszomszéd kölcsönhatásokkal kiterjesztett Heisenberg-modellben. Az ábra elkészítéséhez a másodszomszéd kölcsönhatásokat egy $J_2/J = -0.086$ erősségű ferromágneses csatolással vettük figyelembe. Az egyes energianívók egyszeresen, kétszeresen, illetve háromszorosan degeneráltak, melyeket a vonalak vastagságának fokozatos növelésével, illetve rendre a kék, arany és piros színekkel jelöltünk. 80

II.2.6. A helikális állapot szabadenergiája különböző hőmérséklet értékek mellett. A $T/J = 1$ (kék) és a $T/J = 0.5$ (arany) hőmérsékletekhez tartozó görbéket egy hőmérséklet függő konstanssal való eltolással illesztettem a $T/J = 0$ (magenta) görbéhez. Jól látható, hogy az egyes görbék a $\vartheta = 0$ érték mellett veszik fel a minimumukat. Az ábra adatait a $J_2/J = -0.086$ érték mellett határoztam meg. 83

II.2.7 A J_2 másodszomszéd kölcsönhatással kiterjesztett modellben a spinrövidülés hőmérséklet függése. A $J_2 = 0$ értéke esetén a $T \neq 0$ hőmérsékleten a spinrövidülés divergál, így csak a $T = 0$ pontban jeleztem az értékét, ahol is 0.590-cel egyezik meg. Valamint különböző $J_2 \neq 0$-ra ábrázoltam a spinrövidülés hőmérséklet függését. 85
A.3.1 A komplex egységkörön egyenletes eloszlást követő $N = 100$, 500 és 1000 darab numerikusan generált véletlen szám. 98

Bevezető

A tudományos elméletek megjelenésének szükségességét megkövetelte a minket körülvevő makroszkopikus események időről-időre való bekövetkezésének megfigyelése. Ilyen periodikus események voltak például a nappalok és éjszakák váltakozásai, vagy az évszakok múlása és újbóli előkerülésük. A megfigyelt szabályszerűségek mögöttes természeti törvényre, illetve törvényekre utalnak. A példaként említett megfigyelések magyarázata a Föld forgásának, illetve keringésének figyelembevételével tehető meg. Ezen érveléseket már az ókori kultúrákban is ismerték, továbbá észrevették, hogy egy év elteltével a Föld nem pontosan az azt megelőző pozíciójába tér vissza, hanem csak egy annak közeli pontjába. A megfigyeléseikből azonban arra következtettek, hogy bizonyos idő elteltével a Föld mégis visszatér a kezdeti pozíciójába, mely időt ”*Great Year*”-nek, illetve ”*Platonic Year*”-nek nevezték. Az akkori legpontosabb számításokat a babilóniaiak végezték, akik az egy évet 360 nappal azonosították (innen ered a teljes kőr 360 fokra való felosztása), míg a Great Year-t 36.000 évvel[1–3].

Newton az 1687-ban megjelenő munkájával látszólag a teljes leírását megadta a naprendrendszerben található összes bolyogó mozgásának megértéséhez[4], azonban több mint két testből álló rendszerre mégse sikerült konkrét megoldást találni. A megoldatlan problémák legegyszerűbbike a három test probléma volt[5], melyre a 19. század végére különböző kezdeti-feltételek mellet már léteztek közelítő megoldások[6], míg az egzaktak léte továbbra is nyitott kérdés maradt. II. Oscar svéd király 1887-ben közzétett felhívására Poincaré elkezdett foglalkozni ezzel a minimál problémával, amit azonban negatív eredménnyel zárt. Megállapította, hogy a problémát nem lehet zárt alakban megoldani. Ezenfelül a díj elnyerésében a további két pozitív eredményé is segítette: 1) Rámutatott arra, hogy a kezdeti feltételek kis változtatására, a korábban nem tapasztalt módon, a megoldás igen nagy különbségeket mutathat, mely érzékenységre a számolás során figyelnünk kell. (Ezen észrevételéből forrott ki a káoszelmélet). 2) Valamint az adott problémán túlmutatóan bebizonyította, hogy ha egy folyamatban megmarad az állapotokhoz rendelt valószínűségi mérték, akkor a rendszer majdnem minden állapotába visszatér egy adott idő után (Poincaré idő)[7–9].

Poincaré az általa bevezettetett visszatérési idő nagyságára, illetve átlagos visszatérések gyakoriságára se tett semmiféle becslést. Erre egészen 1947-ig várni kellett, amikor is Kac bebizonyította, hogy ha egy állapot visszatérő akkor végtelenszer visszatérő, valamint a róla elnevezett lemma segítségével meghatározta egy állapot átlagos visszatérési idejét. A Kac lemma értelmében egy állapot átlagos visszatérési ideje megegyezik az állapot egyensúlyi eloszlásának reciprokával[10]. A lemma erősségét a dolgozatban még alaposabban ismertetem, így most csak egy szokatlan alkalmazását szeretném bemutatni: Hasonlítsuk össze a 2^n ($n \in \mathbb{N}$) sorozat első számjegyében a 7-es és a 8-as számjegyek előfordulásának gyakoriságát (10-es számrendszerben), valamint hogy átlagosan hány lépés múlva lesz az első számjegy újból 7-es, illetve 8-as. A sorozat minden tagját felírhatjuk a $2^n = B \cdot 10^k$ alakban, ahol $1 \leq B < 10$ és $k \in \mathbb{N}$. Tehát ha $7 \leq B < 8$, akkor a sorozat adott elem 7-essel, míg $8 \leq B < 9$ esetén 8-sal kezdőik. Véve az előző felbontásnak a tízes alapú logaritmusát, a következőt kapjuk: $n \log(2) = k + \log(B)$. Tehát minden egyes tag első számjegyét úgy kaphatjuk meg, hogy

vesszük n-szer a log(2)-t és annak az egész részét eldobva megnézzük, hogy a kapott szám mely két egész szám logaritmusa között van (ha a kapott szám $[\log(7), \log(8))$ intervallumba esik akkor a sorozat adott tagja a 7-es számjeggyel kezdődik). Mivel $0 \leq \log(B) \leq 1$, így mindkét oldalt 2π-vel megszorozva az eredeti problémát egy egységkörön való forgásra képezhetjük le, melyben az egységnyi forgást a $2\pi \log(2)$ nagyságú szög definiálja. Tehát a tagok kezdőszámjegyének egyensúlyi eloszlását a hozzájuk tartozó egységkörön felvett 2π-vel normált ívhosszakkal határozhatjuk meg, melyből annak a valószínűsége hogy a 2^n kifejezés 7-essel kezdőik: $P_7 = \log(8) - \log(7) \simeq 0.058$, hasonlóan $P_8 \simeq \log(9) - \log(8) = 0.051$. Tehát a Kac lemmából fakadóan átlagosan minden 7-es számjeggyel kezdődő tagot $N_7 \simeq 1/0.058 \simeq 17.24$ lépés után egy újabb követi, míg 8-as esetén ez a szám: $N_8 \simeq 1/0.051 \simeq 19.6$. Vegyük észre, hogy az előző eredmény (néhány speciális hatványalaptól eltekintve) univerzális.

A makroszkopikus rendszerek leírásától eltávolodva módosítanunk kell a rendszert definiáló dinamikát. Tehát míg bizonyos klasszikus rendszerekben az időfejlődést egy transzfermátrix ismételt alkalmazásának segítségével adhattuk meg, addig a kvantumvilág egy zárt rendszerében ezt a dinamikát egy unitér operátor iterált alkalmazása váltja fel. Továbbá, míg klasszikus rendszerekben az átlagos első visszatérési idő definiálása nem ütközött semmilyen problémába, addig a kvantumvilágban ez a lépés már nem tehető meg egyértelműen, hiszen valahogy biztosítanunk kell a többszöri visszatérések elkerülését, ami valamiféle beavatkozást kíván meg. A beavatkozás egyik módja a folytonos monitorozás, azaz úgy módosítjuk a dinamikát, hogy minden egyes időlépés végén megmérjük, hogy a rendszer visszatért-e a kezdeti állapotába és ha igen akkor az adott folyamatot ott megállítjuk. A megállításához szükséges időt azonosítjuk a folyamathoz tartozó visszatérési idővel, és az így kapott visszatérési idők (a hozzájuk tartozó) relatív gyakoriságuk segítségével képzett átlagolásából már egyértelműen adódik az átlagos első visszatérési idő. Ezen protokoll mellett 2013-ben Grünbaum *et al.* azt találták, hogy egy tetszőleges, de környezettől elzárt fizikai rendszer egy tetszőlegesen kiválasztott állapotának az átlagos visszatérési ideje egy egész szám, vagy végtelen[11].

A dolgozat első felében a Grünbaum-ék munkájából kiinduló kutatásainkat és eredményeinket mutatom be, melyek egyik fő eredménye az volt hogy a nyílt kvantumrendszerek vizsgálatával sikerült a lehetséges dinamikák egy általánosabb osztályát találni, ahol az átlagos első visszatérési idő továbbra is egy egész értéket vesz fel[12]. Ez az eredményünk egyaránt tartalmazza a klasszikus Kac lemmából származó speciális ilyen folyamatokat, illetve a Grünbaum-ék által vizsgált zárt kvantumrendszereket. A kutatásunk másik fő eredményeként általánosítottuk a klasszikus Kac lemmát a kvantum folyamatok egy, az előző tételnél tágabb, osztályára[13]. Ezen kvantum Kac lemma erősségét az iterált nyílt rendszerekben definiálható átlagos elérési idő meghatározásával demonstráltuk.

Az átlagos első visszatérési idő vizsgálata során egy időátlagolás bevezetésével elkerültük az n test probléma egzakt megoldását, és azok néhány fő jellemzőire koncentrálva általános tételeket fogalmazhattunk meg. A pontos megoldás elkerülésének egy másik módja a térbeli átlagolás, melyet a statisztikus fizikában átlagtérközelítésnek neveznek. Ezen módszerek alapgondolat szerint a rendszer egyes részecskéinek kölcsönhatása a rendszer többi részével helyettesíthető egy, a maradék részből származó effektív térrel, mellyel lokálisan kéttest problémává redukálódik.

A dolgozat második felében a átlagtérközelítések egyik fajtájának, ún. spin-hullám számolás segítségével meghatározom az SU(4) szimmetrikus Heisenberg-modell alapállapoti spin-konfigurációját és véges hőmérsékletű viselkedését fcc rács geometriában. Ezen probléma komplexitása a 3 dimenziós rács magas koordinációs számából és a modellben előírt magas forgási szimmetriából fakad.

I. rész

Irodalmi áttekintés

– 1 –
Nyílt kvantumrendszerek

Gondolatkísérlet során egy fizikai rendszer viselkedését általában úgy próbáljuk megérteni, hogy annak főbb jellemzőit kiragadva modellt készítünk és a modellt a világtól elzárva, "búra alatt" vizsgálunk. Azonban a valóságban ennél egy realisztikusabb képre van szükség, hiszen a vizsgált rendszert nem izolálhatjuk el teljesen. Az elkövetkező fejezetben ezen nyílt rendszerek lehetséges valószínűségi leírását tárgyalom.

"Science never solves a problem without creating ten more."

George Bernard Shaw

1.1. Sztochasztikus dinamika nyíltrendszerekben

A minket körülvevő rendszerekben egy adott mennyiség időbeli változását általában nem adhatjuk meg determinisztikusan, azonban bizonyos valószínűséggel tehetünk becslést az aktuális pillanatban mérhető értékére. Ez a bizonytalanság klasszikus rendszerekben az ismeretünk hiányára utal, míg kvantumos esetben még a kezdőállapot és a dinamika teljes ismerete sem elegendő. Függetlenül attól, hogy egy kiszemelt folyamatban előkerülő véletlen honnan ered, az adott fizikai mennyiség t időpillanatban mért $X(t)$ értékei sztochasztikus változóknak tekinthetőek és jellemzésükre sztochasztikus tárgyalásmódot alkalmazhatunk. A mérés, vagy nyomon követés történhet folyamatosan, vagy diszkrét időlépésekben. Mi utóbbival fogunk foglalkozni, ahol az $\{X_t\}$ valószínűségi változók egy idősort, láncot alkotnak.

Vegyünk egy Kolmogorovi-féle valószínűségi mezőt, azaz $(\Omega, \mathscr{F}, \mathbb{P})$ és legyen $X(t)$ egy az Ω-n értelmezett valószínűségi változó (egy valós értékű mérhető függvény), mely értékét időnként megmérünk. A mérés során az $X_1, \ldots, X_N$ adatsort kapjuk, ahol X_1 az $X(t)$ változó $t = t_1$ időpillanatban mért értéke. Több kísérlet elvégzése után levont tapasztalatból, vagy elméleti jóslatból rendelhetünk az N eseményhez egy $\mathbf{p}_N(X_1, t_1; \ldots; X_N, t_N)$ valószínűségsűrűséget, mely megadja annak a valószínűségét, hogy az adott $\{t_i\}$ időpillanatokban a mérések eredményei az $\{(X_i, X_i + \mathrm{d}X_i)\}$ intervallumokon belül lesznek, azaz

$$\mathbf{P}\left(X_1 \in (X_1, X_1 + \mathrm{d}X_1), t_1; \ldots, X_N \in (X_N, X_N + \mathrm{d}X_N)\right) \equiv \mathbf{p}_N(X_1, t_1; \ldots; X_N, t_N)\, \mathrm{d}X_1, \ldots, \mathrm{d}X_N\,. \tag{I.1.1}$$

Ahhoz, hogy a $\mathbf{p}_N$-re valóban valószínűségsűrűségként tekinthessünk rendelkeznie kell a következő két tulajdonsággal:

1. Normáltság: Ha minden változójában kiintegráljuk az N eseményt tartalmazó $\mathbf{p}_N$ valószínűségsűrűséget a teljes Ω eseménytérre, akkor annak 1-re normáltnak kell lennie, azaz

$$\int_\Omega \dots \int_\Omega \mathbf{p}_N(X_1, t_1; \dots; X_N, t_N)\, \mathrm{d}X_1 \dots \mathrm{d}X_N = 1\,. \tag{I.1.2a}$$

2. Komplementaritás: Ha csak egy változója szerint integráljuk ki az N eseményt tartalmazó $\mathbf{p}_N$ valószínűségsűrűséget, akkor az integrálás eredményeképpen a maradék, $N-1$ eseményhez tartozó $\mathbf{p}_{N-1}$ valószínűségsűrűséget kell visszaadnia, azaz

$$\int_\Omega \mathbf{p}_N(X_1, t_1; \dots; X_i, t_i; \dots; X_N, t_N)\, \mathrm{d}X_i = \mathbf{p}_{N-1}(X_1, t_1; \dots; \cancel{X_i, t_i}; \dots; X_N, t_N)\,. \tag{I.1.2b}$$

Az X_t valószínűségi változót az érdeklődésünknek megfelelően különbözőképpen jellemezhetjük, például megadhatjuk a hozzá tartozó eloszlás-, sűrűség-, n. korrelációs, karakterisztikus vagy generátorfüggvényét, illetve leírhatjuk annak

$$\mathbb{E}[X_t^k] := \int_\Omega X^k \mathbf{p}_1(X, t)\, \mathrm{d}X\,, \tag{I.1.3}$$

k-adik momentumaival, ami a $k = 1$ érték mellett az X_t valószínűségi változó várható értékét, míg $k = 2$ értéknél annak szórását adja.

1.1.1. Klasszikus dinamika homogén Markov-láncokban

A sztochasztikus folyamatokon belül kiemelt figyelmet kapnak a Markov, vagy más néven a memória nélküli folyamatok. Ezen folyamatokat kitünteti az úgynevezett Markov tulajdonság, mely szerint a rendszer jövőbeli állapota nem függ a múltbeli eseményektől, csak annak jelen állapotától, azaz a jelen leírása teljesen magába foglalja az összes olyan információt, ami befolyásolhatja a folyamat jövőbeli helyzetét. A pontosabb matematikai definícióhoz vezessük be a

$$\mathbf{P}(X_N, t_N | X_1, t_1; \dots; X_{N-1}, t_{N-1}) = \frac{\mathbf{p}_N(X_1, t_1; \dots; X_N, t_N)}{\mathbf{p}_{N-1}(X_1, t_1; \dots; X_{N-1}, t_{N-1})} \tag{I.1.4}$$

feltételes valószínűséget, mely megadja, hogy mekkora valószínűséggel mérjük az X_N értéket a t_N időpillanatban, ha előtte $(X_1, t_1), \dots$ és (X_{N-1}, t_{N-1}) események bekövetkeztek. Az I.1.4 egyenletben megadott feltételes valószínűség segítségével definiálhatjuk a Markov-folyamatokat: Egy sztochasztikus folyamatot akkor tekintünk Markovinak, ha minden időpillanatban fennáll rá a

$$\mathbf{P}(X_N, t_N | X_1, t_1; \dots; X_{N-1}, t_{N-1}) = \mathbf{P}(X_N, t_N | X_{N-1}, t_{N-1}) \tag{I.1.5}$$

Markov-tulajdonság, azaz a rendszernek nincs hosszú távú memóriája, hiszen az adott mérési eredmény csak az őt közvetlenül megelőzőtől függ.

A Markov-folyamatokat definiáló I.1.5 tulajdonság és az I.1.2b komplementaritási feltétel maga után vonja a következőt

$$\begin{aligned}
\mathbf{p}_N(X_1, t_1; \dots; X_N, t_N) &= \mathbf{P}(X_N, t_N | X_1, t_1; \dots; X_{N-1}, t_{N-1}) \mathbf{p}_{N-1}(X_1, t_1; \dots; X_{N-1}, t_{N-1}) = \\
&= \mathbf{P}(X_N, t_N | X_{N-1}, t_{N-1}) \mathbf{p}_{N-1}(X_1, t_1; \dots; X_{N-1}, t_{N-1}) = \\
&= \mathbf{P}(X_N, t_N | X_{N-1}, t_{N-1}) \mathbf{P}(X_{N-1}, t_{N-1} | X_{N-2}, t_{N-2}) \mathbf{p}_{N-2}(X_1 t_1; \dots; X_{N-2}, t_{N-2}) = \\
&= \dots = \\
&= \mathbf{P}(X_N, t_N | X_{N-1}, t_{N-1}) \mathbf{P}(X_{N-1}, t_{N-1} | X_{N-2}, t_{N-2}) \dots \mathbf{P}(X_2, t_2 | X_1, t_1) \mathbf{p}_1(X_1, t_1)\,,
\end{aligned}$$

mely szerint a $\mathbf{p}_N(X_1, t_1; \ldots; X_N, t_N)$ valószínűségsűrűség felépíthető az egyes mérések közti átmenetet megadó $\{\mathbf{P}(X_i, t_i|X_{i-1}, t_{i-1})\}$ feltételes valószínűségek segítségével. Az előző összefüggés $N = 3$ és $N = 2$ speciális eseteinek és az I.1.2b komplementaritási feltétel felhasználásával eljutunk a Chapman-Kolmogorov-egyenlethez[14–16]

$$\begin{aligned}
\mathbf{p}_3(X_1, t_1; X_2, t_2; X_3, t_3) &= \mathbf{P}(X_3, t_3|X_2, t_2)\mathbf{P}(X_2, t_2|X_1, t_1)\mathbf{p}_1(X_1, t_1)\,, \\
\mathbf{p}_2(X_1, t_1; X_3, t_3) &= \int_\Omega \mathbf{P}(X_3, t_3|X_2, t_2)\mathbf{P}(X_2, t_2|X_1, t_1)\mathbf{p}_1(X_1, t_1)\,\mathrm{d}X_2\,, \\
\mathbf{P}(X_3, t_3|X_1, t_1)\mathbf{p}_1(X_1, t_1) &= \mathbf{p}_1(X_1, t_1)\int_\Omega \mathbf{P}(X_3, t_3|X_2, t_2)\mathbf{P}(X_2, t_2|X_1, t_1)\,\mathrm{d}X_2\,, \\
\mathbf{P}(X_3, t_3|X_1, t_1) &= \int_\Omega \mathbf{P}(X_3, t_3|X_2, t_2)\mathbf{P}(X_2, t_2|X_1, t_1)\,\mathrm{d}X_2\,,
\end{aligned} \tag{I.1.6}$$

azaz annak a feltételes valószínűsége, hogy ha t_1 időpillanatban X_1 értéket mértünk, akkor t_3 időpontban X_3-at mérünk, megadható úgy, hogy vesszük az (X_1, t_1) pontból minden lehetséges (X_2, t_2) pontba, majd az egyes (X_2, t_2) pontokból az (X_3, t_3) pontba való átmenet valószínűségét és ezt követően valószínűségi értelemben kiátlagolunk az összes közbenső (X_2, t_2) pontokra.

Az elkövetkező fejezetekben olyan rendszerek dinamikájának leírását és a bennük definiálható visszatérési időt vizsgáljuk, melyek állapottere véges, azaz a mérésünknek véges számú kimenetele lehet. Továbbá feltételezzük, hogy az ezen a véges téren értelmezett dinamika egy homogén Markov-folyamat, azaz két tetszőlegesen kiválasztott eseményre fennáll a

$$\mathbf{P}(X_{i+1}, t_{i+1}|X_i, t_i) = \mathbf{P}(X_{i+1}, t_{i+1} - t_i|X_i, 0) \tag{I.1.7}$$

időeltolási invariancia, tehát bármely két mérés között a rendszer azonosan fejlődik. Végezetül az egymást követő mérések közt eltelt időt egységnyinek tekintjük, azaz $t_{i+1} - t_i = 1$ (minden $i \in \mathbb{N}$-re).

A dinamika átmeneti mátrixos tárgyalása

A fejezetet bevezető részben adtam egy rövid áttekintést az általunk vizsgált homogén Markov-láncok legfontosabb tulajdonságairól. Ebben a részben röviden összegzem az $\Omega = \{i, j, k, \ldots\}$ d-elemű állapottéren vett dinamika átmeneti mátrixszal történő leírását, valamint adok egy gyors áttekintést a dinamikában szereplő mennyiségek legfontosabb tulajdonságairól.

Legyen $\lambda(t) = (\lambda_i(t) : i \in \Omega)$ egy időfüggő d-dimenziós vektort, mely egyre normált

$$\sum_{i\in\Omega} \lambda_i(t) = 1\,, \tag{I.1.8}$$

és az elemei nemnegatívak ($\lambda_i(t) \geq 0$, minden i-re). Ekkor a $\lambda(t)$ vektort eloszlásnak (eloszlásvektornak) nevezzük, mely $\lambda_i(t)$ általános komponense megadja annak a valószínűségét, hogy a rendszeren mért X_t érték i-vel egyenlő. Ha azonban a $\lambda(t)$ vektor normája egynél kisebb, akkor feltételes eloszlásnak (feltételes eloszlásvektornak) nevezzük.

Egy általános, $\lambda(t_0 = 0)$ kezdeti eloszlásból indított folyamat t időben mérhető $\lambda(t)$ eloszlása megkapható a

$$W_{i,j}(t) = \mathbf{P}(X_t = i, t|X_{t_0} = j, t_0 = 0) \tag{I.1.9}$$

elemekkel definiált $W(t)$ átmeneti mátrix a $\lambda(t_0 = 0)$ kezdeti eloszlásvektoron történő hattatásával. Vegyük észre, hogy az I.1.6 egyenletnek köszönhetően homogén Markov-folyamatok esetén az idő múlása formálisan kifejezhető az egységnyi időváltozáshoz rendelt $W = W(t = 1)$ átmeneti mátrix újra és újra hattatásával, azaz

$$\lambda(t) = W(t)\lambda(t = 0) = W^t\lambda(t = 0)\,. \tag{I.1.10}$$

Az átmeneti mátrix I.1.9 definíciójából következik, hogy W négyzetes mátrix és minden eleme nemnegatív, hiszen a $W_{i,j}$ általános mátrixelem a rendszer j állapotából történő i állapotba való átfordulásának valószínűsége. Továbbá a dinamika minden időpillanatában fenn kell állni az I.1.8 normálási feltételnek, melyből fakadóan a W mátrixnak

$$\sum_i W_{i,j} = 1 \tag{I.1.11}$$

sztochasztikusnak kell lennie, azaz egy tetszőleges $j \in \Omega$ állapotból 1 valószínűséggel megy át a rendszer (i-vel indexelt) összes lehetséges állapotok valamelyikébe.

I.1. *Lemma.* *Abból, hogy az átmeneti mátrix sztochasztikus és hogy minden eleme nemnegatív következik, hogy minden eloszlásvektort eloszlásvektorba visz, továbbá hogy két sztochasztikus mátrix szorzata is sztochasztikus mátrix.*

Az átmeneti mátrixok egy speciális osztályát alkotják a duplán sztochasztikus mátrixok, melyeknek a W átmeneti mátrix és annak W^T transzponáltja is sztochasztikus mátrix. Talán a legkézenfekvőbb példa a duplán sztochasztikus mátrixra a szimmetrikus sztochasztikus mátrixok ($W = W^T$). A következő tétel segítésével az összes duplán sztochasztikus mátrix megkonstruálható.

I.1. *Tétel.* *(Birkoff–Neumann-tétel[17,18]) Minden duplán sztochasztikus mátrix megadható permutációs mátrixok konvex kombinációjaként.*

I.1. *Példa.* *Határozzuk, meg a*

$$W = \begin{bmatrix} 0.1 & 0.4 & 0.5 \\ 0.2 & 0.6 & 0.2 \\ 0.7 & 0.0 & 0.3 \end{bmatrix} \tag{I.1.12}$$

duplán sztochasztikus mátrix permutációs mátrixokkal való felbontását. Közvetlen behelyettesítéssel ellenőrizhető, hogy a

$$P_1 = \mathbb{I}_3\,, \quad P_2 = \begin{bmatrix} & 1 & \\ & & 1 \\ 1 & & \end{bmatrix}, \quad P_3 = \begin{bmatrix} & 1 & \\ 1 & & \\ & & 1 \end{bmatrix}, \quad P_4 = \begin{bmatrix} & & 1 \\ & 1 & \\ 1 & & \end{bmatrix} \tag{I.1.13}$$

permutációs mátrixok választása alkalmas az I.1.12 mátrix előállítására a $p = (0.1, 0.2, 0.2, 0.5)$ valószínűségi súlyokkal.

Az átmeneti mátrix kanonikus alakja

A rendszer lehetséges állapotait hosszútávú viselkedésük alapján átmeneti illetve elnyelő tartományokra oszthatjuk. Ha egy átmeneti tartományból a dinamika során kijutottunk, akkor oda már sosem kerülhetünk vissza, szemben az elnyelő tartománnyal, ahova ha egyszer bejutottunk akkor a hátralévő időlépéseket már csak azon

belül tehetjük meg. Az olyan rendszereket, amelyek egyetlen elnyelő tartományból állnak irreducibilisnek (vagy ezzel ekvivalensen ergodikusnak), különben pedig reducibilisnek nevezzük. Tehát irreducibilis rendszer esetén a rendszer minden i állapota véges időlépés alatt elérhető a rendszer minden j állapotából.

Vegyünk egy d állapotú rendszert, mely felbontható egy s elnyelő, és egy $d-s$ átmeneti állapotot tartalmazó tartományra, ekkor az azonos típusú állapotok egymás mellé rendezésével megkaphatjuk a rendszer átmeneti mátrixának a kanonikus alakját

$$PWP^{-1} = \begin{bmatrix} M & R \\ O & Q \end{bmatrix}, \tag{I.1.14}$$

ahol P a bázisok átrendezésének permutációs mátrixa és az O-val jelölt mátrix egy $s\times(d-s)$ méretű nullmátrix. A mátrix jobb alsó sarkában szereplő Q a rendszer átmeneti tartományában lévő állapotok közti dinamikát vezérli mindaddig, amíg a rendszer ebben a tartományban marad. Az R mátrix lépteti a rendszert az átmeneti tartományból az elnyelő tartományba, ahol a $(d-s)$ darab állapot már az M mátrix által megadott módon fejlődik. Amennyiben a rendszernek több különböző átmeneti és/vagy elnyelő tartománya van, abban az esetben az átmeneti mátrix kanonikus alakja ennek megfelelően további, összetettebb struktúrát mutat.

Az átmeneti mátrix I.1.11 sztochasztikus tulajdonsága maga után vonja, hogy az I.1.14 kanonikus alakjában szereplő M mátrix is sztochasztikus, azaz

$$\sum_i M_{i,j} = 1\,, \tag{I.1.15}$$

valamint hogy minden eleme nemnegatív. Továbbá az elnyelő tartomány definíciójából következik, hogy ha egy folyamatot a rendszer egy elnyelő tartományból indítottunk, akkor az végig ebben a tartományban marad. Tehát ebben az esetben az állapottér leszűkíthető az elnyelő tartományra, és mint az eredeti rendszerünknél kisebb, irreducibilis rendszerként kezelhetjük, melyen az átmeneti mátrix szerepét az M mátrix tölti be.

Látható, hogy a kezdőállapot meghatározza a rendszer elérhető állapotait, így szokás bevezetni, az I.1.3 képlettel definiált momentumok helyett, az i állapotból indított folyamat feltételes momentumait

$$\mathbb{E}_i[X_t^k] := \sum_{X_t} X_t^k \mathbf{P}(X_t, t|i, t_0)\,, \tag{I.1.16}$$

mely a $\mathbf{P}(X_t, t|i, t_0)$ feltételes valószínűséggel figyelembe veszi, hogy a fázistér bizonyos elemeit az adott kezdőállapotból nem érhetjük el.

Egyensúlyi eloszlás

Ebben a fejezetben röviden áttekintem, hogy az átmeneti mátrixra tett előírások, illetve speciális tulajdonságok milyen megkötéseket adnak annak lehetséges sajátértékeire, illetve sajátvektorjaira. Ezen sajátvektorok közül külön kiemelem, a későbbiekben fontos szerepet játszó, $\{\pi^{(i)}\}_i$ egyensúlyi eloszlásokat melyek az egy sajátértékhez tartozó, nemnegatív elemekből felépített sajátvektora az átmeneti mátrixnak, azaz

$$W\pi^{(i)} = \pi^{(i)}\,, \tag{I.1.17}$$

ahol $\pi_j^{(i)} \geq 0$ minden i-re és j-re. Az I.1.17 egyenletből következik, hogy ezek az állapotok időben változatlan eloszlásokat írnak le.

I.2. *Tétel.* *Minden M sztochasztikus mátrixnak, melyre teljesül a I.1.11 definiáló tulajdonság, mindig van egy 1 sajátértékű sajátvektora, továbbá a többi sajátértékének az abszolútértéke egynél nem nagyobb.*

Bizonyítás. Az állítás első felének bizonyításhoz használjuk fel, hogy egy mátrix és transzponáltjának determinánsa megegyezik, így a $M - \lambda\,\mathbb{I}$ és $M^T - \lambda\,\mathbb{I}$ kifejezések determinánsa is megegyezik, melyből következik, hogy M és M^T sajátértékei azonosak. Továbbá, hogy az M^T transzponált mátrix oszlopait összegezve egyet kapunk, így a csupa egyest tartalmazó vektor sajátvektorja lesz egy sajátértékkel. Tehát az M mátrixnak is van legalább egy 1 sajátértékű sajátvektorja.

Az állítás második felét indirekt módon láthatjuk be. Ehhez tegyük fel, hogy az M mátrixnak v egy olyan sajátvektora, melyhez tartozó λ sajátérték abszolútértéke egynél nagyobb. Ekkor az $M^N v = \lambda^N v$ kifejezés normája exponenciálisan nő, ahogy N tart a végtelenhez, amiből az következik, hogy egy $N > N_0$ küszöb felett az M^N mátrixnak létezik egy $\left[M^N\right]_{i,j}$ eleme, mely egynél nagyobb. Azonban, a I.1 lemma szerint sztochasztikus mátrixok szorzata is sztochasztikus mátrix, így a hatványozás művelete sem vezethet ki a sztochasztikus mátrixok köréből. A kapott ellentmondás úgy oldható fel, ha az M mátrixnak nincs egynél nagyobb sajátértékű sajátvektora. □

I.3. *Tétel.* *(Perron–Frobenius tétel[19–21]) Minden pozitív elemekből álló M négyzetes mátrixnak a legnagyobb sajátértékéhez tartozó pozitív elemekből álló sajátvektora egyértelmű.*

I.4. *Tétel.* *(Perron–Frobenius tétel irreducibilis mátrixokra[22,23]) Minden irreducibilis dinamikához tartozó W átmenetei mátrix legnagyobb sajátértékéhez tartozó pozitív elemekből álló sajátvektora egyértelmű.*

Az I.2 és az I.4 tételekből következik, hogy egy adott irreducibilis tartományban ható W átmeneti mátrixnak egyetlen π egyensúlyi eloszlása van. Több tartományra bontható rendszerek esetén pedig annyi lineárisan független egyensúlyi eloszlás különböztethető meg, ahány különböző elnyelő tartomány van.

Az egyes elnyelő tartományokhoz tartozó (egyértelmű) $\pi^{(i)}$ egyensúlyi eloszlást legenerálhatjuk, egy, az adott i tartományban lévő tetszőleges $\lambda^{(i)}(t_0)$ kezdeti eloszlásvektorból a

$$\pi^{(i)} = \lim_{T\to\infty} \frac{1}{T+1} \sum_{t=0}^{T} W^t \lambda^{(i)}(t_0) \tag{I.1.18}$$

időátlagolás segítségével. Az így kapott $\pi^{(i)}$ egyensúlyi eloszlás az adott i elnyelő tartományban van, hiszen definíció szerint a W átmeneti mátrix nem visz ki belőle, továbbá a $\{\lambda^{(i)}(t)\}$ eloszlásvektorok elemeinek korlátossága miatt kielégítik a I.1.17 sajátértékegyenletet

$$W\pi^{(i)} = \pi^{(i)} - \lim_{T\to\infty} \frac{1}{T}\lambda^{(i)}(t_0) = \pi^{(i)}\,, \tag{I.1.19}$$

és mivel $\pi^{(i)}$ eloszlásvektorok átlaga, így maga is eloszlásvektor lesz.

I.2. *Lemma.* *Egy d dimenziós állapottéren történő irreducibilis, duplán sztochasztikus dinamika egyensúlyi eloszlása egyértelmű és minden eleme azonosan $1/d$.*

Reguláris Markov-láncok

Az olyan irreducibilis rendszereket regulárisnak nevezzük, melyekben létezik legalább egy olyan N időlépés mely alatt a gráf minden j állapotából minden i állapota elérhető. Formálisan, reguláris gráfnak nevezzük azokat a gráfokat, melyekben létezik egy $N \in \mathbb{N}$, melyre a W^N átmeneti mátrix összes eleme pozitív. A reguláris gráfok definíciójából következik, hogy minden teljes gráf reguláris gráf is egyben.

I.2. *Példa.* *Legyen a dinamikát vezérlő átmeneti mátrix*

$$W = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}, \tag{I.1.20}$$

ekkor látható, hogy a rendszer lehetséges két állapota között felváltva fejlődik. Mivel minden állapotából minden állapota elérhető, így a rendszer ergodikus, azonban mivel kizárt a helyben maradás, így nem reguláris.

I.3. *Példa.* *Vegyük a következő átmeneti mátrixot:*

$$W = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1/2 \\ 1 & 1/2 & 0 \\ 0 & 1/2 & 1/2 \end{bmatrix}, \tag{I.1.21}$$

mely nem teszi lehetővé, például, hogy ha egy t időpillanatban az $X_t = 1$ értéket veszi fel, akkor az azt követő $t+1$ pillanatban is ugyanazt az értéket mértjük. Azonban a W mátrix harmadik hatványának csupa pozitív elemei biztosítják, hogy akár három lépés alatt minden állapotból minden állapot elérhető. Tehát annak ellenére, hogy a W mátrix ritka, mégis az általa definiált rendszer reguláris.

Általában egy dinamika egyensúlyi eloszlásának meghatározásához az I.1.17 egyenlet megoldására van szükségünk, ami nagy rendszerek esetén nagy számolási kapacitást igényel. Ennél lényegesen könnyebb az I.1.18 egyenlet kiértékelése. Extrém nagy rendszerek esetén, például internetes keresési találatok sorbarendezése (Google PageRank[24,25]) során, effektívebb algoritmusra van szükségünk. Reguláris rendszerekben további gyorsítás érhető el, ugyanis az egyensúlyi eloszlás megtalálásának problémája mátrix hatványozássá redukálódik, mely konvergenciájának a W mátrix legkisebb sajátértékének abszolútértéke szab alsó határát.

I.5. *Tétel.* *(Reguláris rendszerre vonatkozó konvergencia tétel[26]) Legyen W egy reguláris rendszer átmeneti mátrixa ekkor*

$$\Pi = \lim_{N\to\infty} W^N, \tag{I.1.22}$$

ahol Π egyes oszlopai a rendszerhez tartozó π egyensúlyi eloszlást tartalmazzák.

Az I.5 tétel következményeképpen reguláris rendszerek π egyensúlyi eloszlásának meghatározásához elegendő választanunk egy λ tetszőleges eloszlásvektort, majd a W átmenti mátrixszal elegendően sokszor hatni rajta, azaz

$$\pi = \lim_{N\to\infty} W^N \lambda. \tag{I.1.23}$$

I.4. *Példa.* *Vegyünk egy kétállapotú rendszert, mely dinamikáját a*

$$W = \begin{bmatrix} 1-\alpha & \beta \\ \alpha & 1-\beta \end{bmatrix} \tag{I.1.24}$$

átmeneti mátrix definiálja, ahol $0 < \alpha, \beta < 1$ átmeneti valószínűségek. Különböző α és β paraméterek lefuttatása után megállapítható, hogy a rendszerhez tartozó egyensúlyi eloszlás a következő:

$$\Pi = \frac{1}{\alpha+\beta}\begin{bmatrix} \beta & \beta \\ \alpha & \alpha \end{bmatrix} \quad \to \quad \pi = \frac{1}{\alpha+\beta}\begin{bmatrix} \beta \\ \alpha \end{bmatrix}. \tag{I.1.25}$$

A kapott eredményt analitikusan is ellenőrizhetjük. Ehhez először határozzuk meg a W mátrix sajátértékei,

$$det\begin{bmatrix}1-\alpha-\lambda & \beta \\ \alpha & 1-\beta-\lambda\end{bmatrix} = \lambda^2 - 2\lambda + (\alpha+\beta)\lambda + (1-\alpha-\beta) = 0\,, \tag{I.1.26}$$

mely megoldásából $\lambda_1 = 1$ és $\lambda_2 = 1-\alpha-\beta$. A sajátértékek ismeretében egy U, egyelőre ismeretlen, unitér bázistranszformációval az átmeneti mátrix diagonalizálható, ahol a mátrix hatványozás könnyen elvégezhető

$$W = U\begin{bmatrix}\lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2\end{bmatrix}U^\dagger \quad \rightarrow \quad W^N = U\begin{bmatrix}1 & 0 \\ 0 & (1-\alpha-\beta)^N\end{bmatrix}U^\dagger\,. \tag{I.1.27}$$

Közvetlen behelyettesítéssel adódik, hogy

$$\left(W^N\right)_{1,1} = A + B(1-\alpha-\beta)^N\,, \tag{I.1.28}$$

ahol az A és B konstansok a transzformációs mátrix elemeiből épülnek fel: $A = U_{1,1}U^\dagger_{1,1}$ és $B = U_{1,2}U^\dagger_{1,2}$. Továbbá tudjuk, hogy $W^0 = \mathbb{I}$ és $W^1 = W$, melyek a következő lineáris egyenletrendszert adják

$$1 = A + B\,, \tag{I.1.29a}$$

$$1-\alpha = A + B(1-\alpha-\beta)\,. \tag{I.1.29b}$$

Az egyenletrendszer megoldásából $A = \frac{\beta}{\alpha+\beta}$ és $B = \frac{\alpha}{\alpha+\beta}$ adódik, segítségükkel pedig a többi mátrixelem is meghatározható

$$W^N = \frac{1}{\alpha+\beta}\begin{bmatrix}\beta+\alpha(1-\alpha-\beta)^N & \beta-\beta(1-\alpha-\beta)^N \\ \alpha-\alpha(1-\alpha-\beta)^N & \alpha+\beta(1-\alpha-\beta)^N\end{bmatrix} \xrightarrow{N\to\infty} \Pi = \frac{1}{\alpha+\beta}\begin{bmatrix}\beta & \beta \\ \alpha & \alpha\end{bmatrix}\,. \tag{I.1.30}$$

A kapott eredmény megegyezik a numerikus tapasztalatból jósolt I.1.25 képlettel megadott egyensúlyi eloszlással.

I.5. *Példa.* *Határozzuk meg az I.3 példában szereplő dinamika egyensúlyi eloszlását. A numerikus számolás azt mutatja hogy a W^{15} már 6 tizedesjegyre megközelíti a*

$$\Pi = \begin{bmatrix}1/5 & 1/5 & 1/5 \\ 2/5 & 2/5 & 2/5 \\ 2/5 & 2/5 & 2/5\end{bmatrix} \quad \rightarrow \quad \pi = \begin{bmatrix}1/5 \\ 2/5 \\ 2/5\end{bmatrix} \tag{I.1.31}$$

egyensúlyi eloszlást. Az eredményt közvetlenül ellenőrizhetjük az I.1.17 sajátértékegyenletbe való visszahelyettesítéssel, vagy analitikusan is meghatározhatjuk. A karakterisztikus egyenlet megoldásából a $\lambda_1 = 1$ sajátérték mellett a $\lambda_\pm = \pm\frac{i}{2}$ sajátértékeket kapjuk. Az átmeneti mátrix diagonalizálása után belátható, hogy

$$\left(W^N\right)_{1,1} = A + \left(\frac{1}{2}\right)^N\left[B\cos\left(n\frac{\pi}{2}\right) + C\sin\left(n\frac{\pi}{2}\right)\right]\,. \tag{I.1.32}$$

Továbbá a $W^0 = \mathbb{I}$ és $W_{1,1} = 0 = (W^2)_{1,1}$ egyenletekből az A, B, C konstansok értékei meghatározhatóak, így

$$\left(W^N\right)_{1,1} = \frac{1}{5} + \left(\frac{1}{2}\right)^N\left[\frac{4}{5}\cos\left(n\frac{\pi}{2}\right) - \frac{2}{5}\sin\left(n\frac{\pi}{2}\right)\right] \xrightarrow{N\to\infty} \pi_1 = \frac{1}{5} \tag{I.1.33}$$

adódik. Ehhez hasonlóan módón az egyensúlyi eloszlás többi eleme is meghatározható.

Az I.4 és az I.5 példákban a W mátrixnak legnagyobb sajátértéke a $\lambda_1 = 1$, melyet az I.2 tétel biztosít. Továbbá a példák jól demonstrálják, hogy az egyensúlyi eloszláshoz való konvergálás, valóban a legkisebb sajátérték abszolútértékétől függ; az első esetben ez a $\lambda_2 = 1 - \alpha - \beta$, míg a második esetben $|\lambda_\pm| = |\pm \frac{i}{2}| = \frac{1}{2}$. További példák megvizsgálása után általánosságban azzal egészíthetjük ki az előző tapasztalatainkat, hogy a komplex sajátértékek csak konjugált párokban fordulnak elő. A sajátértékek ezen tulajdonsága közvetlenül következik abból, hogy a W mátrixelemei valósak.

1.1.2. Iterált nyílt kvantum csatornák

Már klasszikus esetben is igaz, hogy egy mérés eredménye általában nem határozható meg, legfeljebb a lehetséges kimenetelekre tehetünk egy valószínűségi becslést. Míg ott ez az ismeretünk hiányával volt magyarázható, addig a kvantumvilág megfigyelése esetén ezt annak természete okozza, mértékét az összefonódással jellemezhetjük.

A kvantummechanika első és harmadik posztulátuma[27,28] szerint minden zárt fizikai rendszer állapota egy tetszőleges t időpillanatban teljesen jellemezhető, egy $\mathcal{H}$ Hilbert-téren értelmezett, egyre normált $|\varphi(t)\rangle$ hullámfüggvény segítségével, amit megadhatunk a lehetséges mérési értékekhez rendelt $\{|i\rangle\}$ állapotok lineáris kombinációjaként. A könnyebb tárgyalhatóság miatt továbbiakban feltételezzük, hogy a mérési eredményekhez rendelt állapotok egy véges, teljes ortonormált bázist alkotnak, így annak a valószínűsége hogy a rendszert az $|i\rangle$ állapotában mérjük a következő:

$$\mathbf{P}(X_t = i) = |\langle i|\varphi(t)\rangle|^2 = |\langle i| \sum_j c_j(t) |j\rangle|^2 = |c_i(t)|^2, \tag{I.1.34}$$

ahol a $\{c_i(t)\}$ kifejtési együtthatók komplexek és az I.1.2a normálási feltétel miatt $\sum |c_i(t)|^2 = 1$ (ha azonban csak a $\sum |c_i(t)|^2 < 1$ teljesül, akkor a hozzá tartozó $|\varphi(t)\rangle$ hullámfüggvényt feltételes hullámfüggvénynek nevezzük). Továbbá az ötödik posztulátum szerint a hullámfüggvény időfejlődését a

$$i\partial_t |\varphi(t)\rangle = H(t) |\varphi(t)\rangle \tag{I.1.35}$$

Schödinger-egyenlet vezérli ($\hbar = 1$).

Azonban, egy realisztikus fizikai rendszer szinte sosem tekinthető zártnak, hiszen sosincs teljesen elszigetelve az őt körülvevő világtól (környezettől). Ezen nyílt rendszerek leírásához a $|\varphi(t)\rangle$ hullámfüggvény helyett, a több információt magában hordozó, $\varrho(t)$ sűrűségoperátort kell alkalmaznunk, mely különböző hullámfüggvények konvex kombinációjaként ($\sum p_n = 1$ és $p_n \geq 0$) áll elő

$$\varrho(t) = \sum_n p_n |\varphi_n(t)\rangle \langle\varphi_n(t)| \ , \tag{I.1.36}$$

ahol p_n annak a valószínűsége, hogy a rendszer a t időpillanatban a $|\varphi_n(t)\rangle$ tiszta állapotban van, továbbá az I.1.36 egyenletből látható, hogy $\varrho = \varrho^\dagger$ hermitikus. Az I.1.34 és a p_n valószínűségek jelentéséből következik, hogy annak a valószínűsége, hogy egy kevert állapotban lévő rendszeren $X_t = i$ mérünk megadható a hozzá tartozó sűrűségoperátor $\varrho_{i,i}(t)$ diagonális elemével, mely diagonális elemek összege egy (feltételes sűrűségoperátor esetén egynél kisebb).

Egy tetszőleges sűrűségoperátor nyílt dinamikájának megadásához általánosítanunk kell a zárt rendszerre vonatkozó

$$i\partial_t \varrho(t) = [H(t), \varrho(t)] \tag{I.1.37}$$

Neumann-egyenletet. Az általánosítás első lépéseként vezessük be az $L_t[\cdot] = -i[H(t), \cdot]$ szuperoperátort, mely a Neumann-egyenlet

$$\partial_t \varrho(t) = L_t[\varrho(t)] \tag{I.1.38}$$

kompakt alakját adja. Az I.1.35 Schödinger-egyenlet integrálásával meghatározhatjuk a zárt rendszerek $C[\cdot]$ koherens időfejlődését

$$\varrho(t) = C_t[\varrho(0)] = U(t)\varrho(0)U^\dagger(t)\,, \tag{I.1.39}$$

ahol

$$U(t) = \mathrm{T}e^{-i\int_0^t H(\tau)\mathrm{d}\tau} \tag{I.1.40}$$

unitér operátor és T az időrendezés operátora. Az I.1.39 egyenlettel megadott megoldást visszahelyettesítve a Neumann-egyenletbe azt kapjuk, hogy

$$i\partial_t C_t[\varrho(0)] = [H, C_t[\varrho(0)]]\,. \tag{I.1.41}$$

Tehát a $C[\cdot]$ időfejlődés dinamikája formálisan megegyezik a sűrűségoperátor I.1.37 dinamikájával, azaz

$$\partial_t C_t[\cdot] = L_t[C_t[\cdot]], \qquad C_{t=0}[\cdot] = \mathbb{I}[\cdot]\,, \tag{I.1.42}$$

ahol $\mathbb{I}[\cdot]$ az identitás operációjához tartozó szuperoperátor.

Ezen tapasztalatokból látható, hogy egy általános nyílt dinamika leírásához meg kell találnunk a dinamikát definiáló $\Lambda_t[\cdot]$ szuperoperátort, melyből

$$\partial_t \varrho(t) = \Lambda_t[\varrho(t)]\,, \tag{I.1.43}$$

és a hozzá tartozó $\mathcal{T}_t[\cdot]$ időfejlődést, mely kielégíti a

$$\partial_t \mathcal{T}_t[\cdot] = \Lambda_t[\mathcal{T}_t[\cdot]], \qquad \mathcal{T}_{t=0}[\cdot] = \mathbb{I}[\cdot]\,, \tag{I.1.44}$$

egyenletet. A $\mathcal{T}_t[\cdot]$ lehet időfüggő[29–31] és $\mathcal{T}_t[\cdot] = \mathcal{T}[\cdot]$ időfüggetlen[32,33]. Mi a továbbiakban az utóbbi esettel fogunk foglalkozni, mely a homogén Markov-folyamatok kvantumos megfelelőjének tekinthető.

A koherens időfejlődés során bevezetett $C_t[\cdot] = C[\cdot]$ koherens dinamika helyett elegendő a

$$|\varphi(t)\rangle = U(t)\,|\varphi(0)\rangle \tag{I.1.45}$$

időfejlődéssel foglalkoznunk, hiszen a folyamat során nincs koherenciavesztés, melyhez szükségünk lenne a rendszer sűrűségoperátorára. Ha az időfejlődéshez tartozó $H(t)$ Hamilton-operátor periodikus az egyes időlépések közt eltelt időben, vagy időfüggetlen, akkor $U(t) = U^t$, ahol $U = U(t = 1)$.

I.6. *Példa.* *Határozzuk meg a*

$$H = |1\rangle\langle 1| + |1\rangle\langle 3| + |3\rangle\langle 1| + |3\rangle\langle 3| \tag{I.1.46}$$

időfüggetlen Hamilton-operátorral megadott $U = exp[-iH]$ időlépés mellett az $|1\rangle$ állapotból a $|3\rangle$ állapotba való átmenet egy és két időlépéses valószínűségét. Az

$$U = e^{-i}\begin{bmatrix} \cos 1 & 0 & -\sin 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin 1 & 0 & \cos 1 \end{bmatrix} \tag{I.1.47}$$

operátor alakjából látszik, hogy a

$$\boldsymbol{P}(X_1 = |3\rangle\,|X_0 = |1\rangle) = |\langle 3|\,U\,|1\rangle|^2 = \sin^2 1 \simeq 0.708073 \tag{I.1.48}$$

egy időlépés alatti átmenet valószínűsége csak a közvetlen átmenetből áll, míg a

$$\boldsymbol{P}(X_2 = |3\rangle\,|X_0 = |1\rangle) = |\langle 3|\,U^2\,|1\rangle|^2 = |\langle 3|\,U\,|3\rangle\langle 3|\,U\,|1\rangle + \langle 3|\,U\,|1\rangle\langle 1|\,U\,|1\rangle|^2 = \sin^2 2 \simeq 0.826 \tag{I.1.49}$$

két lépés alatti átmenet valószínűsége a direkt átmenet és ottmaradás, illetve az ottmaradás és az utána való átmenet valószínűségeinek amplitúdóiból tevődik össze.

I.7. *Példa.* *Határozzuk meg a*

$$H = \sum_{i,j=1}^{3} |i\rangle\langle j| \tag{I.1.50}$$

időfüggetlen Hamilton-operátorral megadott $U = exp[-iH]$ időlépés mellett a $|1\rangle$ állapotból a $|3\rangle$ állapotba való átmenet egy és két időlépéses valószínűségét. Az

$$U = \frac{2 + e^{-3i}}{3}\mathbb{I}_3 + \frac{e^{-3i} - 1}{3}\sum_{i\neq j} |i\rangle\langle j| \tag{I.1.51}$$

operátor alakjából látszik, hogy a

$$\boldsymbol{P}(X_1 = |3\rangle\,|X_0 = |1\rangle) = |\langle 3|\,U\,|1\rangle|^2 = \frac{2}{9}(1 - \cos 3) \simeq 0.442221 \tag{I.1.52}$$

egy időlépés alatti átmenet valószínűsége csak a közvetlen átmenetből áll, míg a

$$\boldsymbol{P}(X_2 = |3\rangle\,|X_0 = |1\rangle) = |\langle 3|\,U^2\,|1\rangle|^2 = \ldots \simeq 0.00885105 \tag{I.1.53}$$

két lépés alatti átmenet valószínűsége a direkt átmenet és ottmaradás, az $|1\rangle$ állapotból a $|2\rangle$ állapotba majd a $|2\rangle$ állapotból a $|3\rangle$ állapotba történő átmenet, illetve az ottmaradás és utána való átmenet valószínűségi amplitúdóiból tevődik össze.

Az I.6 és az I.7 példák az szemléltetik, hogy szemben a klasszikus folyamatokkal, kvantumos folyamatok esetén további átmenetek megengedése csökkentheti a teljes átmeneti valószínűségét. Ez a különbség abból fakad, hogy klasszikus esetben a W átmeneti mátrix a valószínűségeket tartalmazó $\lambda(t)$ eloszlásvektort fejleszti, míg kvantumos esetben az U unitér operátor (nyílt rendszerekben $\mathcal{T}[\cdot]$) a valószínűségi amplitúdókat tartalmazó $|\varphi(t)\rangle$ hullámfüggvényt (nyílt rendszerekben $\varrho(t)$) lépteti.

A dinamika kvantumcsatornával megadott tárgyalása

Az előző fejezetben megmutattam, hogy egy tetszőleges kvantumos rendszer állapota, a klasszikus dinamikánál tárgyalt $\lambda(t)$ eloszlással analóg módón, megadható egy $\varrho(t)$ sűrűségoperátorral, mely időlépését a $W(t)$ átmeneti mátrixot felváltva a $\mathcal{T}_t[\cdot]$ kvantumcsatorna definiálja. Az időfüggetlen $\mathcal{T}[\cdot]$ időlépéssel leírt időfejlődés a következő

$$\varrho(t) = \mathcal{T}^t[\varrho(0)]\,, \tag{I.1.54}$$

ahol $\mathcal{T}^t[\cdot]$ a $\mathcal{T}[\cdot]$ csatorna t-szer való hattatását jelöli, és a rendszer dinamikáját iterált dinamikának nevezzük. Az I.1.54 egyenlet az I.1.10 egyenlet kvantum megfelelőjének tekinthető, hiszen a sűrűségoperátor mátrixelemei minden időlépés között ugyanúgy változnak, akárcsak a klasszikus esetben a $\lambda(t)$ valószínűségi eloszlásvektor komponensei. Azonban a sűrűségoperátor diagonális elemeinek puszta dinamikája, már csak egy időfüggő sztochasztikus mátrixszal adható meg, ahol a dinamika függ a sűrűségoperátor offdiagonális elemeitől is.

Míg a legáltalánosabb klasszikus folyamatok megadhatóak voltak egy $W(t)$ sztochasztikus átmeneti mátrixszal, addig a kvantumos folyamatok esetén egyelőre ismeretlen annak a szükséges és elégséges feltétele, hogy $\mathcal{T}[\cdot]$ egy fizikai folyamatot írjon le. Így valamilyen megkötést kell tennünk a $\mathcal{T}[\cdot]$ tulajdonságainak vizsgálatakor. A továbbiakban, nevezzük kvantumcsatornáknak az olyan $\mathcal{T} : \mathcal{B}_d(\mathcal{H}) \to \mathcal{B}_d(\mathcal{H})$ lineáris leképezéseket ($\mathcal{B}_d(\mathcal{H})$ a $\mathcal{H}$ Hilbert-téren értelmezett d dimenziós lineáris operátorok által kifeszített Banach-tér), melyek rendelkeznek a következő definiálótulajdonságokkal:

- *hermitikusság őrző*: $\mathcal{T}[A^\dagger] = \mathcal{T}[A]^\dagger$
- *teljesen pozitív*: ha a csatornát tetszőlegesen magas dimenzióba ágyazzuk az $\mathbb{I}_k$ ($k = 0, 1, \ldots$ dimenziós egységoperátor) segítségével, akkor a kapott $\mathbb{I}_k \otimes \mathcal{T} : \mathcal{B}_k(\mathcal{H}) \otimes \mathcal{B}_d(\mathcal{H}) \to \mathcal{B}_k(\mathcal{H}) \otimes \mathcal{B}_d(\mathcal{H})$ leképezés minden nemnegatív sajátértékű mátrixot ($A \geq 0$) nemnegatív sajátértékű mátrixba ($\mathcal{T}[A] \geq 0$) visz
- *trace őrző*: $\mathrm{Tr}\, \mathcal{T}[A] = \mathrm{Tr}\, A$

Látható, hogy az így definiált kvantumcsatornák nem vezetnek ki az egy trace-re normált, önadjungált, nem negatív operátorok teréből, azaz sűrűségoperátort sűrűségoperátorba képeznek. Azonban fontos megjegyezni, hogy ahhoz, hogy sűrűségoperátort sűrűségoperátorba képezzenek a egyik definiáló tulajdonság elengedhető, mégpedig: ha a teljesen pozitív tulajdonság helyett, csak a pozitívat írtuk volna elő, akkor úgynevezett negatív csatornát kapunk[34–37], ilyen például a szeparábilis altéren értelmezett részleges transzponálás[33]. Továbbá, ha a vizsgálni kívánt sűrűségoperátorok terét a feltételes hullámfüggvényekre terjesztjük ki, akkor a trace őrzés feltételét a trace nem növelésre lazítható, mely módosítása a definiáló tulajdonságoknak a feltételes csatornát eredményezi.

Egy $\mathcal{T}[\cdot]$ csatornával megadott időfejlődés során egy A mérhető mennyiség t időben mért értékének a várható értéke Schödinger-képben a következőképpen határozhatjuk meg

$$\langle A(t)\rangle_{\mathrm{Sc}} = \mathrm{Tr}\, [A\varrho(t)] = \mathrm{Tr}\, \left[A\mathcal{T}^t[\varrho(0)]\right] , \tag{I.1.55}$$

amivel megegyezik a Heisenberg-képben vett várhatóértéke

$$\langle A(t)\rangle_{\mathrm{H}} = \mathrm{Tr}\, [A(t)\varrho] = \mathrm{Tr}\, \left[(\mathcal{T}^*)^t[A]\varrho(0)\right] \equiv \langle A(t)\rangle_{\mathrm{Sc}} , \tag{I.1.56}$$

ahol $\mathcal{T}^*[\cdot]$ a $\mathcal{T}[\cdot]$ úgynevezett duálisa, mely Heisenberg-képben időfejleszti a fizikai mennyiségeket. Egy $\mathcal{T}^*[\cdot]$ duális csatornát a

$$\mathrm{Tr}\, [A\mathcal{T}[B]] = \mathrm{Tr}\, [B\mathcal{T}^*[A]] \tag{I.1.57}$$

egyenlet definiálja, ahol A és B tetszőleges $\mathcal{B}(\mathcal{H})$ beli operátorok.

Az unitális, illetve a bisztochasztikus csatornák a kvantumcsatornák két speciális osztályát alkotják. Egy $\mathcal{T}[\cdot]$ csatornát akkor nevezzük unitálisnak, ha az egységoperátort invariánsan hagyja, azaz

$$\mathcal{T}[\mathbb{I}] = \mathbb{I} . \tag{I.1.58}$$

Ha a $\mathcal{T}[\cdot]$ csatorna unitális és a hozzá tartozó $\mathcal{T}^*[\cdot]$ is unitális, akkor a csatornát, illetve a duálisát is bisztochasztikusnak nevezzük.

I.3. *Lemma.* *Ha egy $\mathcal{T}[\cdot]$ csatorna trace őrző, akkor a hozzá tartozó $\mathcal{T}^*[\cdot]$ duális csatorna unitális.*

Az I.3 lemma következményeképpen minden unitális kvantumcsatorna bisztochasztikus is. Azonban feltételes csatornák esetén szükség van a két fogalom közti különbségtétere.

I.8. *Példa.* *A bisztochasztikus csatornák legtágabb ismert osztálya a*

$$\mathcal{T}[\cdot] = \sum_n p_n U_n \cdot U_n^\dagger \tag{I.1.59}$$

random unitér csatornák, mely különböző U_n unitér operátor konvex kombinációjából áll, azaz a rendszer minden egyes időlépésben p_n valószínűséggel az U_n időfejlődésnek megfelelően változik. Ilyen csatornákat használhatunk például perkolációs bolyongások során[38,39].

Kvantumcsatornák esetén nincs az I.1 tételnek megfelelő kvantum Birkhoff-tétel, azaz létezik a random unitér csatornákon kívül más bisztochasztikus csatorna[40], és a legáltalánosabb ilyen osztályt nem ismerjük[41]. Továbbá az aszimptotikus időfejlődés vizsgálat során kiderült[42], hogy $d = 2$ dimenzió felett a csatorna végtelenszeri hatása sem helyettesíthető egyetlen random unitér csatornával.

Kvantumcsatorna mint nyílt dinamika

Az eddigiekben láttuk, hogy egy zárt rendszer dinamikáját, időfüggetlen Hamilton-operátor esetén, egy $C[\cdot]$ koherens csatornával a következőképpen adhatjuk meg

$$\varrho(t+1) = C[\varrho(t)] = U\varrho(t)U^\dagger\,, \tag{I.1.60}$$

nyílt rendszerek esetén pedig egy $\mathcal{T}[\cdot]$ kvantumcsatornával. A $\mathcal{T}[\cdot]$ csatorna teljesen pozitív tulajdonságából következik, hogy az I.1.60 egyenlethez hasonló alakban megadható.

I.6. *Tétel.* *(Kraus-reprezentáció[43–45]) Minden teljesen pozitív $\Phi : \mathcal{B}_d(\mathcal{H}) \to \mathcal{B}_d(\mathcal{H})$ lineáris leképezés megadható a következő alakban*

$$\Phi[\cdot] = \sum_\nu K_\nu \cdot K_\nu^\dagger, \tag{I.1.61}$$

ahol a bevezetett $\{K_\nu\}$ Kraus-operátorok tetszőleges d dimenziós mátrixok.

I.4. *Lemma.* *Minden teljesen pozitív $\mathcal{T} : \mathcal{B}_d(\mathcal{H}) \to \mathcal{B}_d(\mathcal{H})$ kvantumcsatorna megadható a következő alakban*

$$\mathcal{T}[\cdot] = \sum_\nu K_\nu \cdot K_\nu^\dagger, \tag{I.1.62}$$

ahol $\{K_\nu\}$ a Kraus-operátorok teljesítik a következő normálási feltételt

$$\sum_\nu K_\nu^\dagger K_\nu = \mathbb{I}_d\,, \tag{I.1.63}$$

továbbá feltételes csatorna esetén

$$\sum_\nu K_\nu^\dagger K_\nu < \mathbb{I}_d\,, \tag{I.1.64}$$

A trace ciklikus tulajdonságából fakadóan az I.1.57 egyenlettel definiált $\mathcal{T}[\cdot]$ kvantumcsatorna duálisa megadható a következőképpen

$$\mathcal{T}^*[\cdot] = \sum_\nu K_\nu^\dagger \cdot K_\nu \,. \tag{I.1.65}$$

Vegyük észre, hogy az I.1.62 Kraus-reprezentáció nem egyértelmű, hiszen ha bevezetünk egy tetszőleges U unitér transzformációt, mellyel minden $\{K_\nu\}$ Kraus-operátort eltranszformálunk, akkor a $\{\overline{K}_\nu = UK_\nu\}$ Kraus-operátorokkal definiált kvantumcsatorna az eredetivel megegyező dinamikát ír le[33]. Azonban ha a generátorok között megköveteljük a $\mathrm{Tr}K_i^\dagger K_j \sim \delta_{i,j}$ ortogonalitási feltételt, akkor azzal már egyértelműen definiáljuk a felbontást, mely $r < d^2$ független Kraus-operátort tartalmaz.

I.7. *Tétel.* *(Stinespring-dilatációs tétel[46]) Legyen $\Phi : \mathcal{B}_d(\mathcal{H}) \to \mathcal{B}_{d'}(\mathcal{H})$ teljesen pozitív lineáris leképezés. Ha $\Phi[\cdot]$ trace őrző, akkor minden $k > dd'$ esetén létezik egy hozzá tartozó U unitér operátor ($UU^\dagger = \mathbb{I}_d$), mely segítségével $\Phi[\cdot]$ megadható, mint egy unitér csatorna hatása egy $d \cdot k$ dimenziós $\mathcal{H} \otimes \mathcal{K}$ Hilber-térbe ágyazva*

$$\Phi[A] = Tr_k \left[U(A \otimes \mathbb{I}_k)U^\dagger \right] , \tag{I.1.66}$$

ahol $A \in \mathcal{B}_d(\mathcal{H})$ és Tr_k a $\mathcal{K}$ térre vett kiátlagolás.

A Stinespring-dilatációs tétel segítségével a következő szemléletes képet rendelhetjük a Kraus-operátorokkal leírt időfejlődéshez: kiterjeszthetjük az általunk megfigyelt, $\mathcal{H}$ Hilbert-téren értelmezett ϱ rendszert a $\mathcal{K}$ Hilbert-téren lévő $\omega = |0\rangle\langle 0|$ környezettel, így az együttes rendszer már egy zárt rendszert alkot, mely unitér módón fejlődök, majd az időfejlődés után részleges trace-szel visszalépünk a vizsgált rendszer terébe, azaz

$$\mathcal{T}[\varrho] = \mathrm{Tr}_k \left[U(\varrho \otimes \omega)U^\dagger \right] = \sum_\nu \langle \nu| U \left[\varrho \otimes |0\rangle\langle 0| \right] U^\dagger |\nu\rangle = \sum_\nu K_\nu \varrho_t K_\nu^\dagger \,, \tag{I.1.67}$$

ahol a $\{K_\nu\}$ Kraus-operátorok pedig a következő elemekből állnak

$$\langle i| K_\nu |j\rangle = (\langle i| \otimes \langle \nu|) K_\nu (|j\rangle \otimes |0\rangle) \,. \tag{I.1.68}$$

Belátható, hogy a Kraus-operátorokra vonatkozó I.1.63 trace őrzési feltétel így automatikusan teljesül

$$\sum_\nu K_\nu^\dagger K_\nu = \sum_\nu \langle 0| U^\dagger |\nu\rangle \langle \nu| U |0\rangle = \langle 0| U^\dagger \underbrace{\sum_\nu |\nu\rangle\langle \nu|}_{\mathbb{I}_{dk}} U |0\rangle = \langle 0| \mathbb{I}_k |0\rangle = \mathbb{I}_d \,. \tag{I.1.69}$$

A $\mathcal{T}[\cdot]$ csatorna I.1.67 egyenlettel megadott alakját környezeti reprezentációnak nevezzük[47].

A Hilbert-tér szerkezete a csatorna aszimptotikus viselkedése alapján

Az 1.1.1 fejezethez hasonlóan a kvantumrendszerek egy $\mathcal{H}$ Hilbert-téren értelmezett állapotait is feloszthatjuk azok hosszútávú viselkedésük alapján átmeneti, illetve elnyelő részekre. Az átmenti állapotokat a

$$\mathcal{D} = \left\{ |\varphi\rangle \in \mathcal{H} : \quad \forall \varrho \in \mathcal{B}(\mathcal{H}) \quad \lim_{t\to\infty} \langle \varphi| \mathcal{T}^t[\varrho] |\varphi\rangle = 0 \right\} \tag{I.1.70}$$

bomló altér tartalmazza, míg az elnyelő állapototokat az erre merőleges

$$\mathcal{R} = \mathcal{D}^\perp = \{ |\varphi\rangle \in \mathcal{H} : \quad \forall |\varphi_\mathcal{D}\rangle : \langle \varphi|\varphi_\mathcal{D}\rangle = 0 \} \tag{I.1.71}$$

gyorsan visszatérő altér. A két altér konstrukciójából látható, hogy direkt összegük kifeszíti a teljes Hilbert-teret, azaz $\mathcal{H} = \mathcal{D} \oplus \mathcal{R}$.

A gyorsan visszatérő altér további $\{\mathcal{V}_i\}$ úgynevezett enclosure-ökre bontható[48,49], azaz olyan alterekre ahonnan a $\mathcal{T}[\cdot]$ evolúcióval nem léphetünk ki. Ezen felbontások közül kiemelten fontos szerepet játszik az $\mathcal{R}_i$ ortogonális irreducibilis tartományokkal (vagy ezzel ekvivalensen minimális enclosure-ökkel) vett

$$\mathcal{R} = \mathcal{R}_1 \oplus \mathcal{R}_2 \oplus \cdots \oplus \mathcal{R}_M \tag{I.1.72}$$

dekompozíció, amikor is már tovább nem bontható olyan $\mathcal{R}_i$ tartományokra bontjuk, amelyekből választott vektorok merőlegesek a másik altérből választott vektorra. Az I.1.72 felbontás általában nem egyértelmű, viszont a különböző felbontások között tálalható egy Q izometria[48,49].

I.5. *Lemma.* *(Az encosure irreducibilis felbontásának egyértelműsége[48,49]) Vegyük a $\mathcal{V} = \mathcal{R}_1 + \mathcal{R}_2$ felbontását, ahol $\mathcal{R}_1$ és $\mathcal{R}_2$ egymásra merőleges irreducibilis alterek. A felbontás akkor és csak akkor egyértelmű, ha tetszőleges $\mathcal{W}$ encosure-re, ami $\mathcal{W} \not\perp \mathcal{R}_1$ és $\mathcal{W} \not\perp \mathcal{R}_2$ teljesül hogy $\mathcal{W} \cap \mathcal{V} = \{0\}$.*

Az állapotok osztályozásának megfelelően a $\mathcal{T}[\cdot]$ csatornát is felbonthatjuk[48,49]), függően attól, hogy melyik altéren hat. Korlátozzuk magunkat az $\mathcal{R}$ gyorsan visszatérő tartományra, ekkor a csatorna a következőképpen írható:

$$\mathcal{T}[\cdot] = \sum_{\alpha} \mathcal{T}[P^{(\alpha)} \cdot P^{(\alpha)}] + \sum_{\beta} \sum_{i,j} \mathcal{T}[P_i^{(\beta)} \cdot P_j^{(\beta)}]\,, \tag{I.1.73}$$

ahol $\{P^{(\alpha)}\}$ azokra az irreducibilis tartományokra vetít, melyekre való felbontás egyértelmű, míg $\{P_i^{(\beta)}\}$ projektorok a $\mathcal{V}_\beta$ tartomány egy lehetséges, i-vel indexelt felbontására.

Kvantumcsatornák spektrális tulajdonsága

Ebben a fejezetben áttekintem, hogy a kvantumcsatornára tett előírások milyen megkötéseket eredményeznek a csatorna $\{\mathbf{X}^{(i)}\}$ sajátállapotaira ($\mathcal{T}[\mathbf{X}^{(i)}] = \lambda_i \mathbf{X}^{(i)}$) és $\eta(\mathcal{T}) = \sup\{|\lambda| : \lambda \in \mathrm{spec}(\mathcal{T})\}$ spektrálsugarára. A továbbiakban az egyértelműség kedvéért a sajátvektorokra megkövetelem a $\mathrm{Tr}\,\mathbf{X}^{(i)} = 1$ normálási feltételt. Továbbá ezen sajátvektorok közül külön kiemelem, a későbbiekben fontos szerepet játszó, $\{\chi^{(i)}\}$ egyensúlyi eloszlásokat, melyek az egy sajátértékhez tartozó, nem negatív ($\chi^{(i)} \geq 0$) sajátvektorai a csatornának, azaz

$$\mathcal{T}[\chi^{(i)}] = \chi^{(i)}\,, \tag{I.1.74}$$

ahol $\chi^{(i)}$ minden sajátértéke nemnegatív és az I.1.74 egyenletből következik, hogy ezek az állapotok időben változatlanok.

I.8. *Tétel.* [50,51] *Ha $\Phi : \mathcal{B}_d(\mathcal{H}) \to \mathcal{B}_d(\mathcal{H})$ egy pozitív lineáris leképezés, akkor a hozzá tartozó spektrális sugárra igaz a következő egyenlőtlenség*

$$\eta(\Phi) \leq \|\mathcal{T}[\mathbb{I}_d]\|_\infty \tag{I.1.75}$$

ahol $\|A\|_\infty = sup_{|\varphi\rangle \in \mathcal{H}}\{\|A\,|\varphi\rangle\| : \langle\varphi|\varphi\rangle = 1\}$. Továbbá, ha $\Phi[\cdot]$ unitális vagy trace őrző, akkor $\eta(\Phi) = 1$.

A kvantumcsatornát definiáló három tulajdonság segítségével könnyű ellenőrizni, hogy az egy sajátértékű sajátállapotok közül az egyik, biztosan felírható az

$$\chi = \lim_{T\to\infty} \frac{1}{T} \sum_{t=0}^{T-1} \mathcal{T}^t[\mathbb{I}_d] \tag{I.1.76}$$

időátlagolás segítségével. Unitális csatornák esetén pedig a következő tétel segítheti a csatorna fixpontjainak megtalálását.

I.9. *Tétel.* [52–54] *Tetszőleges unitális $\mathcal{T}[\cdot]$ kvantumcsatorna esetén az összes $\{\mathbf{X}^{(i)}\}$ fixpont felcserél, külön-külön, a dinamikát megadó $\{K_\nu\}$ Kraus-operátorokkal.*

A klasszikus esethez hasonlóan itt is definiálhatunk egy irreducibilis dinamikát, melyben az idő múlását egy úgynevezett irreducibilis kvantumcsatorna vezérli. A $\mathcal{T}[\cdot]$ csatornát akkor nevezünk irreducibilisnek, ha a vele megadott dinamikában a $P \in \{0, \mathbb{I}_d\}$ projektorokon kívül nem létezik más, olyan $P \in \mathcal{B}_d(\mathcal{H})$ hermitikus projektor, melyre teljesül a $\mathcal{T}[PAP] = P\mathcal{T}[A]P$ egyenlet $\forall A \in \mathcal{B}_d(\mathcal{H})$, vagy másként megfogalmazva az I.1.73 felbontás egyetlen egy tagot tartalmaz. Mivel egy irreducibilis tartomány adott $|i\rangle\langle i|$ eleméből indított folyamat mindig leszűkíthető az adott irreducibilis tartományra, így a továbbiakban feltételezhetjük, hogy az általunk vizsgált csatorna irreducibilis (az irodalomban a teljes $\mathcal{H}$ Hilbert-tér egyes $\mathcal{R}_i$ irreducibilis tartományait minimális enclosure-öknek is szokták nevezni[48,49]).

I.10. *Tétel.* *(Perron-Frobenius tétel lineáris leképezésekre[55]) Irreducibilis lineáris leképezés esetén a legnagyobb sajátértékhez tartozó, $\mathbf{X} > 0$ sajátállapot nem degenerált, kifeszíti a teljes irreducibilis tartományt és előáll az I.1.76 egyenlettel megadott alakban.*

Az I.10 tétel következményeképpen minden irreducibilis kvantumcsatorna χ fixpontja egyértelmű és előáll az I.1.76 egyenlettel megadott alakban.

I.11. *Tétel.* *Minden irreducibilis és bisztochasztikus $\mathcal{T} : \mathcal{B}_d(\mathcal{H}) \to \mathcal{B}_d(\mathcal{H})$ kvantumcsatornának egyetlenegy nemnegatív χ fixpontja van, mégpedig a kifeszített térre vett projektor, azaz $\mathcal{T}[\chi] = \chi \to \chi = \mathbb{I}_d/d$.*

I.9. *Példa.* *Definiálja a $\mathcal{T} : \mathcal{B}_2(\mathcal{H}) \to \mathcal{B}_2(\mathcal{H})$ irreducibilis és bisztochasztikus kvantumcsatornát a*

$$K_0 = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix} \tag{I.1.77}$$

Kraus-operátor, ekkor belátható, hogy a dinamikához a

$$\boldsymbol{X}^{(1)} = \frac{1}{2}\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \qquad \boldsymbol{X}^{(2)} = \frac{1}{2}\begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \qquad \boldsymbol{X}^{(3)} = \begin{bmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{bmatrix} \qquad \boldsymbol{X}^{(4)} = \begin{bmatrix} 1 & -2 \\ 0 & -1 \end{bmatrix} \tag{I.1.78}$$

sajátállapotok tartoznak, melyek sajátértékei rendre a következők: $\lambda_i = \{1, 1, -1, -1\}$. Az $\{\boldsymbol{X}^{(i)}\}$ sajátállapotok közül, csak a $\boldsymbol{X}^{(1)}$ nemnegatív és önadjungált, úgynevezett fizikai állapot. Továbbá a többi sajátállapot lineáris kombinációjaként sem lehet további fizikai állapotot kikeverni, így látható, hogy a fizikai téren csak az $\boldsymbol{X}^{(1)}$ sajátállapot létezik $\lambda_1 = 1$ sajátértékkel (tehát egyértelmű a legnagyobb sajátértékű sajátállapot és arányos a $\mathcal{B}_2(\mathcal{H})$-n értelmezett egységoperátorral).

Ergodikus kvantumcsatornák

Az olyan irreducibilis rendszereket ergodikusnak nevezünk, melyekben a különböző $\{\varrho^{(i)}\}$ állapotok

$$\lim_{t\to\infty} \mathcal{T}^t[\varrho^{(i)}] \tag{I.1.79}$$

hosszú távú viselkedése létezik. Belátható, hogy a kezdőállapottól függetlenül a határérték minden esetben a rendszerhez tartozó egyértelmű χ egyensúlyi eloszláshoz tart. Ennek köszönhetően ergodikus rendszerekben elegendő, az I.1.76 időátlagolás helyett, egy tetszőleges állapot hosszútávú viselkedésével foglalkoznunk a fixpont megállapításához. Továbbá megmutatható, hogy az I.1.79 kifejezés, a klasszikus esethez hasonlóan, a $\mathcal{T}[\cdot]$ legkisebb sajátértékének az abszolútértékével konvergál az egyensúlyi állapothoz.

1.2. Átlagos első visszatérési idő

A detektoraink korlátos mérési tartományából és véges felbontásából fakadóan minden, általunk megfigyelhető rendszerben az $\{X_t\}$ mérési eredmények leképezhetőek egy Ω véges és diszkrét állapottérre (kvantumos folyamatok esetén az állapottér elemeit a Hilbert-tér $\{|i\rangle\}$ báziselemeivel azonosítjuk). Ezzel a leképzéssel tehát a rendszer egyes állapotait megadhatjuk a hozzájuk tartozó i elem segítségével. Az állapottér ezen elemi egy véges gráfot feszítenek ki, melyek közti irányított élek klasszikus dinamika során az adott állapotok közti átmeneti valószínűségnek, míg kvantumos dinamika esetén átmeneti amplitúdóknak felelnek meg. Némi hanyagsággal, az egyes mérési eredmények közti dinamikára tekinthetünk úgy, mint egy véletlen bolyongásra a gráf pontjai között. Ezzel az absztrakt képpel több, különböző fizikai folyamatot egységesen kezelhetünk.

A gráfelmélet kialakulásának kezdete 1736-ra datálható, mikor is Leonhard Euler felvetette a königsbergi hidakon való áthaladásának híres problémáját[56]. Ezt követően megindult a gráfok tulajdonságainak vizsgálata, mely során választ kaptunk az eredeti probléma általánosítására, azaz, hogy mi a feltétele az Euler-kör (gráf minden élén pontosan egyszer áthaladó kör) létezésének. Azonban a látszólag ezzel ekvivalens nehézségű Hamilton-kör (a gráf minden csúcsán pontosan egyszer áthaladó kör) létezésének szükséges és elégséges feltétel a mai napig nyitott kérdés.

A gráfok tulajdonságainak feltérképezésével párhuzamosan az azokon értelmezett sztochasztikus dinamikák tulajdonságaival is elkezdtek foglalkozni. A feltett kérdések a folyamat, statisztikai értelemben vett, *átlagos* tulajdonságára utalnak; melyek közül végtelen vagy véges idejű viselkedést különböztetünk meg. Végtelen idejű viselkedések során azt vizsgáljuk, hogy ha hosszan magára hagyjuk a rendszert akkor milyen tulajdonságai lesznek. Például, létezik-e olyan t_r relaxációs idő, melynél nagyobb t időpillanatokban megvizsgálva, már nem tudjuk eldönteni, hogy milyen kezdeti eloszlásból indult, azaz a t_r időn túli $W^{t>t_r}$ dinamika helyettesíthető egy Π aszimptotikus dinamikával. Véges idejű viselkedés tanulmányozása során azt nézzük, hogy meddig tart amíg a rendszeren bekövetkezik egy adott esemény. Ilyen kérdések például a rendszer átlagos fedési vagy átlagos elérési idejének megállapítása.

Az átlagos elérési idő egy speciális esete az átlagos visszatérési idő, mely megadja, hogy ha a gráf egy i pontjából indult ki a dinamika, akkor átlagosan hány lépés múlva tér vissza ebbe az állapotába. Klasszikus rendszerekben a kérdés felvetését a hétköznapokban meghatározó szerepet játszó természeti folyamatok motiválták, hiszen a leírásuk főleg megfigyelésekből alkotott statisztikus modellek voltak. Hasonlóan más területekről vett bonyolult komplex rendszerekben, mint például egy adott értékpapír árfolyamának változása a tőzsdén. Kvantumos rendszerekben a kérdést a transzport folyamatok[57–59] (mint például a fotoszintézis során a foszfor klasszikus dinamikájánál gyorsabb mozgása[60], vagy kvantumos vezetési effektusok elektronjainak a mozgása[61,62]), illetve kvantum informatikai[63–68] és és kvantum biológiai[69] rendszerek viselkedésének tanulmányozása motiválta.

Mostanra a gráfok és a rajtuk értelmezett dinamika tulajdonságainak klasszikus leírása már kiforrott prob-

léma, azonban kvantumosan még sok nyitott kérdést rejtenek. A kvantumrendszerekben való megválaszolatlan kérdések, azok bonyolultságából erednek. Például míg klasszikus rendszerek esetén ismertek a legáltalánosabb dinamika átmeneti mátrixának szükséges és elégséges tulajdonságai, addig a legáltalánosabb kvantumdinamika egyelőre még ismeretlen. Továbbá ha egy kvantumrendszert megmérünk, akkor azzal óhatatlanul megváltoztatjuk, ami azt eredményezi, hogy a vizsgálni kívánt mennyiségek definiálásának egyértelműsége is komplikálódik, azaz különböző mérési protokollok mellett más és mást jelenthetnek.

Az elkövetkező fejezetekben a bolyongó átlagos első visszatérési idejének kérdéskörét járom körbe. Ahhoz hogy ezt definiálni lehessen, a kezdeti állapotnak visszatérőnek kell lennie, melyre kvantumos és klasszikus esetekben is adok egy-egy definíciót. Majd összegzem az ezzel kapcsolatban ismert legfontosabb klasszikus tételeket, illetve ismertetem a téma iránti érdeklődésünket felkeltő: Grünbaum *et al.* által írt cikk[11] fő eredményét.

1.2.1. Átlagos első visszatérési idő klasszikus rendszerekben

Az 1.1.1 fejezetben megmutattam, ha egy fizikai mennyiség, diszkrét időben mért X_t értékeiből álló sorozat, homogén Markov-láncot alkot, akkor a megfigyelt rendszer jellemezhető az $\Omega = \{i, j, k, \ldots\}$ állapottér és a W átmeneti mátrix megadásával. Az átmeneti mátrix $W_{i,j}$ mátrixeleme megadja a megfigyelt rendszerhez rendelt gráf j pontjából az i pontjába való átmenet valószínűségét. A rendszer állapotát, pedig minden időpillanatban megadhatjuk egy $\lambda(t)$ valószínűségi eloszlással, mely $\lambda_i(t)$ eleme annak a valószínűsége, hogy a t időpillanatban elvégzett mérés az $X_t = i$ eredményt adja.

Az általánosság elvesztése nélkül, az elkövetkező fejezetekben, feltételezem hogy a megfigyelt rendszer (bolyongó) a $t = 0$ időpillanatban egy jól meghatározott $\lambda_j(t = 0) = \delta_{i,j}$ kezdőállapotból indult, és ezen kezdőfeltétel mellett vizsgálom az adott i állapotba (gráfpontba) való visszatérést.

Pólya féle visszatérési szám

A visszatérés problémája először az 1900-as évek elején fogalmazódott meg, George Pólyában, aki egy parkban sétált és meglehetősen gyakran haladt el újra és újra egy ugyancsak arra járó pár mellett, habár látszólag mindketten véletlen bolyongást végeztek a park területén[70]. Pólya általánosította ezt a problémát d dimenziós, megszámlálhatóan végtelen nagy gráfokra és 1921-ben megalkotta a róla elnevezett visszatérési tételt[71], mely szerint egy véletlen bolyongást végző bolyongó 1 és 2 dimenzióban visszatér, míg magasabb dimenziók esetén nem tér vissza.

Pólya bizonyítása során bevezetett egy R számot, mely segítségével osztályozhatjuk a bolyongásokat. Az R definiálásához induljunk ki az I.1.5 Markov-tulajdonságból, mely következményeképpen annak a valószínűsége, hogy egy i állapotból j állapotba megyünk $t - t_0$ idő alatt az $(X_1, t_1), \ldots, (X_N, t_N)$ pontokon keresztül a következőképpen adható meg:

$$P(j, t|i, t_0) = W_{j,X_N} W_{X_N,X_{N-1}} \cdots W_{X_2,X_1} W_{X_1,i} \,. \tag{I.1.80}$$

Azonban, ha nem érdekel minket, hogy a köztes időlépéseket milyen állapotokon keresztül tette meg a rendszer, akkor azokra vett összegzéssel kiátlagolhatunk, így például az N időlépés alatt történő, a $\lambda_i(t_0) = \delta_{i,1}$ állapotba való visszatérés valószínűsége

$$\mathbf{P}(N.\text{ lépésben visszatértünk a 1 állapotba}) = \sum_{\{X_i\}} W_{1,X_{N-1}} W_{X_{N-1},X_{N-2}} \cdots W_{X_2,X_1} W_{X_1,1} = \left(W^N\right)_{1,1} \,. \tag{I.1.81}$$

Az I.1.81 egyenlettel megadott visszatérési valószínűség segítségével definiálhatjuk az

$$R = 1 - \frac{1}{\sum\limits_N \mathbf{P}(N.\text{ lépésben visszatértünk a 1 állapotba})} \tag{I.1.82}$$

számot, ami visszatérő bolyongás esetén 1, ellenkező esetben egynél kisebb. Visszatérő bolyongások esetén a $\sum \mathbf{P}(N.$ lépésben visszatértünk a 1 állapotba) végtelen értéke arra utal, hogy ha a bolyongás visszatérő, akkor végtelenszer visszatérő.

Átlagos első visszatérési idő definíciója

Egy általános i gráfpont első, pozitív érintési (vagy elérérsi) idejét a következőképpen definiálhatjuk:

$$T_i = \min\{t \geq 1 : X_t = i\}\,. \tag{I.1.83}$$

A pozitív jelző arra utal, hogy ha a folymatot az i pontból indítottuk, akkor a bolyongónak a $t_0 = 0$ időpillanatban való ott tartózkodását nem vesszük figyelembe, így az átlagos első visszatérést definiáló

$$\mathbb{E}_i(T_i) = \sum_{N\in\mathbb{N}^+} N p_N \tag{I.1.84}$$

statisztikus átlagolás a triviális nullától különböző értéket veszi fel. Az I.1.84 definiáló összefüggésben szereplő p_N az N. lépésben történő első visszatérés valószínűsége.

I.10. *Példa.* *Határozzuk meg az I.4 példában definiált dinamika első visszatérési idejét az* 1 *kezdőállapotba. Az I.1.24 átmeneti mátrixból leolvasható az első*

$$p_1 \;=\; 1-\alpha\,, \tag{I.1.85a}$$

illetve $N > 1$. lépésben való

$$p_{N>1} \;=\; \alpha\beta\,(1-\beta)^{N-2} \tag{I.1.85b}$$

első visszatérés valószínűsége, melyből az átlagos első visszatérés idő

$$\begin{aligned}
\mathbb{E}_1(T_1) \;&=\; \sum_{N\in\mathbb{N}^+} N p_N = (1-\alpha) + \alpha\beta \sum_{N=2}^{\infty} N\,(1-\beta)^{N-2} = (1-\alpha) + \sum_{N=1}(N+1)(1-\beta)^{N-1} = (1-\alpha) + \\
&+\; \alpha\beta\left[\sum_{N=1}^{\infty}(1-\beta)^{N-1} + \sum_{N=1} N(1-\beta)^{N-1}\right] = (1-\alpha) + \alpha\beta\left[\sum_{N=0}^{\infty}(1-\beta)^{N} - \partial_\beta \sum_{N=1}(1-\beta)^{N}\right] = \\
&=\; (1-\alpha) + \alpha\beta\left[\frac{1}{\beta} + \frac{1}{\beta^2}\right] = 1 + \frac{\alpha}{\beta}\,.
\end{aligned} \tag{I.1.86}$$

Tehát az átlagos első visszatérési idő csak a kezdőállapotból való elugrás α valószínűségének és a β visszaugrás valószínűségének az arányától függ. Az $\alpha/\beta \to 0$ határértékben a gráf két irreducibilis tartományra esik szét, melynek az 1 *állapot egy elnyelő pontja, így az innen indított dinamika triviális és az átlagos első visszatérési idő egynek adódik. Az $\alpha/\beta \to \infty$ határértékben a gráf megint két irreducibilis tartományra osztható, ahol az* 1 *állapota a rendszernek egy átmeneti tartományt, míg* 2 *állapota egy elnyelő tartományt alkot, így a bolyongás nem lesz visszatérő (így a hozzá tartozó visszatérési idő nem végtelen, hanem egyszerűen nem létezik).*

Általános tárgyalásmódban, a p_N első visszatérés valószínűségének megállapításához, az I.1.81 képletben szereplő többszörös visszatéréseket elkerülendően meg kell vizsgálnunk minden egyes időlépés után, hogy a bolyongó visszatért-e a kezdőállapotba, mert ha igen, akkor a visszatérést követően az adott folyamattal már nem kell foglalkoznunk. Ezt matematikailag úgy fogalmazhatjuk meg, hogy csak az egytől különböző közbülső pontokra átlagolunk, azaz az N. lépésben való *első* visszatérés valószínűsége

$$p_N = \sum_{\{X_n\}\neq i} W_{i,X_{N-1}} W_{X_{N-1},X_{N-2}} \cdots W_{X_2,X_1} W_{X_1,i} \,. \tag{I.1.87}$$

Melyet a

$$\widetilde{W} = (\mathbb{I} - \lambda(t_0) \circ \lambda(t_0))W \tag{I.1.88}$$

feltételes dinamika bevezetésével kompaktabb formába írhatjuk

$$p_N = (W\widetilde{W}^{N-1})_{i,i} \,. \tag{I.1.89}$$

Az I.1.82 egyenletben szereplő $R = 1$ értékével definiált visszatérő bolyongások a p_N feltételes valószínűség nyelvén a következőképpen adhatók meg: Csak azokat a folyamatokat tekintjük visszatérőnek melyekre $\sum p_N = 1$, azaz végtelen idő alatt legalább egyszer biztosan visszatér. Belátható, hogy a két definíció ekvivalens[72], valamint az elnyelő tartomány definíciójából következik, hogy csak annak állapotai visszatérőek.

I.11. *Példa.* *Határozzuk meg az I.3 példában szereplő dinamikában a $\lambda_i(t_0) = \delta_{1,i}$ kezdőállapothoz tartozó átlagos első visszatérési időt. A példa dinamikáját a*

$$\widetilde{W} = (\mathbb{I} - \lambda(t_0) \circ \lambda(t_0))W = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1/2 \\ 1 & 1/2 & 0 \\ 0 & 1/2 & 1/2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1/2 & 0 \\ 0 & 1/2 & 1/2 \end{bmatrix} \tag{I.1.90}$$

átmeneti mátrixszal írhatjuk le, melyből az N. lépésben való visszatérés valószínűsége az I.1.89 egyenletben megadott módon meghatározható. A $\{p_N\}$ értékek ismeretében az átlagos első visszatérési idő is megadható, mely numerikus számolás alapján

$$\mathbb{E}_1(T_1) = 5 \tag{I.1.91}$$

adódik.

Kac lemma

Kac 1947-ben megfogalmazott lemmájának segítésével minden irreducibilis, vagy olyan reducibilis gráf esetén, melyben a bolyongás egy a gráf elnyelő tartományból indítottuk, az átlagos első visszatérési idő meghatározhatóvá vált a dinamikához tartozó egyensúlyi állapot segítéségével.

I.6. *Lemma.* *(Kac lemma[10]) Az $\mathbb{E}_i(T_i)$ átlagos első visszatérési idő irreducibilis gráfok esetén a π egyensúlyi eloszlás i-hez tartozó komponensének a reciproka, azaz*

$$\mathbb{E}_i(T_i) = \frac{1}{\pi_i} \,. \tag{I.1.92}$$

Bizonyítás. A bizonyításhoz, használjuk fel az A függelékben definiált T_i^0 mennyiséget, mely az i állapot elérésének ideje. A 0 felsőindex, arra utal, hogy ha a kezdőállapot megegyezik az elérni kívánt állapottal, akkor a T_i^0 definíció szerint nulla. Vezessük be a $C = \{C_{i,j} = 1 : i, j \in \Omega\}$, az $M_{i,j} = \mathbb{E}_j(T_i^0)$ elemekkel megadott M és az R diagonális mátrixot, ahol $R_{i,i} = \mathbb{E}_i(T_i)$. Az előzőleg definiált C, M átlagos elérési és R átlagos visszatérési időket tartalmazó mátrixokkal a függelék A.2:

$$M_{i,j} = \begin{cases} 0 & \text{ha } i = j \\ 1 + \sum_k M_{i,k} W_{k,j} & \text{ha } i \neq j \end{cases} \tag{I.1.93a}$$

és az A.5 egyenlete:

$$R_{i,j} = \begin{cases} 1 + \sum_k M_{i,k} W_{k,j} & \text{ha } i = j \\ 0 & \text{ha } i \neq j \end{cases} \tag{I.1.93b}$$

a következő tömörebb formába írható

$$M + D = C + MW\,. \tag{I.1.94}$$

Az egyenlet átrendezéséből, és az I.1.17 sajátértékegyenletből következik

$$\begin{aligned} M(\mathbb{I} - W) &= C - D\,, \\ M(\mathbb{I} - W)\pi &= (C - D)\pi\,, \\ M\pi - M\pi &= C\pi - D\pi\,, \\ C\pi &= D\pi\,, \end{aligned} \tag{I.1.95}$$

mely diagonális komponensei visszaadják a bizonyítani kívánt tételt. □

I.12. *Példa.* *Határozzuk meg az I.6 Kac lemma segítségével az I.1.24 példában a bolyongó visszatérésének az idejét az 1 kezdőállapotába. Korábban, az I.1.25 egyenlettel, már meghatároztuk a rendszer egyensúlyi eloszlását, melyből*

$$\mathbb{E}_1(T_1) = \frac{1}{\pi_1} = \frac{\alpha + \beta}{\beta} = 1 + \frac{\alpha}{\beta}\,, \tag{I.1.96}$$

mely megegyezik az I.1.86 egyenletben megadott analitikus értékkel.

Az I.6 Kac lemmában szereplő π_i értéke megadja annak a valószínűségét, hogy ha a bolyongó helyzetét megmérjük, egy a rendszer relaxációs idejénél későbbi t időpillanatban, akkor mekkora valószínűséggel találjuk az i pontban. Tehát a bolyongó hosszú távú viselkedése során átlagosan $\mathbb{E}_i(T_i)$ időnként visszatér a kezdőállapotába, melyből következik az ergodikus tétel.

I.12. *Tétel.* *(Ergodikus tétel[73]) Jelölje $N_i(t)$ a bolyongónak az i rácspontba eltöltött időlépéseinek számát egy adott t időintervallumban, ekkor irreducibilis gráfokon végzett bolyongásra, függetlenül annak kezdőállapotától, teljesül a következő*

$$\lim_{t\to\infty} \frac{1}{t} N_i(t) = \pi_i\,. \tag{I.1.97}$$

A tétel állítása, pongyolán megfogalmazva: ”az időátlagolás megegyezik a helyátlagolással”. Jelen esetben az időátlagolás szerepét az N_i-ben való összegzést leosztó t tölti be, míg a bolyongó helyére vett helyátlagolás a π egyensúlyi eloszlásban található.

Kvantált átlagos első visszatérési idő duplán sztochasztikus rendszerekben

Az átlagos első visszatérési idő egy, az I.1.84 egyenlettel definiált, statisztikus átlagolás eredménye, így tetszőleges dinamikák esetén bármilyen értéket felvehet az $[1, \infty)$ félig nyílt halmazon. Azonban bizonyos esetekben mégis egész értéket vesz fel, ilyen speciális dinamika, például a duplán sztochasztikus átmeneti mátrixszal vezérelt folyamat.

I.7. *Lemma.* *Duplán sztochasztikus irreducibilis dinamikában a rendszer egy i állapotának az átlagos első visszatérési ideje*

- *egész*
- *független az i kezdetőállapottól*
- *megegyezik az irreducibilis tartomány méretével.*

Bizonyítás. A lemma közvetlenül következik az I.2 és az I.6 lemmákból. □

I.13. *Példa.* *Vegyünk egy szabályos,* 6 *oldalú kockát, mellyel éppen hatost dobtunk. Határozzuk meg, hogy feltehetően hány dobásra van szükség, ahhoz hogy a dobott hatosunkat egy újabb hatos kövesse. A rendszerünk egy hatpontból álló teljes gráffal ekvivalens, melyek éleihez azonosan* $1/6$ *átmeneti valószínűséget rendelhetünk, azaz*

$$W = \frac{1}{6}\begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \end{bmatrix}. \tag{I.1.98}$$

Mely egyensúlyi eloszlása $\pi = \{\pi_i = \frac{1}{6} : i \in \Omega\}$. *A kérdésre a válasz, nem más mint a hatodik rácspontba való átlagos visszatérés idő, ami* $\mathbb{E}_6(T_6) = \frac{1}{\pi_6} = 6$.

Az I.7 lemma biztosítja, hogy a homogén Markov-láncok egy tág osztálya esetén kvantált értéket vesz fel az átlagos első visszatérési idő, azonban a legtágabb ilyen osztály egyelőre még ismeretlen, de az I.11 példa is azt mutatja, hogy a duplán sztochasztikus dinamikáknál van nagyobb ilyen osztály.

1.2.2. Átlagos első visszatérési idő zárt kvantum rendszerekben

Az 1.1.2 fejezetben áttekintettem, egy $\mathcal{H}$ Hilbert-tér felett értelmezett fizikai rendszer két, időben egymást követő állapota közötti átmenetet leíró $\mathcal{T}[\cdot]$ kvantumcsatorna legfontosabb tulajdonságait. Megmutattam, hogy egy adott fizikai rendszer t időpillanatának állapotát maradéktalanul jellemezhetjük a hozzá rendelt $\varrho(t)$ sűrűségoperátorral, melynek diagonális elemei megadják, hogy ha a rendszert megmérem, akkor mekkora valószínűséggel lesz az adott mátrixelemhez tartozó tiszta állapotban. Így a $\{\varrho_{i,i}\}$ diagonális elemekkel definiált vektort azonosíthatjuk egy $\lambda = (\varrho_{i,i} : |i\rangle \in \mathcal{H})$ valószínűségi eloszlással. Azonban az offdiagonális tagok nem elhanyagolható szerepe miatt, a $\lambda(t)$ eloszlás dinamikáját csak egy $W(t)$ időfüggő sztochasztikus tárgyalással adható meg.

Az elkövetkező fejezetekben a kvantumcsatornák egy speciális osztályával, a zárt rendszerek leírására alkalmas $C[\cdot]$ koherens csatornákkal fogok foglalkozni, melyek esetén végig tiszta állapotokon keresztül fejlődik

a rendszer, így a $\varrho(t)$ sűrűségoperátor helyett elegendő egy $|\varphi(t)\rangle$ vektorral jellemeznünk őket. Továbbá, az általánosság elvesztése nélkül feltételezni fogom, hogy a rendszer a $t = 0$ időpillanatban egy jól meghatározott $|\Psi\rangle$ tiszta állapotból indult és ezen kezdőfeltétel mellett vizsgálom az adott $|\Psi\rangle$ állapotba való visszatérést.

A mérés problémája

A rendszer $|\Psi\rangle$ állapotába való visszatérésének vizsgálatához el kell tudnunk dönteni, hogy az mikor van az adott állapotában. Ez a kérdés elvezet minket a klasszikus fogalmak kvantumosba való ágyazása során felmerülő tipikus problémához: Hogyan definiáljuk a rendszeren vett mérést? A probléma gyökere abból ered, hogy mérés során a rendszerről nem triviális információt szerzünk, mely akaratlanul, de kiszűrhetetlenül megváltoztatja annak dinamikáját. Így két dolgot tehetünk: vagy megpróbáljuk átfogalmazni[74] az eredeti problémánkat, úgy hogy a mérésre ne legyen szükségünk, vagy a mérést belevesszük a dinamika tárgyalásába[75,76].

Štefaňák *et al.* a mérés befolyásoló szerepének elkerülése érdekében azt javasolták, hogy vegyünk N azonos rendszert, melyet ugyanabba a kezdeti feltételbe preparálunk, majd mindegyik rendszeren más és más időpillanatban végezzünk mérést. Pontosabban, az általuk definiált protokollban, az n.-re választott rendszert $(n-1)$ időlépésig szabadon hagyjuk fejlődni, majd az n. lépésben megmérjük. Így a mérés pillanatáig beavatkozás nélkül, tisztán kvantumos dinamika szerint fejlődik.

A mérés a dinamikához vétele az I.1.88 egyenletben a $\widetilde{W}$ átmeneti mátrixszal definiált dinamikához hasonló

$$\widetilde{U}\,|\varphi(t)\rangle = (\mathbb{I} - |\Psi\rangle\langle\Psi|)U\,|\varphi(t)\rangle \tag{I.1.99}$$

feltételes időfejlődést eredményez, mely kvantumos rendszerek esetén jelentősen eltérhet az eredeti U unitér dinamikától[77–79]. Mi ez utóbbival fogunk foglalkozni, hiszen az első esetben nem tisztázott, hogyan szűrjük ki a többszörös visszatéréseket az *első* visszatérés definiálása során.

I.14. *Példa.* *Vizsgáljuk meg a $|\Psi\rangle = |1\rangle$ kezdőállapotból indított*

$$H = \begin{bmatrix} u & |t|e^{i\phi} \\ |t|e^{-i\phi} & u \end{bmatrix} \tag{I.1.100}$$

Hamilton-operátorral definiált unitér bolyongás feltételes dinamikáját. A H mátrix exponencializálásából az

$$U = e^{-iH} = S\,e^{-i\Lambda}S^{-1} = e^{-iu}\begin{bmatrix} \cos|t| & -ie^{i\phi}\sin|t| \\ -ie^{-i\phi}\sin|t| & \cos|t| \end{bmatrix} \tag{I.1.101}$$

unitér időlépést kapjuk, ahol Λ diagonális mátrix a H mátrix $\lambda_\pm = u \pm |t|$ sajátértékeit tartalmazza, míg S a H mátrix sajátvektoriból alkotott diagonalizáló transzformáció mátrixa és az I.1.99 feltétles dinamika pedig

$$\widetilde{U}\,|1\rangle = (\mathbb{I} - |1\rangle\langle 1|)U\,|1\rangle = U_{1,2}\,|2\rangle\ . \tag{I.1.102}$$

Tehát minden mérés után az egyszer sem visszatért rendszer egy jól meghatározott ($|\varphi(t=N)\rangle \sim |2\rangle$) állapotban lesz $U_{1,2}^N$ valószínűségi amplitúdóval.

I.15. *Példa.* *Vizsgáljuk meg a $|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle \otimes (|\uparrow\rangle + i\,|\downarrow\rangle)$ állapotból indított szimmetrikus véletlen bolyongás feltételes dinamikáját egy két belső állapotú ($|\uparrow\rangle$ és $|\downarrow\rangle$) N rácspontot tartalmazó gyűrűn ($|i\rangle : i \in \{0, 1, \ldots, N-1\}$), ahol a dinamikát megadó $U = S\,R$ unitér operátor egy*

$$R = \sum_{i=0}^{N-1} |i\rangle\langle i| \otimes \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{bmatrix} \tag{I.1.103}$$

Hadamarad-érmeoperátorra és egy

$$S = \sum_{i=0}^{N-1} |i-1\rangle\langle i| \otimes |\uparrow\rangle\langle\uparrow| + |i+1\rangle\langle i| \otimes |\downarrow\rangle\langle\downarrow| \tag{I.1.104}$$

léptető operátorra bontható (gyűrű periodikusságából következően $|N\rangle = |0\rangle$ *és* $|-1\rangle = |N-1\rangle$*). Az* $N = 900$ *rácspontot tartalmazó gyűrű esetére numerikusan meghatároztam a feltételes dinamika során kialakuló*

$$\widetilde{\boldsymbol{P}}_\Psi(|\varphi(t=N)\rangle = |i\rangle) = \widetilde{\boldsymbol{P}}(|\varphi(t=N)\rangle = |i\rangle \,|\, |\varphi(t=0)\rangle = |\Psi\rangle) = |\langle i| U\widetilde{U}^{N-1} |\Psi\rangle|^2 \tag{I.1.105}$$

megtalálási valószínűségekből alkotott valószínűségeloszlást, valamint hogy milyen

$$\boldsymbol{P}_\Psi(|\varphi(t=N)\rangle = |i\rangle) = \boldsymbol{P}(|\varphi(t=N)\rangle = |i\rangle \,|\, |\varphi(t=0)\rangle = |\langle i| U^N |\Psi\rangle|^2 \tag{I.1.106}$$

valószínűségi eloszlást eredményezne, ha a mérést csak a folyamat legvégén végeztük volna el. Az I.1.1 ábrán jól látszik, hogy a feltételes és a tiszta dinamika jellege megegyezik, és lényegesen eltér a

$$W = \frac{1}{2}\begin{bmatrix} 0 & 1 & & & & & & 1 \\ 1 & 0 & 1 & & & & & \\ & 1 & 0 & 1 & & & & \\ & & 1 & 0 & & & & \\ & & & & \ddots & & & \\ & & & & 1 & 0 & 1 & \\ & & & & & 1 & 0 & 1 \\ 1 & & & & & & 1 & 0 \end{bmatrix} \tag{I.1.107}$$

átmeneti mátrixszal definiált dinamika klasszikus eloszlásától. Továbbá az I.1.1 ábrák közül a jobboldaliakon tapasztalt csökkenése az eloszlásoknak az egyes visszatérésekkel magyarázható, hiszen minden egyes visszatérés csökkenti a feltételes dinamikához tartozó valószínűségi eloszlás normáját, ami visszatérő bolyongások esetén nullához tar.

Átlagos első visszatérési idő definíciója

Az átlagos első visszatérési idő definiálásához először meg kell állapítanunk, hogy a bolyongás visszatérő, vagy nem. Ennek eldöntése érdekében, Grünbaum *et al.*[11] követve, általánosítom a klasszikus folyamatokra az I.1.82 egyenlettel megadott Pólya féle visszatérési számot, majd definiálom az átlagos első visszatérési időt zárt kvantumrendszerekre.

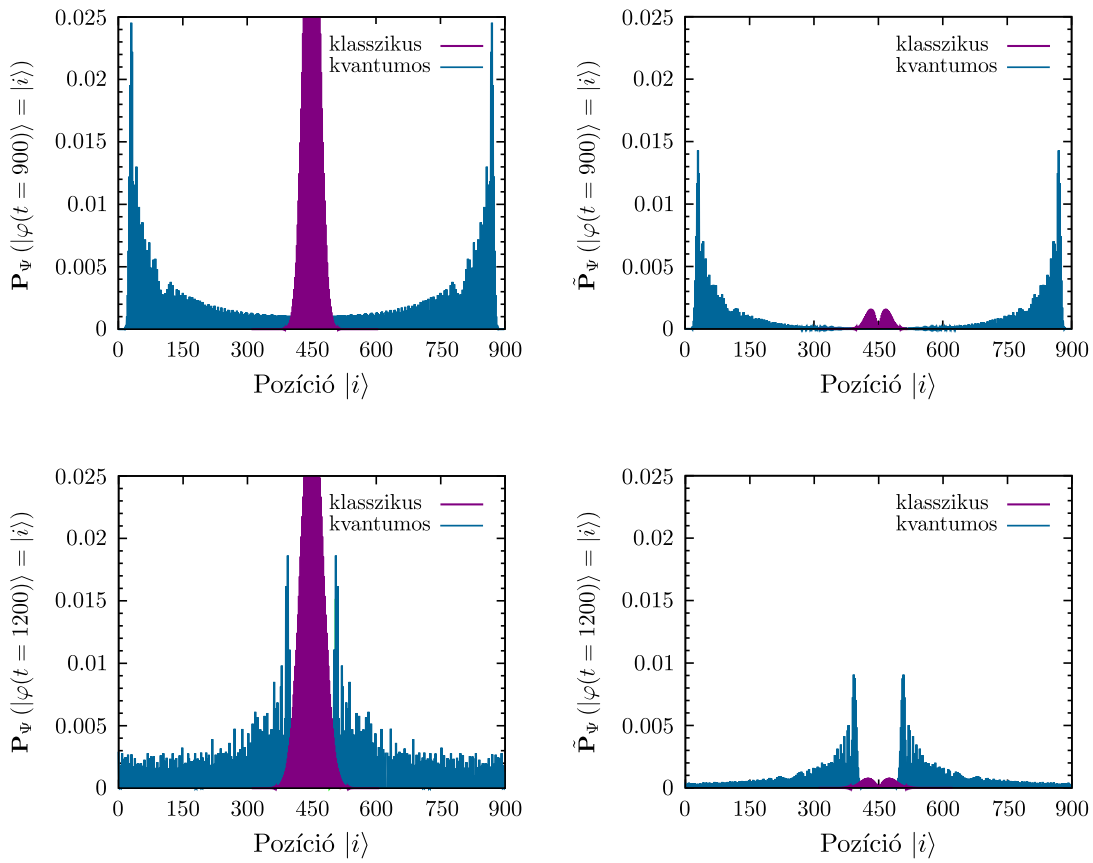
Az I.1.81 egyenlettel analóg módon megadható unitér dinamika esetén az N. lépésben való visszatérés valószínűsége, mely

$$\mathbf{P}(N.\text{ lépésben visszatértünk a } |\Psi\rangle \text{ állapotba}) = |\langle\Psi| U^N |\Psi\rangle|^2 . \tag{I.1.108}$$

Azonban az első visszatérési idő meghatározásához, a következőképpen kell módosítanunk a dinamikát

$$|\varphi_{\text{cond}}(t=N)\rangle = U\widetilde{U}^{N-1} |\Psi\rangle \ , \tag{I.1.109}$$

ahol $|\varphi_{\text{cond}}(t\rangle$ egy időben csökkenő normájú feltételes hullámfüggvény, amiben már csak azok a folyamatok szerepelnek, melyek t-t megelőzően nem tértek vissza a kezdőállapotba. Tehát a méréssel módosított dinamikában



I.1.1. ábra. Az ábrázolt klasszikus (magenta), illetve kvantumos (kék) folyamatokban kialakuló megtalálási valószínűségek (jobb oldal: feltételes dinamika mellett, bal oldal: unitér dinamika esetén) numerikus meghatározásához egy $N = 900$ rácspontból álló gyűrűt használtam. Az egyes eloszlások a $t_1 = 600$ (felső két ábra) és $t_2 = 1200$ (alsó két ábra) futási idő mellett alakultak ki.

az N. lépésben való visszatérés valószínűsége megegyezik az N. lépésben való első visszatérés valószínűségével, azaz

$$p_N = \widetilde{\mathbf{P}}(N.\text{ lépésben visszatértünk a } |\Psi\rangle \text{ állapotba}) = |\langle\Psi|\varphi_{\text{cond}}(t=N)\rangle|^2 = |\langle\Psi| U\widetilde{U}^{N-1}|\Psi\rangle|^2 . \tag{I.1.110}$$

A p_N feltételes valószínűség segítségével definiálhatjuk a zárt kvantumrendszerekre vonatkozó

$$R_U = \sum_{N=1}^{\infty} p_N = 1 - \lim_{N\to\infty} |\langle\Psi|\widetilde{U}^N|\Psi\rangle|^2 \tag{I.1.111}$$

Pólya féle visszatérési számot, mely $R_U = 1$ értéke mellett a gráf visszatérő. Továbbá, belátható, hogy ha egy $|\varphi_1\rangle$ állapot visszatérő, akkor a vele azonos irreducibilis halmazban lévő $\{|\varphi_i\rangle\}$ állapotok is visszatérőek.[11]

Mivel az I.1.110 képlettel definiált p_N feltételes valószínűség már egy klasszikus értelemben vett valószínűség, így visszatérő bolyongásokra, az I.1.84 statisztikus átlagolással definiálhatjuk a $|\Psi\rangle$ állapot átlagos első visszatérési idejét, azaz

$$T_\Psi = \sum_{N\in\mathbb{N}^+} N p_N . \tag{I.1.112}$$

I.16. *Példa.* *Határozzuk meg az I.14 példához tartozó visszatérési időt. Az I.1.110 egyenletben megadott p_N feltételes visszatérési valószínűség meghatározása során látható, hogy a feltételes dinamika bevezetésével az időfejlődés helyettesíthető egy*

$$W = \begin{bmatrix} \cos^2|t| & \sin^2|t| \\ \sin^2|t| & \cos^2|t| \end{bmatrix} \tag{I.1.113}$$

átmeneti mátrixszal megadott klasszikus dinamikával, így az I.10 példa eredményéből következik, hogy az $|1\rangle$ állapotba való visszatérési idő, a t és az U paraméterektől függetlenül, a következő

$$T_1 = 1 + \frac{\sin^2|t|}{\sin^2|t|} = 2\,. \tag{I.1.114}$$

I.17. *Példa.* *Határozzuk meg az I.15 példában definiált folyamat visszatérési értékét az $|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|0\rangle\otimes(|\uparrow\rangle + i|\downarrow\rangle)$ állapotba. Numerikus számolást követően a visszatérési idő $T_\Psi = 900$-nak adódott. További vizsgálatok után azt tapasztalhatjuk, hogy páros rácspontot tartalmazó gyűrű esetén a visszatérési idő a rácspontok számával, míg páratlan rácspont esetén a rácspontok számának a kétszeresével egyezik meg.*

Kvantált átlagos első visszatérési idő zárt kvantumrendszerekben

Vegyük észre, hogy az I.16 és az I.17 példákban az átlagos első visszatérési idő értéke egésznek adódott. Az első esetben azonban ez nem váratlan, hiszen a mérés eredményeképpen mindig tudjuk, hogy hol van a rendszer, így valójában egy klasszikus, azon belül is szimmetrikus átmeneti mátrixszal megadott dinamika fejleszti a rendszert. Ezesetben alkalmazhatjuk az I.7 tételt, mely következményeképpen az átlagos első visszatérési idő megegyezik a rendszer összefüggő tartományának a méretével, ami jelen esetben 2.

A második példában az átlagos első visszatérési idő egész értéke viszont annál meglepőbb, hiszen az I.15 példa tanulságaként azt mondhatjuk, hogy kellően nagy rendszer esetén a mérés már lényegében nem befolyásolja a dinamikát, így az valóban egy zavartalan kvantumos folyamatnak tekinthető. További érdekességet mutat az átlagos első visszatérési időnek a rácspontok paritására való I.17 példában említett érzékenysége.

Az előző példák eredményei a következő tétel segítségével megérthetőek, sőt unitér dinamika esetére még meghökkentőbb állítás tehető:

I.13. *Tétel.* *(Kvantált átlagos visszatérési idő unitér dinamikákban[11]) Unitér operátorral fejlesztett irreducibilis dinamika esetén a $|\Psi\rangle$ kezdőállapotba való átlagos első visszatérési idő végtelen, vagy véges rendszerek esetén*

- *egész*
- *független a kezdetőállapottól*
- *megegyezik az irreducibilis tartomány méretével, azaz*

$$T_\Psi = dim\left[span\left(U^N|\Psi\rangle : N \in \mathbb{Z}\right)\right]\,. \tag{I.1.115}$$

I.18. *Példa.* *Az I.15 példában bevezetett rendszer páros és páratlan N rácspontok esetén is a $|n\rangle \otimes |s\rangle$ ($n \in \{0, 2, \ldots, N-1\}$ és $s \in \{\uparrow, \downarrow\}$) állapotokkal kifeszített $\mathcal{H}$ Hilbert-téren van értelmezve, mely dimenziója $2N$. Páratlan rácspont esetén a bolyongás során kifeszített tér valóban a teljes $\mathcal{H}$, szemben páros rácspont esetén,*

ahol a bejárt tér csak N dimenziós, és amely a következő:

$$\begin{aligned}\mathcal{H} &= span\Bigg(\frac{1}{\sqrt{2}}\left[|2(n-m)\rangle \otimes |\uparrow\rangle - i\,|2(m+1)\otimes|\downarrow\rangle\rangle\right], \\ &\quad \frac{1}{\sqrt{2}}\left[|2m+1)\rangle \otimes |\uparrow\rangle + i\,|2(n-m)+1\rangle \otimes |\downarrow\rangle\right] : n,m \in \{0,1\ldots,N-1\}\Bigg). \end{aligned} \tag{I.1.116}$$

Tehát páratlan rácspont esetén az átlagos első visszatérési idő a két belső állapot miatt a rácspontok kétszeresével, míg páros rácspont esetén a rácspontok számával egyelő.

Az I.13 tétel figyelemfelkeltő ereje annak köszönhető, hogy az I.1.112 egyenlet az átlagos első visszatérési időt egy statisztikus átlagolással definiálja, így különböző rendszerek esetén folytonos skálán vehetne fel értékeket, de mégis egy jól meghatározott egész; mégpedig a rendszer mérete, mely egy széles tartományban független a dinamikát megadó unitér operátor mátrixelemeitől.

Összegzés

A fejezet első felében párhuzamba állítottam a homogén Markov láncok dinamikáját leíró átmeneti mátrixos formalizmust és a kvantumrendszerek iterált kvantumcsatornákkal megadott időfejlődését. Ezen párhuzamot néhány példán és fogalmon keresztül érzékeltettem, ilyen fogalmak voltak a mindkét dinamikában fontos szerepet jásztó átmeneti, illetve elnyelő tartományok, valamint a dinamikához rendelt egyensúlyi eloszlások.

A fejezet második felében az egyes dinamikák jellemzésére szolgáló átlagos első visszatérési idővel foglalkoztam. A visszatérési idő létezésének vizsgálatára bevezettem a Pólya számot, mely 1 értéke mellett foglalkozhatunk csak átlagos visszatérési idővel. Ezt követően ismertettem a klasszikus dinamikában ismert Kac lemmát, mely szerint a dinamika egyensúlyi eloszlása teljesen meghatározza az egyes állapotok átlagos első visszatérési idejét. Valamint bemutattam az iterált unitér dinamikára vonatkozó tételt, mely szerint ezen folyamatokban az átlagos első visszatérési idő egész vagy végtelen értéket vesz fel.

Végezetül megmutattam hogy a duplán sztochasztikus speciális folyamatokban a Kac lemma az iterált unitér dinamikákban talált tételhez hasonló eredményt ad.

– 2 –
Az SU(N) Heisenberg-modell

Erősen korrelált rendszerek vizsgálatánál sokszor tapasztalhatjuk, hogy a töltésdinamika szabadságfokai kifagynak és a töltéshordozók egy közel statikus elrendeződést követnek. Ezen rendszerekben a töltésdinamikát leválasztva koncentrálhatunk az egyes gócpontokban kialakuló mágneses momentumok dinamikájára, melyek egyik minimál modellje a párkölcsönhatásokból felépített Heisenberg-modell. Az elkövetkező fejezetekben ezt a modellt származtatom elemi elvekből és bemutatom annak főbb tulajdonságait.

"Physics has a history of synthesizing many phenomena into a few theories."

Richard P. Feynman

2.1. Mágneses fázisok

Köztudott, hogy kellően alacsony hőmérsékleten a kondenzált anyagok bizonyos szabadsági fokai úgymond kifagynak és így egy meghatározott struktúrát, kollektív tulajdonságot mutatnak. Például, amíg egyes részecskéi közti U kölcsönhatás energiájánál alacsonyabb, $k_B T$ energiának megfelelő, hőmérsékleten vizsgáljuk őket, addig kristályos anyagoknak tekinthetőek. Ezen kristályokban folyó elektromos áram, spin-, illetve pályamomentumból kialakulhat egy egységes mágneses viselkedés, így bizonyos szilárd testek (akár külső mágneses tér nélkülül is) rendelkezhetnek belső mágneses térrel. Az ilyen anyagokat ferromágneseknek, illetve ferrimágneseknek és a hozzájuk tartozó átalakulási hőmérsékletet pedig Curie-hőmérsékletnek nevezzük[80]. A ferromágnesekhez a következő szemléletes képet társíthatjuk: a kristály minden rácspontjához egy elemi mágnest rendelünk, melyek minden rácsponton azonos irányba mutatnak, ezzel szemben a ferrimágnesekben, az elemi mágnesek különböző irányokba mutatnak, a kristály makroszkopikus mágnesessége pedig az elemi mágnesek változó erősségéből ered[81]. A mágneses anyagok másik nagy csoportját a diamágnesek, paramágnesek és antiferromágnesek alkotják, ezekben ugyanis spontán módón nem alakul ki belső mágneses tér. Diamágnesekben a külső tér hatására egy azzal ellentétes, míg paramágneseknél azzal megegyező irányú belső mágneses mező jön létre. Antiferromágnesekben a szomszédos rácspontok ellentétes irányú mágnesesrendeződést mutatnak, azonban szemben a ferrimágnesekben, itt az elemi mágnesek azonos erősségűek[82–84].

I.19. *Példa.* *A Néel-rendeződés talán legegyszerűbb példája az N rácspontot tartalmazó láncon megvalósuló*

$$|\uparrow,\downarrow,\uparrow,\ldots,\downarrow\rangle = f^\dagger_{N,\downarrow}\ldots f^\dagger_{3,\uparrow} f^\dagger_{2,\downarrow} f^\dagger_{1,\uparrow}|0\rangle \tag{I.2.1}$$

alternáló rendeződés, ahol $f^\dagger_{i,\alpha}$ *az üres* $|0\rangle$ *lánc i rácspontjába egy* α *spinű részecskét kelt. A*

$$S_{tot} = \sum_i S_z(i) = \frac{1}{2}\left(f^\dagger_{i,\uparrow} f_{i,\uparrow} - f^\dagger_{i,\downarrow} f_{i,\downarrow}\right) \tag{I.2.2}$$

operátor segítségével meghatározhatjuk a $|\uparrow,\downarrow,\uparrow,\ldots,\downarrow\rangle$ *rendezett állapotban létrejövő mágneses tér nagyságát, ami nullának adódik.*

Azonban magas koordinációs számú antiferromágnesekben, vagy nem bipartit rácsokban ez a fajta Néel-rendeződés nem mindig tud kialakulni, így ezekben, a klasszikus képen túlmutató, egzotikus mágneses fázisok jelennek meg. Ilyen egzotikus rend található például a kémiában fontos szerepet játszó vegyértékkötésekből alkotott kristályban (VBS), mely bázisait a

$$|\underline{i}, \underline{j}\,\rangle = \left|[i_1, j_1], [i_2, j_2], \ldots, [i_{N/2}, j_{N/2}]\right\rangle \tag{I.2.3}$$

állapotok alkotják[85], ahol

$$[i, j] = \frac{1}{\sqrt{2}}\Big(|\alpha,\beta\rangle - |\beta,\alpha\rangle\Big) \tag{I.2.4}$$

a spin szingleteket és α,β pedig különböző alrács mágnesezettségeket jelölnek, melyek a ket vektorokban való elhelyezkedése határozza meg, hogy az i, illetve j rácspontokhoz tartoznak-e. Az I.2.3 egyenletben megadott bázisban $\{[i, j]\}$ párokat minden lehetséges módón kiválogathatjuk[86,87].

I.20. *Példa.* *Négy rácspontot tartalmazó gyűrűre tett, rácspontonként egy feles spinű részecske a* $|V\rangle = [1,2][3,4]$ *és a* $|H\rangle = [2,3][4,1]$ *két független VBS állapotot valósíthatja meg, ahol az egyes párosítások a*

$$[i, j] = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(f^\dagger_{i,\uparrow} f^\dagger_{j,\downarrow} - f^\dagger_{i,\downarrow} f^\dagger_{j,\uparrow}\right)|0\rangle \tag{I.2.5}$$

spin szingleteket jelölik.

A VBS fázisok egy általánosítása a rezonáló vegyértékkötésű fázis, más néven a spinfolyadékok, ahol minden lehetséges $|\underline{i}, \underline{j}\,\rangle$ állapot azonos valószínűséggel található meg. A spinfolyadékok létezésének szükségességének megfigyelése egészen 1941-ig nyúlik vissza. Ekkor mutatott rá I. Y. Pomeranchuk, hogy az $S = 1/2$ antiferromágneses Heisenberg-modellben[88] a kvantumfluktuációk elmoshatják a mágneses rendeződést és gap nélküli fermion gerjesztések keletkeznek[89]. Pomeranchuk megfigyelése ellentmond az addig ismert Néel-állapotképnek, melyben bozonikus magnon ($S = 1$) vagy gap-es ($S = 0$) szinglett gerjesztések vannak. Ezt követően 1958-ban Pomeranchuk a Fermi folyadékban instabilitást figyelt meg[90], mely tovább fokozta az igényt egy új elmélet megjelenésére. 1973-ban megjelent a spinfolyadékok első elmélete. P. W. Anderson és P. Fazekas felvetették annak a lehetőségét, hogy frusztrált spinrendszerek alapállapotában a benzolgyűrű rezonáló vegyértékkötéséhez (RVB) hasonlóan szinglett párok alakulnak ki a szomszédos spinek között[91,92]. Ez a frusztrált rendszerekre javasolt RVB alapállapot energetikailag kedvezőbbnek tűnt, továbbá hosszútávú spinrendeződés nélküli és a spin forgatással szemben invariáns egyedi alapállapot ad.

2.2. Heisenberg-modell

Az elkövetkező alfejezetekben áttekintem két rögzített $S = 1/2$ spinű elemi mágnes kölcsönhatásában fontos szerepet játszó alapfolyamatokat, melyből származtatom szilárdtestre a Heisenberg-modellt, majd a kapott modellt általánosítom magasabb spinekre. Végezetül a fejezetet a származtatott modell alapállapotának problémájának felvetésével és annak sokszínűségével zárom.

2.2.1. Az egyes rácspontokon lévő spinek közti kölcsönhatás eredete

Most röviden bemutatom, hogy a szilárdtest rácspontjain kialakuló, helyhez rögzített, elemi mágnesek között létrejövő kölcsönhatások milyen alapvető folyamatokból eredeztethetőek és hogy az egyes folyamatok milyen típusú J kölcsönhatásra vezetnek.

Mivel a leírás során az egyes elemi mágneseket rögzítettnek feltételeztük, így az általunk vizsgált szilárd testek szigetelő fázisokat írnak le. Melyek túlmutatnak a sávszigetelő elméleten, hiszen az elemi mágnesek (vegyértékelektronok, magmomentumok) kötöttsége a rácspontokon lévő töltéshordozók erős korrelációjából származtatható. Tehát a mágneses rendeződés megértéséhez az egyes töltéshordozók (legegyszerűbb esetben: elektronok) között fellépő Coulomb kölcsönhatást kell megvizsgálnunk a Pauli-elv jelenlétében. A probléma komplexitásának köszönhetően, az elkövetkező fejezetekben, annak főbb tulajdonságait igyekszem a lehető legegyszerűbb modelleken bemutatni, követve a 93 referenciában szereplő módot.

Pauli-elv következménye

A Pauli-kicserélődési elv szerint egy elektronrendszer teljes hullámfüggvényének antiszimmetrikusnak kell lennie két, szabadon választott, elektron felcserélésre. Mely elv igen erős megkötést eredményez a lehetséges hullámfüggvények terére, ennek vizsgálatához vegyük a legegyszerűbb "sok" részecske elektronrendszert; a két elektron rendszer.

Ha a rendszerhez társított Hamilton-operátor egyes tagjai nem keverik a spin és hely szabadsági fokokat, akkor az elektronrendszer teljes hullámfüggvénye a $|\Psi\rangle = |\varphi\rangle \otimes |\chi\rangle$ szorzat alakban írható, ahol $|\varphi\rangle$ az elektronok helyét, míg $|\chi\rangle$ az elektronok spin állását adja meg. Mivel a spin rész az egyes elektronok feles spinjeiből épül fel, így $|\chi\rangle$ megadható a $|\uparrow,\uparrow\rangle, |\uparrow,\downarrow\rangle, |\downarrow,\uparrow\rangle, |\downarrow,\downarrow\rangle$ bázisok segítségével, melyekből a következő S^2 és S_z sajátállapotokat keverhetjük ki:

$$|S\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\uparrow,\downarrow\rangle - |\downarrow,\uparrow\rangle\right) \qquad S = 0 \text{ (szinglet)}, \tag{I.2.6a}$$

$$|T\rangle = \begin{cases} |\uparrow,\uparrow\rangle \\ \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\uparrow,\downarrow\rangle + |\downarrow,\uparrow\rangle\right) \\ |\downarrow,\downarrow\rangle \end{cases} \qquad S = 1 \text{ (triplet)}. \tag{I.2.6b}$$

Ha ezekben az állapotokban felcseréljük a két részecske helyét, akkor láthatjuk, hogy mind a négy állapot permutációs sajátállapot is; a szinglet állapot antiszimmetrikusan, míg a triplet állapotok szimmetrikusan transzformálódnak, így a szinglet spinrészhez szimmetrikus térrészt kell választanunk, míg a triplettekhez pedig antiszimmetrikusat.

Tehát a Pauli-elv összeköti a hullámfüggvényben szereplő spin-, illetve térrészt még akkor is ha a Hamilton-operátor nem tartalmazza explicite a spin részt. Erre egy egyszerű példa a hidrogén molekula két elektronjának a mozgását leíró Hamilton-operátor

$$H_{\mathrm{He}_2} = h_0(r_1) + h_0(r_2) + v_{\mathrm{C}}^{e^- - e^-} + v_{\mathrm{C}}^{p^+ - p^+}, \tag{I.2.7}$$

ahol az egyes elektronok szeparált

$$h_0(r) = \frac{1}{2m}\nabla^2 - \frac{e^2}{|r - R_l|} - \frac{e^2}{|r - R_r|} \tag{I.2.8}$$

problémáját egy taszító

$$v_{\mathrm{C}}^{e^- - e^-} = \frac{e^2}{|r_1 - r_2|} \tag{I.2.9}$$

Coulomb-kölcsönhatás köti össze, valamint az R_l és R_r pontokban rögzített protonok között

$$v_{\mathrm{C}}^{p^+ - p^+} = \frac{e^2}{|R_l - R_r|} \tag{I.2.10}$$

taszítás ébred. Az egyes atomi Hamilton-operátorokra vonatkozó

$$h_0(r)\,|\varphi_n(r)\rangle = \varepsilon_n\,|\varphi_n(r)\rangle \tag{I.2.11}$$

sajátértékegyenletet $|r - R_l| \ll |r - R_r|$ és $|r - R_r| \ll |r - R_l|$ határesetek esetén ismertnek tekinthetjük, hiszen nem más mint a hidrogén atom centrális erőterében mozgó elektron sajátértékegyenlete. Ezen megoldások közül az ε_0 legkisebb sajátértékhez tartozó sajátvektort jelöljük a következőképpen: $|\varphi_0(r)\rangle = |\phi_R(r)\rangle$. Addig amíg a hidrogén molekula két protonja elegendően távol van egymástól addig az eredeti probléma megoldását közelíthetjük az egyik, illetve a másik protonra centrált $|\phi_l(r)\rangle$, illetve $|\phi_r(r)\rangle$ térrésszel. Az ily módón kapott egyrészecske hullámfüggvényekből a következő kétrészecske bázisokat építhetjük fel:

$$|r,r\rangle = |\phi_r(r_1),\phi_r(r_2)\rangle\,, \quad |r,l\rangle = |\phi_r(r_1),\phi_l(r_2)\rangle\,, \quad |l,r\rangle = |\phi_l(r_1),\phi_r(r_2)\rangle\,, \quad |l,l\rangle = |\phi_l(r_1),\phi_l(r_2)\rangle\ . \tag{I.2.12}$$

Az $|r,r\rangle$ és $|l,l\rangle$ bázisokat ionizált, míg a $|l,r\rangle$ és a $|r,l\rangle$ bázisokat kovalens bázisoknak szokták nevezni, mely elnevezés az elektronoknak, az egyes protonokon való, eloszlására utal.

Vegyük észre, hogy ezekből a bázisokból egyetlenegy antiszimmetrikus (tér)állapot keverhető ki

$$|\mathrm{ASz}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2(1-N^2)}}\left(|l,r\rangle - |r,l\rangle\right)\,, \tag{I.2.13}$$

ahol $N = \langle l|r\rangle$ az úgynevezett átfedési integrál. Viszont szimmetrikus bázisok kikeverésére több lehetőségünk is van, melyek azonban nem ugyanakkora valószínűséggel fordulnak elő, hiszen az elektronok taszító tulajdonságából következően az elektronfelhő szeret széthúzódni, így az ionizált állapotok kisebb valószínűséggel jelennek meg, mint a kovalens állapotok. Tehát egy általános szimmetrikus állapot a következőképpen írható fel

$$|\mathrm{GSz}(\lambda)\rangle = \frac{1}{\mathcal{N}(\lambda)}\Big[(1+\lambda^2)(|l,r\rangle + |r,l\rangle) + 2\lambda(|l,l\rangle + |r,r\rangle)\Big] \tag{I.2.14}$$

ahol a λ paraméter segítségével minimalizálhatjuk az energiát különböző protontávolságok esetén és $\mathcal{N}(\lambda)$ biztosítja a hullámfüggvény normáltságát. Az így kapott szimmetrikus állapotnak két kitüntetett határesete van; a $\lambda = 0$

$$|HL\rangle = \frac{1}{\sqrt{2(1+N^2)}}(|l,r\rangle + |r,l\rangle) \tag{I.2.15}$$

Heitler-London és a $\lambda = 1$

$$|MP\rangle = \frac{1}{2(1+N)}\left(|r,r\rangle + |l,r\rangle + |r,l\rangle + |l,l\rangle\right) \tag{I.2.16}$$

molekulapálya állapot.

Direkt kicserélődés (exchange)

A hidrogén molekula sajátérték problémájának Heitler-London közelítésében megfeledkezünk az ionizált bázisokról és feltesszük, hogy leszűkíthetjük a vizsgált Hilbert-teret a kovalens bázisokkal kifeszítettre. Ez esetben az elektronrendszer teljes hullámfüggvénye $|T\rangle_{\mathrm{HL}} = |\mathrm{ASz}\rangle \otimes |T\rangle$ vagy $|S\rangle_{\mathrm{HL}} = |HL\rangle \otimes |S\rangle$ lehet, melyek várható energiakülönbsége (a spin résztől függetlenül)

$$\begin{aligned} 2J_{l,r} &= E_T - E_S = {}_{\mathrm{HL}}\langle T| H_{H_2} |T\rangle_{\mathrm{HL}} - {}_{\mathrm{HL}}\langle S| H_{H_2} |S\rangle_{\mathrm{HL}} = \langle \mathrm{ASz}| H_{H_2} |\mathrm{ASz}\rangle - \langle \mathrm{HL}| H_{H_2} |\mathrm{HL}\rangle \\ &= -2\frac{(\mathcal{K}_{l,r} - N^2 C_{l,r}) - 2N(1-N^2)\mathcal{T}_{l,r}}{1-N^4}, \end{aligned} \tag{I.2.17}$$

ahol

$$\mathcal{T}_{l,r} = -\frac{\mathcal{H}_{l,r} - N\mathcal{H}_{l,l}}{1-N^2}, \tag{I.2.18a}$$

és

$$\mathcal{H}_{l,r} = \langle \phi_l(r)| h_0(r) |\phi_r(r)\rangle , \tag{I.2.18b}$$

$$\mathcal{H}_{l,l} = \langle \phi_l(r)| h_0(r) |\phi_l(r)\rangle , \tag{I.2.18c}$$

valamint

$$C_{l,r} = \langle \phi_l(r_1)| \langle \phi_r(r_2)| v_{\mathrm{C}}^{e^- - e^-} |\phi_l(r_1)\rangle |\phi_r(r_2)\rangle , \tag{I.2.18d}$$

$$\mathcal{K}_{l,r} = \langle \phi_l(r_1)| \langle \phi_r(r_2)| v_{\mathrm{C}}^{e^- - e^-} |\phi_l(r_2)\rangle |\phi_r(r_1)\rangle . \tag{I.2.18e}$$

A $C_{l,r}$ Coulomb-integrál a $|\,|\phi_l\rangle\,|^2$ és a $|\,|\phi_r\rangle\,|^2$ töltéseloszlások taszító kölcsönhatásának, és a $\mathcal{K}_{l,r}$ kicserélődési integrál pedig a részecskék megkülönböztethetetlenségének eredménye. Belátható, hogy a $\mathcal{T}_{l,r}$, $C_{l,r}$ és a $\mathcal{K}_{l,r}$ integrálok nem negatívak.

Az I.2.17 egyenletből következik, hogy $J < 0$ értéke esetén az alapállapot triplet (ferromágneses), míg $J > 0$ esetén szinglet (antiferromágneses) rendeződésű, így a kovalens bázisokkal kifeszített térben bevezethetjük az I.2.7 Hamilton-operátorral ekvivalens

$$H_{\mathrm{eff}}^{\mathrm{HL}} = \text{konst.} + 2J_{l,r} S(r_l) S(r_r) \tag{I.2.19}$$

effektív Hamilton-operátort. Továbbá megmutatható, hogy az $N = 0$ átfedésmentes esetben $C_{l,r} = \mathcal{K}_{l,r}$ és $J_{r,l} < 0$, így az alapállapotban a ferromágneses rendeződés lesz preferált, tehát antiferromágneses alapállapothoz véges átfedésre ($N \neq 0$) van szükségünk. Kis átfedés esetén vezető rendben a triplet és a szinglet állapotok energiakülönbsége a következő

$$J_{l,r} = 2N\mathcal{T}_{l,r} - \mathcal{K}_{l,r}, \tag{I.2.20}$$

azaz az elektronállapotok közt lévő átfedés mértékével megváltoztatható a $J_{l,r}$ csatolás előjele.

Ebből a mikroszkopikus képből a Hamilton-operátorba bevezetett párkölcsönhatások segítségével felépíthetjük, a két elektronrendszeren túlnyúló, sokrészecske rendszerre vonatkozó

$$H_{\mathrm{eff}}^{\mathrm{makro}} = \sum_{i,j} J_{i,j} S(r_i) S(r_j) \tag{I.2.21}$$

makroszkopikus elméletet, ahol $J_{i,j}$ az egyes rácspontok között kialakuló triplet, illetve szinglet rendeződések energiakülönbsége.

Kinetikus kicserélődés (superexchange)

A hidrogén molekula protonjait egymáshoz közelítve elromlik a Heitler-London közelítés és már nem hanyagolhatjuk el a $|0,0\rangle$ üres és $|\uparrow\downarrow,0\rangle$, $|0,\uparrow\downarrow\rangle$ ionizáló pályák hatását sem. Pontosabb számolásból az mondhatjuk, hogy a I.2.19 effektív modellben szereplő $J_{l,r}$ direkt kicserélődés csatolási állandója helyett a

$$J_{l,r}(U,t) = J_{l.r} + \frac{4t^2}{U} \tag{I.2.22}$$

superexchange csatolást kell használnunk, ahol $U = \langle\uparrow\downarrow,0|H_{\mathrm{H}_2}|\uparrow\downarrow,0\rangle = \langle 0,\uparrow\downarrow|H_{\mathrm{H}_2}|0,\uparrow\downarrow\rangle$ az adott hely kétszeres betöltésének energiaköltsége és $t = \langle\uparrow\downarrow,0|H_{\mathrm{H}_2}|0,0\rangle = -\langle 0,\uparrow\downarrow|H_{\mathrm{H}_2}|0,0\rangle$ a hopping amplitúdó. Így a Heitler-London közelítésen túl, a két elektront tartalmazó mikoroszkopikus kép, a szinglet és triplet állapotok felett továbbra is az

$$H_{\mathrm{eff}}^{\mathrm{superex}} = \text{konst.} + 2J_{l,r}(U,t)S(r_l)S(r_r) \tag{I.2.23}$$

effektív Hamilton-operátora vezet, mely szinglet állapota $U < 4t$ esetén $|MP\rangle$ (fluktuáló töltés eloszlás) és $U > 4t$ felett kovalens bázis (Mott-szigetelő).

2.2.2. Az SU(N) szimmetrikus Heisenberg-modell

Két, helyhez rögzített $S = 1/2$ spinű elemi mágnes kölcsönhatásának leírásának legegyszerűbb modellje az I.2.19 és az I.2.21 kölcsönhatások mintájára a

$$H = J\underline{S}(1)\underline{S}(2) \tag{I.2.24}$$

Hamilton-operátorral adható meg, ahol a J csatolás erőssége és előjele függ a kölcsönhatási folyamat jellegétől. A kölcsönhatás ezen feltételezett alakját a későbbi alfejezetekben bemutatott alapvető folyamatok részletes tárgyalásával igazolom, azonban most röviden szeretném általánosítani ezt a modellt mágneses atomokat tartalmazó szilárdtestekre.

Az I.2.24 egyenlettel megadott Hamilton-operátor általánosításához feltételezzük, hogy kristály minden i rácspontjában egy $\underline{S}(i)$ eredő spin található. A rácspontok teljes spinje egyaránt adódhat a mag, vagy az elektronok mágneses- vagy pályamomentumaiból, valamint a környező momentumok árnyékoló hatásának eredményeképpen meg is rövidülhet, azonban az általánosítás szempontjából az eredő momentum mikroszkopikus képe érdektelen. Az általánosítás során, a modell kezelhetőségének kedvéért, tegyük fel, hogy a szilárdtest spinjeink teljes kölcsönhatása párkölcsönhatások összegeként írható fel. Továbbá feltételezzük, hogy ezen párkölcsönhatások nem képesek gerjeszteni az adott rácspont spinjét hordozó atomot, így elegendő, csak az egyes kölcsönhatási tagok spin forgató szerepére koncentrálnunk. Az ily módon leszűkített altéren a teljes Hamilton-operátor a következő alakban írható

$$H_{\mathrm{Heisenberg}} = J\sum_{\langle i,j\rangle}\underline{S}(i)\underline{S}(j)\,, \tag{I.2.25}$$

ahol $\langle i, j\rangle$ a szomszédos rácspontokat jelöli és a spin operátorok a

$$[S_a(i), S_b(j)] = i\varepsilon_{a,b,c}\delta_{i,j}S_c(i) \tag{I.2.26}$$

Lie-algebrát követik. Az I.2.25 Hamilton-operátorban szereplő bond-operátor

$$\underline{S}(i)\underline{S}(j) \propto (\underline{S}(i) + \underline{S}(j))^2 + \text{konst.} \tag{I.2.27}$$

alakjából látható hogy $J < 0$ esetén a kristályban a ferromágneses, míg $J > 0$ esetén az antiferromágneses rendeződés a preferált. Ennek megfelelően a I.2.25 modellt ferromágneses, illetve antiferromágneses (izotrop) Heisenberg-modellnek nevezzük. Továbbá a bond operátorokból látható, hogy a teljes Hamilton operátor globális SU(2) szimmetrikus.

Az I.2.25 Heisenberg-modellt SU(N), $N > 2$ szimmetriájú rendszerekre úgy általánosítható, hogy a $\underline{S}$ spin operátorokat a magasabb, SU(N) szimmetria S^{α}_{β} generátoraira cseréljük, azaz

$$H^{N}_{\text{Heisenberg}} = J \sum_{\alpha,\beta}^{N} \sum_{\langle i,j \rangle} S^{\alpha}_{\beta}(i) S^{\beta}_{\alpha}(j) \,, \tag{I.2.28}$$

ahol $N = 2S + 1$ és

$$\left[S^{\alpha}_{\beta}(i), S^{\mu}_{\nu}(j) \right] = \delta_{i,j} \left(\delta_{\alpha,\nu} S^{\mu}_{\beta}(i) - \delta_{\beta,\mu} S^{\alpha}_{\nu}(i) \right) . \tag{I.2.29}$$

2.2.3. Az antiferromágneses Heisenberg-modell alapállapota

Vegyük észre, hogy a klasszikus Néel-rend nem lehet azonos a klasszikus értelemben vett antiferromágneses rendeződéssel, hiszen egyetlen Néel-állapot sem sajátvektorja az I.2.28 Heisenberg-modellnek. Ez az $S = 1/2$ esetben a Hamilton-operátor

$$\begin{aligned} H_{\text{Heisenberg}} &\propto \sum_{\langle i,j \rangle} \underline{S}(i)\underline{S}(j) = \sum_{\langle i,j \rangle} \left(S_x(i)S_x(j) + S_y(i)S_y(j) + S_z(i)S_z(j) \right) = \\ &= \sum_{\langle i.j \rangle} \left(S^{+}(i)S^{-}(j) + S^{-}(i)S^{+}(j) + S_z(i)S_z(j) \right) \end{aligned} \tag{I.2.30}$$

szuggesztívabb formájából azonnal következik, hiszen S^{+} és S^{-} léptető operátorokat tartalmazó első két tag egy tetszőleges Néel-állapotra gyakorolt hatása során megváltoztatja annak az adott helyein lévő spinek állását.

I.21. *Példa.* *Vizsgáljuk meg a két rácspontból és két feles spinből álló rendszer alapállapotát. Mivel a Heisenberg-modell nem tartalmaz explicit helyfüggést, csak spinfüggést, így a Pauli-elvet felhasználva elegendő csak az állapotok spin-részéhez tartozó hullámfüggvénnyel foglalkoznunk. Mivel a* $|\uparrow,\downarrow\rangle$ *nem sajátállapota a "bond"-Hamilton operátornak, azaz*

$$\underline{S}(1)\underline{S}(2)\,|\uparrow,\downarrow\rangle = 0 + |\downarrow,\uparrow\rangle + \frac{1}{2}\left(-\frac{1}{2}\right)|\downarrow,\uparrow\rangle \tag{I.2.31}$$

így az alapállapot nem követheti ezt a fajta rendeződést. Azonban a probléma egyszerűségének köszönhetően egzakt diagonalizálás segítségével meghatározhatjuk[93] *a Heisenberg-modell alapállapotát ami*

$$|GS\rangle = [1,2] = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(|\uparrow,\downarrow\rangle - |\downarrow,\uparrow\rangle\right) \tag{I.2.32}$$

szinglet, ilyen állapotok periodikus ismétléséből épül fel a VBS fázis.

Az I.21 példából láthatjuk, hogy a klasszikus Néel-rendeződés nem alapállapota a Heisenberg-modellnek, azonban egy lehetséges alapállapot lehet a klasszikus Néel-állapot a ráülő kvantum fluktuációkkal együtt.

I.22. *Példa.* *Vizsgáljuk meg a négy rácspontból és két feles spinből álló rendszer alapállapotát. Az I.21 példából okulva az alapállapotot a* $|VBS\rangle = [1,2][3,4]$ *VBS-állapotnak feltételezzük, melyre a "bond" operátor hatása*

$$\underline{S}(i)\underline{S}(j)[a,b][c,d] = \begin{cases} -\frac{3}{4}[a,b][c,d] & ha\ (i,j) = (a,b)\ vagy\ (i,j) = (c,d) \\ -\frac{1}{2}[b,c][d,a] + \frac{1}{4}[a,b][c,d] & ha\ (i,j) = (b,c) \\ \dots \end{cases} . \tag{I.2.33}$$

Tehát a bond operátornak azok az állapotok nem sajátállapotai, melyek nem az adott bond-hoz tartozó szinglet kombinációkat tartalmazzák, így a teljes

$$H_4 = J(\underline{S}(1)\underline{S}(2) + \underline{S}(2)\underline{S}(3) + \underline{S}(3)\underline{S}(4) + \underline{S}(4)\underline{S}(1)) \tag{I.2.34}$$

Hamilton-operátornak már nem lesz sajátállapota a feltételezett VBS-fázis. Egzakt számolással azonban belátható[93]*, hogy*

$$|GS\rangle \propto [1,2][3,4] + [2,3][4,1] \tag{I.2.35}$$

két a két VBS állapot keveréke már valóban alapállapot, mely az egyenlő linárkombinációs súlyokból fakadóan spin-folyadék állapot.

Az I.21 és az I.22 példák tanulságaként azt szűrhetjük le, hogy a fenti rendeződések közül egyik se lehet a Heisenberg-modell alapállapota, hiszen nem sajátállapota az I.2.25 Hamilton-operátornak. A bemutatott példákban egyetlenegy szobajövő alapállapotot találunk, a RVB-t. Továbbá ennél általánosabban is kijelenthetjük, hogy véges rendszerek esetén az SU(N) szimmetrikus I.2.28 Heisenberg-modell alapállapotának kérdése igen érdekes kérdés és a rá adható válasz függ az adott rács geometriájától és a szimmetria nagyságától.

Az I.2.28 Heisenberg-modellel jellemzett rendszerekben csak a spinek egymáshoz képesti párhuzamos vagy ellentétes irányú (J csatolási állandó előjelétől függően) beállása van kitüntetve, azonban a modell nem mond semmit arról, hogy a térben merre állnak be a spinek, hiszen a Hamilton-operátor teljesen gömbszimmetrikus. A ferro- vagy antiferromágneses állapotok sértik ezt a folytonos szimmetriát, mely a Goldstone-tétel értelmében bozonikus gerjesztéseket eredményez. Ezekkel ellentétben a spinfolyadékok nem sértik sem ezt a forgási szimmetriát, sem a rács szimmetriáját. Továbbá az alacsony-dimenziós Heisenberg-modell egzakt módszerekkel való megoldása során azt találták, hogy a vizsgált rendszerekben az alapállapot nem mutat spontán rendeződést[94–96].

Azonban a kis rendszerektől eltávolodva, a termodinamikai limitben, a Heisenberg-modell sokrétű alapállapotot mutat, melyet elsősorban a modellhez tartozó rács és az egyes rácspontok spinjének mérete befolyásolja. Előző, 1944-ben, L. Onsager egzakt számolásával bebizonyította, hogy négyzetrácsra tett SU(2) Heisenberg-modell alapállapota rendezett fázis is lehet[97,98], ezt követően megindult az SU(N) szimmetrikus Heisenberg-modell alapállapotának szimmetria tulajdonságának vizsgálata[99–105]. Az egyes eredmények azt mutatták, hogy végtelen nagy rendszerekben az alapállapot tetszőlegesen közel lehet a Néel-rendeződéshez, továbbá ezen rendeződésektől való eltérése pedig a rácsméret csökkentésével növekszik. Tehát véges, de kellően nagy rendszer vizsgálata során az alapállapot (bizonyos paramétertartományban) közelíthető klasszikus Néel-rendeződéssel. Azonban a kutatás során szem előtt kell tartanunk Mermin-Wagner-tételt, miszerint véges hőmérsékleten csak két-dimenzió felett alakulhat ki rendeződés[106–108].

2.3. Optikai csapdák

Az optikai rácsokban csapdázott atomok híg gázának megjelenésével laboratóriumi körülmények között olyan modellek tanulmányozására nyílik lehetőség, melyek eredeti előfordulásukban nem, vagy csak nehezen tanulmányozhatóak, hiszen segítségükkel hibamentes rács alakítható ki, mely rácsgeometriája és paraméterei finoman hangolhatóak. Optikai rácsok segítségével fermion[109] és bozon[110,111] rendszerekben egyaránt sikerült Mott-fázist létrehozni és kimutatni. Alkáli-földfémek csapdázásával lehetővé vált az SU(N) Heisenberg-modellek kísérleti vizsgálata. Jelenleg, laboratóriumi körülmények között az eddig előállított legmagasabb szimmetriájú Heisenberg-modell két dimenzióban SU(10) szimmetrikus[112], három dimenzióban SU(6) szimmetrikus[113].

Ebben a fejezetben röviden bemutatom a Hubbard-modell felírásának történelmi hátterét, majd másodrendű perturbációszámítás segítségével vázolom Hesienberg-modellel vett kapcsolatát. Ezt követően a lehető legegyszerűbb modellen leírom az atomok optikai rácsba való csapdázásának kísérleti megvalósítását. Az így kapott rendszer leírására ugyancsak használhatjuk a Hubbard-modellt, mely paramétereinek változtatására lehetőségünk nyílik a csapdázásban résztvevő lézerek segítségével.

2.3.1. A Hesienberg-modell, mint a Hubbard modell határesete

1937-ben J. H. de Boer és E. J. W. Verwey rámutatott[114] arra, hogy némely, 3d külső elektronpályával rendelkező átmenetifém-oxidok szigetelőként viselkednek, habár a sávvezetés elmélete szerint vezetők (van nem teljesen betöltött sávja). Ugyanebben a kötetben jelent meg egy rövid jegyzet, melyben N. F. Mott és R. Peierls felvetette[115] annak a gondolatát, hogy Boer és Verwey által megfigyelt szigetelés a töltéshordozók közti erős taszításából ered. 1949-ben N. F. Mott javasolt[116] egy modellt a nikkel-oxid szigetelő fázis elektron hullámfüggvényének leírására. Az általa bevezetett elméletkeben a olyan szigetelő fázis alakulhat ki, ahol a töltéshordozók erősen taszítják egymást és minden rácsponton páratlan számú töltéshordozó van. A rácspontok említett betöltése és az erős Coulomb-kölcsönhatás eredményeként a töltéshordozók egyenletes elrendeződése csak egy rövid fluktuáció erejéig változhat meg. Így Mott-szigetelőkben eltekinthetünk a töltésdinamikától és elegendő tisztán csak a spindinamikával foglalkoznunk, mely dinamika leírására használhatjuk a már bevezetett I.2.28 Heisenberg-modellt.

Ebben a fejezetben megmutatom, hogy az optikai csapdákban fontos szerepet játszó, J. Hubbard és M. C. Gutzwiller által, a vezető - (Mott-)szigetelő átalakulásra, bevezetett modellje[117,118]

$$H_{\mathrm{Hub}} = H_{\mathrm{kin}} + H_{\mathrm{kh}} \tag{I.2.36}$$

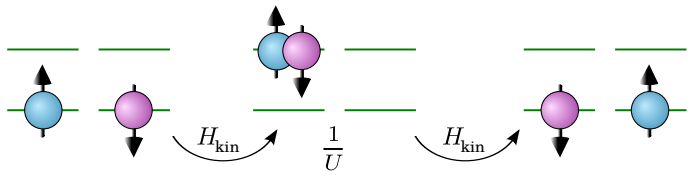
ahol a kinetikus tag

$$H_{\mathrm{kin}} = -\sum_{\substack{<i,j> \\ \sigma}} t_{i,j}(c^{\dagger}_{i,\sigma}c_{j,\sigma} + c^{\dagger}_{j,\sigma}c_{i,\sigma}) \tag{I.2.37}$$

a kölcsönhatási tag

$$H_{\mathrm{kh}} = U\sum_{\substack{i \\ \alpha>\beta}} n_{i,\alpha}n_{i,\beta} \tag{I.2.38}$$

az $U \gg t$ határebesen, az általunk vizsgált Hesienberg-modellre vezet, mely látszólagos egyszerűségének ellenére a kísérletileg megvalósított szilárdtestfizikai rendszerek leírásának egyik legjobb modellje.



I.2.1. ábra. Szomszédos rácspontok spinjei között lehetséges superexchange mechanizmus. Két szomszédos, ellenetetés állású spin a Hamilton-operátor kinetikus tagjának köszönhetően rövid időre egy rácspontra kerülhet (mely U kölcsönhatással büntetve van), majd a H_{kin} segítségével újra szétválhatnak és a visszaugrás során a kezdeti állapothoz képest kicserélődhetnek.

A Hubbard-modellben szereplő I.2.37 kinetikus tag a töltéshordozók szomszédos rácspontokon való mozgását írja le, egy t hopping valószínűségi amplitúdóval. Az I.2.38 kölcsönhatási tag pedig, a töltéshordozók közt fellépő U on-site kölcsönhatásából származó energiát adja. Az $U = 0$ tight-bindig limitben az I.2.36 Hamilton-operátor a $\{c^{\dagger}_{i,\sigma}\}$ operátorokkal keltett szabad részecskék mozgását írja le (így Fourier-térben diagonálissá válik, ha $t_{i,j}$ csak az r_i és az r_j koordináták különbségétől függ, azaz homogén a rendszer), míg a $t_{i,j} = 0$ atomi limitben a modell egy-rácspont problémává redukálódik (így diagonális valós térben). Véges $U > U_{\text{Mott}}$ kölcsönhatás erősség esetén a Hubbard-modell alapállapota minden esetben Mott-szigetelő fázis és a gerjesztési tartományban megjelenő gap arányos U-val[119]. A részecskék közt fellépő U kölcsönhatás elektronokrendszerekben tipikusan taszító ($U > 0$), míg ultrahideg atomok alkotta rendszerek esetén vonzó ($U < 0$) is lehet.

A különböző Mott-szigetelő fázisok vizsgálatához rendszerint elegendő a Hubbard-modell bizonyos határeseteit nézni. Például kölcsönható részecskék alacsony energiás gerjesztésének az $U/t \gg 1$ határesetének vizsgálatához vehetjük a $t-J$-modellt[120–124]. Azonban ha ezen felül a rácspontok átlagos betöltés egész értékét is megköveteljük ($\langle n_i \rangle = M$), akkor a B függelékben bemutatott elsőrendű perturbációszámítás végeredményképpen a

$$H_{\text{eff}} = -\sum_{\substack{|m\rangle,|n\rangle\in\mathcal{H}_M \\ |j\rangle\neq\mathcal{H}_M}} \langle m| H_{\text{kin}} |j\rangle \frac{1}{U} \langle j| H_{\text{kin}} |n\rangle \, |m\rangle \langle n| = \frac{t^2}{U} \sum_{\substack{<i,j> \\ \alpha\beta}} c^{\dagger}_{i,\alpha} c_{i,\beta} c^{\dagger}_{j,\beta} c_{j,\alpha} \tag{I.2.39}$$

effektív Hamilton-operátort kapjuk[125,126], mely az egyes rácspontokon pontosan M részecskét tartalmazó $|m\rangle, |n\rangle, \ldots$ állapotok által kifeszített $\mathcal{H}_M$ téren hat és az $|j\rangle$-re vett összegzés pedig ennek a komplement terén fut végig. Az I.2.39 egyenletben bemutatott perturbációszámítás szemléletes jelentéséhez vegyük az $M = 1$ és a $\alpha, \beta \in \{\uparrow, \downarrow\}$ esetet, ekkor két szomszédos i, j rácsponton értelmezett $|\alpha, \beta\rangle$ kétrészecskés állapotok az effektív Hamilton-operátor I.2.39 kifejtésében található nem eltűnő tagok, az I.2.1 ábrán bemutatott, kicserélődés írnak le, mely során a folyamat virtuálisan kilép a $\mathcal{H}_M$ térből.

Az I.2.39 egyenlettel megadott I.2.36 Hubbard-modell effektív modellje, a C függelékben megadott Schwinger-reprezentációból adódóan, megegyezik az I.2.28 Heisenberg-modellel, mely $U > 0$ esetén antiferromágneses csatolást eredményez.

2.3.2. A Hubbard-modell optikai csapdákkal való megvalósítása

Ebbe a fejezetben csak érzékeltetem, hogy az optikai csapdába helyezett atomok leírása hogyan adható meg a Hubbard-modellel[127,128]. Az egyszerűség kedvéért fókuszáljunk csak a csapdázott atomok két hiperfinom komponensére, mely két állapotot jelöljük $|e\rangle$ gerjesztett és $|g\rangle$ alapállapottal.

Az rácsnak megfelelő $V_{\text{dip}}(r)$ periodikus potenciál az atomok által kifeszített d dipólok és a lézerrel keltett $E(r)$ elektromágneses tér $V_{\text{dip}}(r) = -\langle dE(r)\rangle$ dipól-kölcsönhatásának következménye, mely forgóhullámú közelítésben

$$V_{\text{dip}}(r) = \frac{\Omega(r)}{2}\,|e\rangle\langle g| + \text{h.c}\,, \tag{I.2.40}$$

ahol $\Omega(r) = -2E(r)\langle e|\,d\,|g\rangle$ a kölcsönhatás Rábi-frekvenciája. Ha a lézerfény ω és az atomi ω_{eg} átmenet frekvenciája között egy $\delta = \omega - \omega_{eg}$ elhangolás van, mely sokkal nagyobb mint a Rábi-frekvencia ($\delta \gg \Omega(r)$), akkor a lézerfény nem hoz létre atomi átmenet (az alapalóállapot gerjesztésének valószínűsége $\propto |\Omega(r)|^2/4\delta^2$), így a gerjesztett állapot eliminálható (adiabatikus lecsatolással) és a dipól-kölcsönhatás egységoperátorként viselkedik a $|g\rangle$ állapot mágneses alnívóin[129], azaz

$$V_{\text{dip}}(r) = \frac{|\Omega(r)|^2}{4\delta}\mathbb{I}_{(2F+1)\times(2F+1)} \propto |E(r)|^2\mathbb{I}_{(2F+1)\times(2F+1)}\,, \tag{I.2.41}$$

ahol F az alapállapot hiperfinom kvantumszáma. Tehát a megvalósítani kivánt kristályrácsnak megfelelő állóhullámú $E(r)$ elektromos térrel kristályszerkezetbe foglalhatjuk az atomjainkat. Ez az állóhullám, több (legalább kettő) különböző irányú lézerfénnyel állíthatjuk elő, továbbá a lézerek hullámhosszának és elrendezésének változtatásával a rácsgeometriát is változtathatjuk[130,131].

A kísérleti paraméterek megfelelő választása esetén az egyes rácspontokon lévő atomok hullámfüggvényei jól elkülönülnek és a csapdatérben való mozgásuk a

$$H = -\sum_{\langle i.j\rangle}\sum_{\sigma}^{2F+1}(t_\sigma c^\dagger_{i,\sigma}c_{j,\sigma} + \text{h.c}) + U\sum_i n_{i,\uparrow}n_{i,\downarrow} \tag{I.2.42}$$

Hubbard-modellel adható meg[132–134], mely

$$t_\sigma \propto V_\sigma^{3/4}e^{-2V_\sigma^{1/2}} \qquad U \propto a_s V_\sigma^{3/4} \tag{I.2.43}$$

hopping és on-site kölcsönhatásának paraméterei különbözőképpen függnek az egyes részecskék által érzett V_σ periodikus potenciál nagyságától. Valamint az U kölcsönhatásban megjelenő a_s szórási hossz Feshbach-rezonanciával való kontrolálhatósága révén[135,136], az I.2.42 modellben szereplő egyes tagok dominanciája kísérletileg könnyen változtatható, mely átjárást biztosít különböző fizikai rendszerek és a hozzájuk tartozó effektív modellek között[137,138].

Tehát optikai csapdák segítségével, precízen vezérelhető, kvantumoptikai eszközökkel kísérletileg úton is vizsgálhatjuk a töltéshordozók szabad, illetve erősen korrelált Hubbard-modelljét. Továbbá az így megvalósított rács hibamentesnek tekinthető. Az előző fejezetben megmutattam, hogy az I.2.42 modell a rácspontok M egészszámú átlagos betöltése és $U \gg t$ határesetében az I.2.28 Heisenberg-modellre vezet. Ezen felül az I.2.42 modell különböző rácsokon vett kvantumos bolyongások vizsgálatát is lehetővé teszi[139–142].

2.4. Átlagtér közelítések

A C függelékben bemutatott, az $\{S^\alpha_\beta\}$ operátorok C.12 Schwinger-reprezentációjával az I.2.28 Heisenberg-modell egy

$$H_{\text{2-részecske}} = J\sum_{\substack{<i,j>\\ \alpha\beta}} c^\dagger_{i,\alpha}c_{i,\beta}c^\dagger_{j,\beta}c_{j,\alpha} \tag{I.2.44}$$

két-részecske kölcsönhatást ír le, mely megoldására közelítésekre van szükségünk. Ennek egyik módja, az úgynevezett Hartree-Fock közelítés, mely során az előző Hamilton-operátort a

$$H_{\mathrm{HF}} = J \sum_{\substack{<i,j> \\ \alpha\beta}} \left(\chi_{i,j}^{\alpha,\beta}\right)^{\dagger} \chi_{i,j}^{\alpha,\beta} \tag{I.2.45}$$

alakra hozzuk, ahol $\{\chi_{i,j}^{\alpha,\beta}\}$ egy-részecske operátorok, melyek $\chi_{i,j}^{\alpha,\beta} = \left\langle \chi_{i,j}^{\alpha,\beta} \right\rangle + \left(\chi_{i,j}^{\alpha,\beta} - \left\langle \chi_{i,j}^{\alpha,\beta} \right\rangle\right)$ felbontásával az eredeti problémát a

$$H_{\text{2-részecske}} \simeq J \sum_{\substack{<i,j> \\ \alpha\beta}} \left[\left(\chi_{i,j}^{\alpha,\beta}\right)^{\dagger} \left\langle \chi_{i,j}^{\alpha,\beta} \right\rangle + \left\langle \left(\chi_{i,j}^{\alpha,\beta}\right)^{\dagger} \right\rangle \chi_{i,j}^{\alpha,\beta} - \left\langle \left(\chi_{i,j}^{\alpha,\beta}\right)^{\dagger} \right\rangle \left\langle \chi_{i,j}^{\alpha,\beta} \right\rangle\right] \tag{I.2.46}$$

kifejezéssel közelítjük, ahol $\left\langle \chi_{i,j}^{\alpha,\beta} \right\rangle$ a $\chi_{i,j}^{\alpha,\beta}$ operátor legvalószínűbb, úgynevezett átlagtér értéke. A Hartree-Fock szétcsatolás segítésével az operátorok várhatóértékének megállapítása után a modell egy szabad, kölcsönhatás menetes problémába megy át, melyet már analitikusan megoldhatunk.

A Hartree-Fock közelítés eszenciája abban rejlik, hogy mely operátorpárokra vezetjük be a $\{\chi_{i,j}^{\alpha,\beta}\}$ operátorokat, hiszen ha például

$$\chi_{i,j}^{\mathrm{SL}} = \sum_{\alpha} c_{i,\alpha}^{\dagger} c_{j,\alpha} \tag{I.2.47}$$

spin-független (így a várhatóértéke is, mely a feltételezett rendeződés rendparamétere), akkor a közelítés csak SU(N) szimmetriát tartó fázisok leírására alkalmas[143]. Ezzel szemben például az SU(2) szimmetrikus modell

$$H = J \sum_{i,j} \underline{S}(i)\underline{S}(j) = J \sum_{i,j} \left(-2A_{i,j}^{\dagger} A_{i,j} + \frac{1}{4} n_i n_j\right) = J \sum_{i,j} \left(: B_{i,j}^{\dagger} B_{i,j} : -A_{i,j}^{\dagger} A_{i,j}\right) \tag{I.2.48}$$

ügyes átírásával vizsgálhatjuk az alapállapot ferromágneses, illetve antiferromágneses rendeződésének mértékét, ahol

$$A_{i,j} = \frac{1}{2}(f_{i,\uparrow} f_{j,\downarrow} - f_{i,\downarrow} f_{j,\uparrow}) \tag{I.2.49}$$

a szinglet,

$$B_{i,j} = \frac{1}{2}(f_{i,\uparrow}^{\dagger} f_{j,\uparrow} + f_{i,\downarrow}^{\dagger} f_{j,\downarrow}) \tag{I.2.50}$$

a triplet bond-operátor és $: B :$ az operátor normálrendezett alakját jelöli[144–147]. A Heisenberg-modell szinglet és triplet bond-operátorokkal való átírása a 148 referenciában szereplő módón általánosítható tetszőleges N-re.

A Hartree-Fock operátorok bevezetésének további lehetőségét illusztrálja még a 149 referencia és a A. Auerbach, D. P. Arovas, S. Sachdev, N. Read, M. Manu és I. Affleck fizikusok idevonatkozó munkái.

2.4.1. Spinhullám-közelítés

Az irodalmi áttekintés 2.2.3 fejezetében megmutattam, hogy a klasszikus Néel-rendeződés nem alapállapota az SU(N) szimmetrikus I.2.28 Heisenberg-modellnek, viszont bizonyos esetekben kellően nagy rács esetén az ettől való eltérést perturbatív módon kezelhetjük. Az alapállapot ezen leírását spinhullám-közelítésnek, a klasszikus állapottól való alacsony energiás kvantum fluktuációkat pedig spinhullámoknak nevezzük[150].

A klasszikus alapállapot és a körülötte lévő fluktuációk meghatározásának egyik módja az I.2.28 Heisenberg-modell I.2.39 Schwinger-reprezentációjának az a közelítése, mely másodrendű a $c_{i\alpha} = \langle c_{i,\alpha} \rangle + \delta c_{i,\alpha}$

részecske operátorokról leválasztott $\delta c_{i,\alpha}$ fluktuációkban, azaz

$$H_{\mathrm{Sch}}^{\mathrm{SW}} = J \sum_{\substack{\langle i,j\rangle \\ \alpha\beta}} c_{i,\alpha}^{\dagger} c_{i,\beta} c_{j,\beta}^{\dagger} c_{j,\alpha} \simeq \left\langle H_{\mathrm{Sch}}^{\mathrm{SW}} \right\rangle + \sum_{\substack{\langle i,j\rangle \\ \alpha,\beta}} t_{i,j}^{\alpha,\beta} \delta c_{i,\alpha}^{\dagger} \delta c_{j,\beta}\,, \tag{I.2.51}$$

ahol

$$t_{i,j}^{\alpha,\beta} = J \left\langle \delta c_{j,\beta}^{\dagger} \delta c_{i,\alpha} \right\rangle \tag{I.2.52}$$

és a jobb oldal első tagjának minimalizálása meghatározza a keresett klasszikus spin-konfigurációt, második tagja pedig a hozzá tartozó kvantumfluktuációkat. Az ily módón kialakuló rendeződése spontán sérti a modell SU(N) szimmetriáját, így a Goldstone-tétel értelmében [151], nulla energiás gerjesztések jelennek meg, melyek a mértékszabadságnak megfelelő, nem fizikai gerjesztéshez tartoznak. A létrejövő Goldstone-módusokat a I.2.51 modell a fizikai térre való leszűkítésével utólag ki kell küszöbölnünk.

Az általunk is követettet, az átlagtér közelítés másik lehetséges fajtája az, hogy a közelítés során nem lépünk ki a fizikai térből, így a végén, a kapott eredményt nem kell visszaprojektálnunk erre az altérre. A Goldstone-módusokat kiküszöbölendően az I.2.28 Heisenberg-modellben szereplő spin-operátorok Holstein−Primakoff-reprezentációját fogjuk alkalmazni, melyekben szereplő egyrészecske operátorok fluktuációi már nem lépnek ki a fizikai altérből.

Az elkövetkező fejezetekben bevezetem az SU(2) spin-operátorok Holstein−Primakoff-reprezentációját és megmutatom a hozzájuk tartozó átlagtér közelítést, majd ezt követően a transzformációt általánosítom tetszőleges N-re.

Holstein-Primakoff transzformáció

Az SU(N) szimmetriát sértő, klasszikus rendeződésben a szimmetria generátorai közül legalább egyikének a várhatóértéke nem nulla. Az SU(2) esetén a $\{S_a\}$ operátorok

$$S^{+}(i) = b_i^{\dagger} \cdot (2S - b_i^{\dagger} b_i)^{\alpha} \tag{I.2.53a}$$

$$S^{-}(i) = (2S - b_i^{\dagger} b_i)^{\alpha} \cdot b_i \tag{I.2.53b}$$

$$S_z(i) = S - b_i^{\dagger} b_i \tag{I.2.53c}$$

reprezentációja lehetővé teszi, hogy az átlagtérközelítés során, az egyes spinekre, mint háromdimenziós komplex vektorokra gondoljunk és a $\{b_i^{\dagger}\}$ bozonok pedig az ekörüli fluktuációkat keltik (melyek spin függetlenek, hiszen a kvantálási tengelyre, egy fázisfaktortól eltekintve, egyetlen merőleges irány van). A spin-operátorok ezen reprezentációjában kielégítik a

$$[S_z(i), S^{\pm}(i)] = \pm S_z(i) \qquad \text{és} \qquad [S^{+}(i), S^{-}(i)] = 2S_z(i) \tag{I.2.54}$$

Lie-algebrát, mely ekvivalens a szimmetria generátorokra vonatkozó I.2.26 egyenletben megadott Lie-algebrával. A $|n_B\rangle$ bozon szám sajátállapot segítségével látható, hogy a fizikai altér ekkor $2S$-dimenziós, azaz az S_z operátor $\{-S, -S+1, \ldots, S-1, S\}$ sajátértékeket vehet fel, mely az $S = 1/2$ fundamentális reprezentációban (lsd. D függelék) már csak kétdimenziós: $\{\pm 1/2\}$. Az S magasabb értéke mellett is SU(2) szimmetrikus marad az I.2.25 modell, hiszen S-től függetlenül az I.2.53 operátorok az I.2.26 kommutációs relációt követik. Továbbá az is látható, hogy a reprezentációban biztosított, hogy ezt az alteret nem hagyhatjuk el a S^{+}, illetve az S^{-} operátorok hattatásával.

Az I.2.53 reprezentáció $\alpha = 1/2$ értéke mellett Holstein–Primakoff-reprezentációnak nevezzük, melyben az $S^+ = S_x + iS_y$ és $S^- = S_x - iS_y$ operátorok egymás adjungáltjai maradnak. Az $S \to \infty$ ($\hbar \to 0$) klasszikus határesetben az I.2.53 egyenletekben a

$$\sqrt{2S - n_B} \simeq \sqrt{2S}\left(1 - \frac{n_B}{4S}\right) \tag{I.2.55}$$

sorfejtéssel élhetünk. Továbbá, míg alacsony hőmérsékleten vizsgáljuk az eredeti modellt, addig a másodrendű folyamatokat elhanyagolhatjuk, mely közelítés pontosságát a számolás végeztével ellenőriznünk kell. A klasszikus és alacsony energiás közelítésben az I.2.25 eredeti modell a

$$H^{N=2}_{\text{Heisenberg}} \simeq \left\langle H^{N=2}_{\text{Heisenberg}} \right\rangle - \sum_i JM \langle S_z(i) \rangle + JS \sum_{\langle i,j \rangle} b_i^\dagger b_j = \text{konst.} + JS \sum_{\langle i,j \rangle} b_i^\dagger b_j \tag{I.2.56}$$

modellre redukálódik, ahol $M = b_i^\dagger b_i$. A közelítésben szereplő konstans minimalizálásából megkaphatjuk az alapállapoti spinkonfigurációt.

Magas spinekre kiterjesztett Holstein-Primakoff transzformáció

Az I.2.53 reprezentáció az SU(N) szimmetria $\{S^\beta_\alpha(i)\}$ generátoraira is kiterjeszthető[152–154], ehhez feltételezzük, hogy az adott i rácsponton a preferált klasszikus spinrendeződés $\alpha \in \{1, 2, \ldots, N\}$ irányú, ekkor az i rácsponton lévő egyes generátorokat

$$S^\alpha_\alpha(i) = M - \mu_\alpha(i) \tag{I.2.57a}$$

$$S^\alpha_\beta(i) = b^{\alpha\,\dagger}_\beta(i)\,\sqrt{M - \mu_\alpha(i)} \tag{I.2.57b}$$

$$S^\beta_\alpha(i) = \sqrt{M - \mu_\alpha(i)}\, b^\alpha_\beta(i) \tag{I.2.57c}$$

$$S^\gamma_\beta(i) = b^{\alpha\,\dagger}_\beta(i) b^\alpha_\gamma(i) \tag{I.2.57d}$$

képpen reprezentálhatjuk, ahol $\beta, \gamma \neq \alpha$,

$$\mu_\alpha(i) = \sum_{\beta \neq \alpha} b^{\alpha\,\dagger}_\beta(i) b^\alpha_\beta(i) \tag{I.2.58}$$

M az egyes rácspontok betöltése és $\{b^{\alpha\,\dagger}_\beta(i)\}$ az α irányra merőleges fluktuációkat keltik.

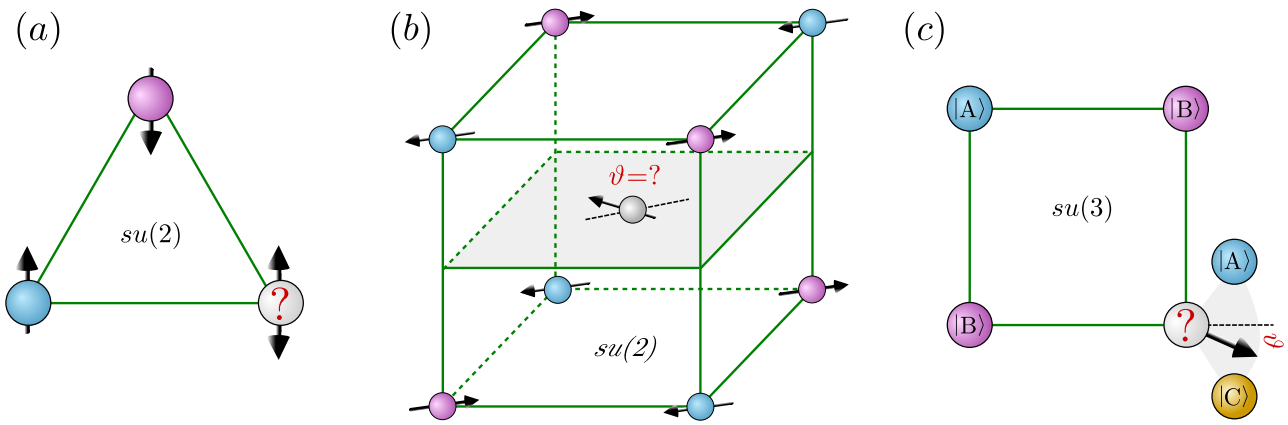
A klasszikus és alacsony energiás közelítésekben az I.2.28 eredeti modell bond-operátora a következő

$$H^N_{\text{Heisenberg}}(i,j) = \sum_{\mu,\nu} S^\nu_\mu(i) S^\mu_\nu(j) \simeq M\left[b^{\alpha\,\dagger}_\beta(i) b^\alpha_\beta(i) + \left(b^{\beta\,\dagger}_\alpha(i) b^\alpha_\beta(j) + \text{h.c.}\right) + b^{\beta\,\dagger}_\alpha(j) b^\beta_\alpha(j)\right], \tag{I.2.59}$$

ahol az i rácsponton α és a j rácsponton pedig β irányú klasszikus spinállás feltételezett. A bond-operátorok felösszegezéséből látható, hogy ezesetben is közelíthetjük az eredeti modellt egy kvadratikus, szabad modellel.

Order-by-disorder mechanizmus

A spinhullám számolás első lépéseként megpróbáljuk meghatározni az alapállapot klasszikus spinkonfigurációját, melyet úgy választunk meg, hogy az I.2.28 Hamilton-operátorban szereplő spinekre, mint N dimenziós vektorok tekintünk, majd az egyes vektorok irányának lerögzítésével szimultán minimalizáljuk az energiát az egyes élek mentén. Azonban az N nagyságtól és a rácsgeometriától függően ez nem mindig tehető meg egyértelműen.



I.2.2. ábra. A Heisenberg-modell klasszikus alapállapotának meghatározása során fellépő frusztrációk és szabadságok. (a) Az háromszög geometriára tett SU(2) szimmetrikus Heisenberg-modell frusztrációhoz vezet. (b) Az inhomogén SU(2) Heisenberg-modell fcc rácsban történő vizsgálatánál az alapállapoti konfiguráció megválasztásának szabadsága figyelhető meg. (c) Az SU(3) homogén Heisenberg-modell bipartit rácson való megoldása degenerált klasszikus spinkonfigurációra vezet.

Alacsony N és magas koordinációs szám esetén nem minimalizálható szimultán az összes bond energia, azaz geometriai frusztráció lép fel. Talán a legegyszerűbb olyan rendszer, amiben ez a fajta frusztráció megfigyelhető az a háromszög geometriára helyezett SU(2) szimmetrikus antiferromágneses Heisenberg-modell (I.2.2.a ábra). Az első két rácsponton található spin ellentétes megválasztásánál még nem jelentkezik frusztráció, azonban a harmadik rácsponthoz elérve a fennmaradt bond energiák közül az egyiket már nem tudjuk minimalizálni. Hasonló frusztrációt érhetünk el geometriailag nem frusztrált rendszerekben a homogén modelltől eltávolodva. Például, vegyük egy négyszög geometriát, melyre egy olyan SU(2) Heisenberg-modellt teszünk, ami a négyszög három éle mentén antiferromágneses és a negyedik éle mentén pedig ferromágneses csatolási állandókat tartalmaz. Ekkor a negyedik rácsponton lévő spinállásának megválasztásakor problémába ütközünk.

Azonban bizonyos rácsgeometriák esetén és más inhomogén csatolás esetén többféle, nem egyértelmű módon is minimalizálhatjuk (tagonként) a teljes energiát. Vegyük például az I.2.2.b ábrán látható bcc rácsot, melyen a

$$H = J \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} \underline{S}(i)\underline{S}(j) + J' \sum_{\langle i,j \rangle} \underline{S}(i)\underline{S}(j) \tag{I.2.60}$$

Hamilton-operátor klasszikus konfigurációjának minimumát keressük, ahol a szummában szereplő $\langle\langle i, j \rangle\rangle$ a másodszomszédokat és a $\langle i, j \rangle$ az elsőszomszédokra vett összegzést jelöli. Míg a J antiferromágneses csatolás kellően nagy a J' ferromágneses csatoláshoz képest, addig az ábrán feltételezett konfiguráció helytálló és látható hogy a cella közepén található spinállása tetszőleges értéke mellett minimális marad az energia. Ha a modell szimmetriáját növeljük, akkor a klasszikus konfiguráció már bipartit rácsokban sem lesz egyértelmű. Ilyen az I.2.2.c ábrán látható elrendezés, ahol antiferromágneses csatolások esetén a negyedig rácspont spinje tetszőleges ϑ értékkel lehet $\cos\vartheta\,|A\rangle + \sin\vartheta\,|B\rangle$ irányú.

Ha feltételezhetjük, hogy az alapállapot rendezett, de az előző megfontolásokból adódóan nem kaptunk egyértelmű klasszikus spinkonfigurációt, akkor a spinhullámszámolás során egységesen kell kezelnünk az azonosan kedvező, illetve kedvezőtlen konfigurációkat, melyeket például egy ϑ változóval parametrizálhatunk.

Az így kapott spinállásoknak megfelelően kell az egyes rácspontok spinoperátorain elvégeznünk az I.2.57 Holstein-Primakoff transzformációt és ezt követően az $1/M$ sorfejtést. Egyes esetekben a sorfejtés egy bizonyos rendje után az energiaminimalizálás egyértelműen kiválaszt egy, a termodinamikai degenerációnál kevésbé elfajult osztályát a lehetséges konfigurációknak. Továbbá ha a kiválasztás már a spinhullámok első rendjében megtörténik, azaz a I.2.59 bond-operátorokból felépített teljes Hamilton-operátor diagonalizálásánál, akkor ezt a jelenséget order-by-disorder-nek nevezzük [154–157], hiszen a kezdetben rendezetlen (nem egyértelmű) konfigurációt a kvantum és/vagy termikus fluktuációk egyértelműen rendezték.

2.5. Rendezettség kísérleti bizonyítéka

A szilárdtestek mágneses tulajdonságának kísérleti tanulmányozásának egyik legelterjedtebb módja a neutron szórás. Mely népszerűségét annak köszönheti, hogy a szórási folyamatban résztvevő neutronok semlegesek, így a szilárdtesttel való kölcsönhatásuk során közel hatástalan annak töltéseloszlására, azonban spinjénél fogva képes a kialakult spin-rendeződés letapogatására. Tehát kísérletileg lehetőségünk nyílik drasztikus beavatkozás nélkül a kialakult mágneses rend feltérképezésére. Fontos megjegyezni, hogy adott energiájú és impulzusú neutronnal csak az impulzusához rendelt hullámszámú rendet és az energiájához tartozó gerjesztéseket észlelhetjük.

A neutronszórás kísérleti megvalósítása során, a szórás előtti neutronok kérdéses tulajdonságai jó közelítéssel ismertnek tekinthetőek, míg ütközés után már csak az ezekhez rendelt valószínűségi eloszlásról beszélhetünk. Belátható, hogy ezek a kapott spektrumok arányosak az úgynevezett differenciális hatáskeresztmetszettel, mely a mért intenzitás egységnyi térszög és beeső fluxus alatt. Ha a szórás során elhanyagoljuk a neutronok a magon történő szóródását és csak az egyes momentumok között kialakuló dipól-dipól kölcsönhatásra szorítkozunk akkor a differenciális hatáskeresztmetszet arányos a dinamikus spin struktúra faktorral, azaz

$$\frac{\mathrm{d}^2\sigma}{\mathrm{d}\Omega\mathrm{d}E} \propto \sum_{\alpha,\beta\in\{x,y,z\}} \left(\delta_{\alpha,\beta} - e_\alpha e_\beta\right) S_{\alpha,\beta}(q,\omega)\,, \tag{I.2.61}$$

ahol q (ω) a neutronok impulzus- (energia-) változása a szórás során és $\{e_\alpha\}$ az $\alpha \in \{x,y,z\}$ irányba mutató egységvektor, továbbá az arányossági tényező a kísérleti összeállítás pontosabb ismeretében meghatározható [158–161]. Az I.2.61 egyenletben szereplő dinamikus struktúrafaktor az adott rácspont spinállásának időbeli korrelációját méri, mégpedig a következőképpen

$$S_{\alpha,\beta}(q,\omega) = \frac{1}{2\pi}\int \mathrm{d}t e^{i\omega t}\left\langle S_\alpha(q,t) S_\beta(-q,0)\right\rangle\,, \tag{I.2.62}$$

ahol $S_\alpha(q,t)$ a spin operátor α komponensének a Fourier-transzformáltja, azaz

$$S_\alpha(q,t) = \sum_j e^{iqj} S_\alpha(R_j,t)\,. \tag{I.2.63}$$

A rendeződés további megértésének céljából az így kapott hatáskeresztmetszetét szokás két részre osztani; a Bragg-csúcsokat tartalmazó

$$\left(\frac{\mathrm{d}^2\sigma}{\mathrm{d}\Omega\mathrm{d}E}\right)_{\mathrm{Bragg}} \propto \sum_{\alpha,\beta}(\delta_{\alpha,\beta} - e_\alpha e_\beta)\delta(\omega)\left\langle S_\alpha(q) S_\beta(-q)\right\rangle \tag{I.2.64a}$$

és a diffúziót

$$\left(\frac{\mathrm{d}^2\sigma}{\mathrm{d}\Omega\mathrm{d}E}\right)_{\text{diffúziós}} \propto \sum_{\alpha,\beta}(\delta_{\alpha,\beta} - e_\alpha e_\beta)\frac{1}{2\pi}\int \mathrm{d}t e^{i\omega t}\left[\left\langle S_\alpha(q,t)S_\beta(-q,0)\right\rangle - \left\langle S_\alpha(q)S_\beta(-q)\right\rangle\right] \tag{I.2.64b}$$

tartalmazó részre. A Bragg-csúcsok a statikus spinkorrelációs-függvénnyel arányos, így ő spin-hullám számolás klasszikus rendeződéssel, míg a diffúziós rész az erre ráülő fluktuációkkal azonosítható.

Hasonlóan feles-spinnél magasabb spin-rendszerek rendeződését is vizsgálhatjuk a hatáskeresztmetszet mérésével, annyi különbséggel, hogy az I.2.61 egyenletben szereplő spin korrelációs függvényt az adott S spinhez tartozó korrelációs függvényre kell cserélnünk [162,163].

Összegzés

A fejezet első felében bemutattam hogy a Pauli-elvből és a direkt, illetve kinetikus kicserélődés fenomenologikus képéből milyen modell származtatható egy szilárdtest két rögzített töltéshordozójának spinjei között kialakuló kölcsönhatásra. Ezen párkölcsönhatásokból felépítve eljutottunk a töltésdinamika nélküli mágneses anyagok minimál modelljéhez, a Heisenberg-modellhez.

A fejezet második felében a Heisenberg-modellben előforduló spinoperátorok különböző reprezentációit ismertettem, melyekkel különböző, de ekvivalens alakba írható az eredeti modell. Azonban az eltérő reprezentációk más és más átlagtérközelítéseket tesznek lehetővé, például a spinoperátorok Schwinger-bozon reprezentációja a spin-hullám közelítés segítségével biztosítja, hogy elméleti úton rendezett fázisokat vizsgálhassunk.

II. rész

Saját eredmények

– 1 –
Átlagos első visszatérési idő iterált dinamikákban

A dott rendszert egy valószínűségi leírás során már nem annak trajektóriájával, hanem a mérhető mennyiségeihez rendelt momentumokkal jellemezhetjük csak. Ezen momentumok közül az átlagérték kitüntetett szerepet játszik, mely megadja hogy a szóbanforgó mennyiség mérésekor legnagyobb valószínűséggel mely lehetséges értékét kapjuk. Az elkövetkező fejezetben bemutatom az általunk talált tételeket, melyek arra vonatkoznak hogy a megfigyelt rendszer átlagosan mennyi idő múlva tér vissza a kezdeti állapotába.

"Physics is, hopefully, simple. Physicists are not."

Teller Ede

1.1. Átlagos első visszatérési idő nyílt rendszerekben

Az irodalmi áttekintés I.1.116 fejezetében röviden összefoglaltam a sztochasztikus rendszerekben az X_t változó diszkrétidejű leírásának főbb tulajdonságait, és megmutattam, hogy minden ilyen folyamat leképezhető egy gráfon való véletlen bolyongásra. Ezzel az absztrakt képpel különböző fizikai rendszereket egységesen kezelhetünk, hiszen a bolyongó lehet akár; egy a levegőben Brown-mozgást végző részecske, vagy egy szilárdtestben lévő elemi gerjesztés, vagy egy elektromosvezető töltött részecskéje, vagy egy többállapotú rendszer állapota, vagy általánosan, bármi amelynek az időváltozását megfigyeljük. A véletlen bolyongások ilyenfajta általánosságukkal a fizikai rendszerek leírásának egyik vezető ágát képviselik.

Bizonyos fizikai rendszerek vizsgálata során a klasszikustól eltérő viselkedést figyeltek meg. Egyes esetekben a gráfba való további élek bevezetésével csökkent két állapot közti átmenet valószínűsége (v.ö. az I.6 és az I.7 példát), míg más rendszerekben a bolyongó megtalálási valószínűségeloszlásának a varianciája a t-ben lineáris klasszikus viselkedés helyett t^2 skálázást mutatott (lsd. az I.15 példában). Az ilyen folyamatok megértéséhez a már ismertetett kvantumbolyongásokra volt szükség, melyek iránti érdeklődés a kvantuminformatikában alkalmazott, jelentős gyorsítást elérő Grover-keresőalgoritmusnak[76,164,165] volt köszönhető.

Mára már a kvantumos bolyongások tanulmányozását különböző kísérleti rendszerek teszik lehetővé. Vizsgálhatjuk kvantumelektrodinamikai rezonátorokban[166,167], lineáris optikai eszközökkel[168–171], kvantumdotokkal[172,173]. De talán a legígéretesebb implementációs lehetőséget az optikai asztalok nyújtanak, ahol semleges atomokkal[139,140,174–176] vagy töltött ionokkal[177–179], jól kontrollált körülmények között modellezhetjük őket, például az általunk is vizsgált, SU(N) szimmetrikus Heisenberg-modell átlagtér elméletében megjelenő (komplex) hopping Hamilton-operátor segítségével[143,180–182].

Míg a klasszikus bolyongások tulajdonságait mostanra már elég jól értjük, addig a kvantumos bolyongások még számos nyitott kérdést rejtenek. Ezen kérdések közül mi olyan iterált nyílt rendszerek átlagos visszatérési idejével foglalkozunk, ahol a visszatérést ellenőrző mérést beleértjük a dinamikába[11,68,75]. Az ily módón származtatott átlagos első visszatérési idő a klasszikus és a kvantumos rendszerek egyik fő kérdésének tekinthető, mely például a káoszelméletben, de még a termodinamika makroszkopikus tárgyalásában is megtalálható[8,183–185].

Az irodalmi áttekintés 1.1.2 fejezetében megmutattam, hogy nyílt rendszer esetén a rendszer minden időpontban megadható egy $\varrho(t) : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$, véges d dimenziós $\mathcal{H}$ Hilbert-téren értelmezett, időfüggő sűrűségoperátorral. Ha a dinamika diszkrét $t \in \mathbb{N}$ időlépéseken keresztül zajlik, egy

$$\varrho(0) = |\Psi\rangle\langle\Psi| \tag{II.1.1}$$

tiszta állapotból indulva, akkor iterált nyílt dinamika esetén a $\varrho(t)$ időfejlődése egy $\mathcal{T}[\cdot]$ kvantumcsatorna ismételt alkalmazásával leírható, azaz a következőképpen

$$\varrho(t+1) = \mathcal{T}[\varrho(t)] = \sum_{\nu=0}^{d^2-1} K_\nu \varrho(t) K_\nu^\dagger \,, \tag{II.1.2}$$

ahol $K_\nu : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ a csatornához tartozó Kraus-operátorok, melyek kielégítik az I.1.63 normálási feltételt. Továbbá megmutattam, hogy ilyen esetekben leszűkíthetjük a dinamikát a bolyongás során bejárt úgynevezett $\mathcal{H}_{\text{rel}}(\mathcal{T}, \Psi)$ releváns Hilbert-térre (vagy ezzel ekvivalensen egy olyan legkisebb enclosure-re ami tartalmazza a kezdőállapotot[48,49]), melyre való projekció operátora a

$$\mathbb{I}_\Psi = \lim_{T\to\infty} \operatorname{supp}\left[\sum_{t=0}^{T} \varrho(t)\right] . \tag{II.1.3}$$

Ezen projektor segítségével definiált

$$\mathcal{T}_\Psi[\sigma] = \mathcal{T}[\mathbb{I}_\Psi \sigma \mathbb{I}_\Psi] = \sum_{\nu=0}^{d^2-1} K_\nu \mathbb{I}_\Psi \sigma \mathbb{I}_\Psi K_\nu^\dagger \tag{II.1.4}$$

leszűkített dinamika minden $\sigma \in \mathcal{B}(\mathcal{H}_{\text{rel}})$ elemet a leszűkített $\mathcal{B}(\mathcal{H}_{\text{rel}})$ téren belül fejleszt, az állítás bizonyítása az E függelékben található.

Az átlagos első visszatérési idő definiálásához a dinamikába beledefiniálunk egy mérést, mely eredménye megadja, hogy a bolyongó visszatért-e. Tehát miden $\mathcal{T}[\cdot]$ időlépés után alkalmazunk egy

$$\mathcal{M}[\sigma] = (\mathbb{I}_d - |\Psi\rangle\langle\Psi|)\sigma(\mathbb{I}_d - |\Psi\rangle\langle\Psi|) \tag{II.1.5}$$

mérést, így az időfejlődés egy feltételes kvantumcsatorna iterált alkalmazásával adható meg

$$\varrho_{\text{cond}}(t) = (\mathcal{M}\mathcal{T})^t[\varrho(0)] \,, \tag{II.1.6}$$

ahol $\varrho_{\text{cond}}(t)$ már csak az olyan folyamatokat tartalmazza, melyek t időlépésig egyszer sem tértek vissza. Tehát a $\varrho_{\text{cond}}(t)$ feltételes sűrűségoperátor trace-e

$$q_t = \operatorname{Tr}\, \varrho_{\text{cond}}(t) \tag{II.1.7}$$

megadja annak a valószínűségét, hogy a bolyongó t ideig nem tért vissza. A q_t feltételes valószínűség segítségével, az unitér bolyongásoknál I.1.111 egyenletben definiált Pólya számot a következőképpen általánosíthatjuk tetszőleges $\mathcal{T}[\cdot]$ kvantum csatornára:

$$R_{\mathcal{T}} = 1 - \lim_{t\to\infty} \mathrm{Tr}[(\mathcal{M}\mathcal{T})^t[|\Psi\rangle\langle\Psi|]] = 1 - \lim_{t\to\infty} \mathrm{Tr}[\varrho_{\mathrm{cond}}(t)] = 1 - \lim_{t\to\infty} q_t\,, \tag{II.1.8}$$

mely egy értéke mellett a folyamatot visszatérőnek, különben ($1 > R_{\mathcal{T}} \geq 0$) pedig tranzitívnek nevezzük.

A II.1.6 feltételes dinamika bevezetésével a

$$T_\Psi = \sum_{t=1}^{\infty} t p_t \tag{II.1.9}$$

átlagos első visszatérési időben szereplő p_t első visszatérés valószínűsége a

$$p_t = \langle\Psi|\,\mathcal{T}[(\mathcal{M}\mathcal{T})^{t-1}[\varrho(0)]]\,|\Psi\rangle \tag{II.1.10}$$

alakba írható. Vegyük észre, hogy a $\mathcal{T}[\cdot]$ csatorna trace őrzési feltételéből fakadóan a p_t feltételes valószínűség kifejezhető két egymás követő q_t nemvisszatérés valószínűségének különbségeként, azaz

$$p_t = q_{t-1} - q_t\,. \tag{II.1.11}$$

Felhasználva ezt visszatérő bolyongásokra az átlagos első visszatérési idő meghatározható a q_t ismeretében

$$T_\Psi = \sum_{t=1}^{\infty} t p_t = 1 + \sum_{t=1}^{\infty} q_t\,, \tag{II.1.12}$$

mely a következő tömörebb formához vezet

$$T_\Psi = \mathrm{Tr}\,\tilde{\varrho}_{\mathrm{cond}}\,, \tag{II.1.13}$$

ahol

$$\tilde{\varrho}_{\mathrm{cond}} = \lim_{t\to\infty} \tilde{\varrho}_{\mathrm{cond}}(t) = \sum_{t=0}^{\infty} \varrho_{\mathrm{cond}}(t)\,. \tag{II.1.14}$$

Az átlagos első visszatérési idő II.1.13 összefüggéssel megadott lehetséges meghatározásában szereplő $\tilde{\varrho}_{\mathrm{cond}}$ nem minden esetben létezik, azonban az F függelékben megmutatom, hogy visszatérő bolyongások esetén ($R_{\mathcal{T}} = 1$) a felírt összefüggés valóban teljesül.

1.2. Kvantált visszatérési idő

Az átlagos első visszatérési idővel való vizsgálódásunkat a 2013-ban megjelenő Grünbaum *et al.* által írt cikk[11] inspirálta, melyben felhívták a figyelmünket arra, hogy iterált unitér dinamikában a rendszer átlagosan, egész lépés alatt tér vissza a kezdeti állapotába (lsd. I.13 tétel). Az általuk megadott tételt általánosítottuk és össze kötöttük a klasszikus dinamikákban ismert tétellel, mely szerint duplán sztochasztikus iterált dinamikákban az átlagos első visszatérési idő megegyezik a kezdőállapothoz asszociált irreducibilis gráf méretével (lsd. I.7 lemma).

Mivel az iterált unitér dinamikában kialakuló bolyongások valamilyen értelemben a permutációs mátrixszal hajtott klasszikus bolyongások általánosításának felelnek meg[186], így feltételeztük, hogy az átlagos első

visszatérési idő egész értékét biztosító feltételének csak egy határesete az, mely zárt rendszerekben is teljesül. Tehát olyan tulajdonságot kerestünk, mely bizonyos nyílt rendszerekben is teljesül, és összeköti a "tisztán" kvantumos eredményt a klasszikus rendszerekben talált duplán sztochasztikus dinamikákra vonatkozó tétellel, ebben segített minket a következő tétel.

II.1. *Tétel.* [32] *Vegyük az $\{|i\rangle\}$ vektorokkal kifeszített $\mathcal{H}$ Hilbert-teret, ekkor $\mathcal{T}[\cdot]$ trace őrző csatornához rendelhetünk egy*

$$T_{i,j} = Tr(P_i \mathcal{T}[P_j]) \tag{II.1.15}$$

elemekből álló T sztochasztikus mátrixot, ahol $P_i = |i\rangle\langle i|$ és $P_j = |j\rangle\langle j|$.

Bizonyítás. A T minden $T_{i,j}$ elem egy és nulla közti értéket vesz fel, hiszen $\mathrm{Tr}\, P_j = 1$, továbbá a csatorna trace őrző és pozitivitás őrző tulajdonságából következően $0 \leq T_{i,j} = \left\langle i|\mathcal{T}[P_j]|i\right\rangle \leq 1$. A T mátrix sztochasztikus tulajdonsága pedig a $\{P_k\}$ projektorok teljességéből következik, azaz

$$\sum_i T_{i,j} = \mathrm{Tr}\left[\left(\sum_i P_i\right)\mathcal{T}[P_j]\right] = \mathrm{Tr}\left[\left(\sum_i |i\rangle\langle i|\right)\mathcal{T}[P_j]\right] = \mathrm{Tr}\,\mathcal{T}[P_j] = \mathrm{Tr}\,P_j = 1\,. \tag{II.1.16}$$

□

II.1. *Lemma.* *Bisztochasztikus csatornák esetén a II.1 tételben bevezetett T mátrix duplán sztochasztikus.*

Bizonyítás. A bizonyításhoz csak a T mátrix duplán sztochasztikus tulajdonságát kell belátnunk, melyhez használjuk, fel a trace ciklikus tulajdonságát és, hogy ebben az esetben a $\mathcal{T}^*[\cdot]$ duális csatorna is trace őrző

$$\sum_j T_{i,j} = \mathrm{Tr}\left[P_i\left(\sum_j \mathcal{T}[P_j]\right)\right] = \mathrm{Tr}\left[\mathcal{T}^*[P_i]\left(\sum_j P_j\right)\right] = \mathrm{Tr}\left[\mathcal{T}^*[P_i]\left(\sum_j |j\rangle\langle j|\right)\right] = \mathrm{Tr}\,\mathcal{T}[P_i] = 1\,. \tag{II.1.17}$$

□

Tehát a II.1 lemmából arra következtettünk, hogy $\mathcal{T}[\cdot]$ unitális csatorna esetén az átlagos első visszatérési idő egész értéket vesz fel, mely robusztus ellenállást mutat a dinamikát megadó paraméterek változtatására. Feltételezésünket, a precízebb matematikai elemzést megelőzően, a következő példával ellenőriztük.

II.1. *Példa.* *Kvantumos és klasszikus rendszerek közti folytonos átmenetet, egy az unitér dinamikára ráülő dekoherencia erősségének folytonos változtatásával hozhatunk létre*[187]*, így lehetőségünk nyílik unitális dinamikákat folytonosan vizsgálni a két határeset között. Legyen*

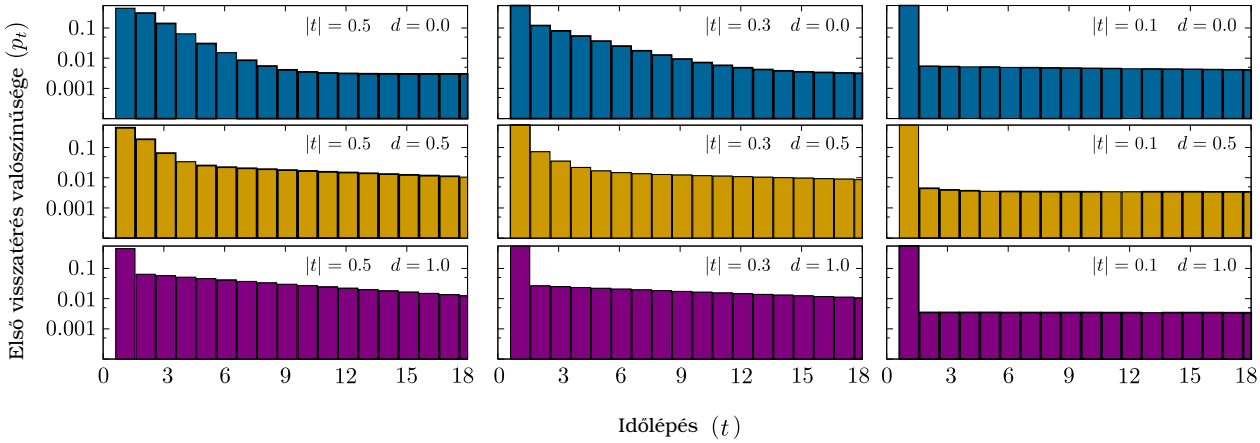
$$H = |t| \sum_{\substack{i,j=1\\ i\neq j}}^{6} |i\rangle\langle j| \tag{II.1.18}$$

a $C[\cdot]$ koherens csatornát definiáló ($U = exp(-iH)$), teljes hatpontú gráfhoz rendelt, Hamilton-operátor és a dekoherenciát okozó csatorna

$$(\mathcal{D}[\varrho])_{i,j} = \begin{cases} \varrho_{i,j} & ha\ i = j \\ (1-d)\varrho_{i,j} & ha\ i \neq j \end{cases}, \tag{II.1.19}$$

ahol $\varrho \in \mathcal{B}_6(\mathcal{H})$. A $\mathcal{T}[\cdot]$ időlépés pedig a két csatorna konkatenálásából tevődik össze, azaz

$$\mathcal{T}[\cdot] = \mathcal{D}C[\cdot]\,, \tag{II.1.20}$$



II.1.1. ábra. Különböző $|t|$ és d futási paraméterek mellett a p_t első visszatérés valószínűsége. A $d = 0$ esetben a folyamatot vezérlő $\mathcal{T}[\cdot]$ csatorna a II.1.18 Hamilton operátorral megadott $C[\cdot]$ koherens csatornának felel meg, míg $d = 1$ esetén a dinamika helyettesíthető egy homogén Markov folyamattal.

mely $d = 1$ értéke mellett klasszikus, míg $d = 0$ értéke esetén koherens időfejlődésnek felel meg. A $d \in [0, 1]$ választással a vizsgált folyamat egy unitális nyílt dinamikát ír le. Numerikus futások után, különböző $|t|$ és d értékek mellett a II.1.1 ábrán látható, merőben különböző p_t eloszlásokat kaptam. Azonban minden véges dekoherencia mellett a T_i átlagos első visszatérési idő, egy általános $|i\rangle$ állapotba, ($|t|$-től függetlenül) 6-nak, míg $d = 0$ esetén ($|t|$-től függetlenül) 2-nek adódott.

1.2.1. Kvantált átlagos első visszatérési idő iterált nyílt rendszerekben

Az irodalmi áttekintés 1.1 fejezetben megmutattam, hogy a homogén Markov láncok és az iterált nyílt kvantumrendszerek között húzható egy szoros párhuzam. Ebben a fejezetben kimondom és bebizonyítom az unitális dinamikákban talált tételünket, mely az I.7 lemma kvantumcsatornákra vett lemma általánosítása.

II.2. *Lemma.* *A II.1.3 egyenletben megadott $\mathbb{I}_\psi$ releváns Hilbert-térre vett projekció operátora és a II.1.14 egyenletben definiált $\tilde{\varrho}_{cond}$ különbsége egy pozitív szemidefinit operátor, azaz*

$$\mathbb{I}_\psi - \tilde{\rho}_{cond} \geq 0\,. \tag{II.1.21}$$

Bizonyítás. Az E függelékben bebizonyítottam, hogy $\operatorname{supp} \tilde{\varrho}_{\text{cond}} : \mathcal{H} \to \mathcal{H}_{\text{rel}}$. A II.1.21 egyenlet ekvivalens azzal, hogy $\tilde{\rho}_{\text{cond}}$ minden sajátértéke nem negatív ($\tilde{\rho}_{\text{cond}} \geq 0$), tehát a II.2 lemma bizonyításához elegendő belátni a következőt: Legyen $\sigma = \sigma^\dagger \in \mathcal{B}(\mathcal{H}_{\text{rel}})$ és $\operatorname{Tr} \sigma = 1$, ekkor

$$\operatorname{Tr}\left[\sigma \tilde{\varrho}_{\text{cond}}(t)\right] \leq 1 \tag{II.1.22}$$

egyenlet teljesül minden t időpillanatban. A II.1.22 egyenlet bizonyításához használjuk fel, hogy a $\mathcal{T}^*[\cdot]$ és $\mathcal{M}^*[\cdot] = \mathcal{M}[\cdot]$ duális csatornák segítségével a jobb oldal a következő alakra hozható

$$\operatorname{Tr}\left[\sigma \tilde{\varrho}_{\text{cond}}(t)\right] = \sum_{n=0}^{t} \operatorname{Tr}\left[\sigma (\mathcal{M}\mathcal{T})^n [|\Psi\rangle\langle\Psi|]\right] = \sum_{n=0}^{t} \langle\Psi| (\mathcal{T}^*\mathcal{M})^n [\sigma] |\Psi\rangle\,. \tag{II.1.23}$$

Az I.3 és az I.4 lemmák felhasználásából következik, hogy a $\mathcal{T}^*[\cdot]$ duális csatorna trace őrző és az $\mathcal{M}[\cdot]$ mérés nem növeli a trace-t, így az $\mathcal{M}\mathcal{T}[\cdot]$ feltételes csatorna $\mathcal{T}^*\mathcal{M}[\cdot]$ duálisa se növelheti. Tehát a II.1.23 egyenlet

jobb oldalán szereplő kifejezés 1-nél biztosan nem nagyobb. □

A II.2 lemma értelmében véges Hilbert-téren értelmezett unitális csatorna esetén $\tilde{\rho}_{\text{cond}}$ létezik, így az átlagos első visszatérési idő ilyen dinamikákban mindig véges, azaz ekkor a bolyongás (véges idő alatt) visszatérő.

II.3. *Lemma.* *Az $\mathbb{I}_\psi$ és a $\tilde{\varrho}_{cond}$ operátorok különbsége fixpontja a mérésnek, azaz*

$$\mathcal{M}[\mathbb{I}_\psi - \tilde{\varrho}_{cond}] = \mathbb{I}_\psi - \tilde{\varrho}_{cond}\,. \tag{II.1.24}$$

Bizonyítás. A $\mathcal{T}[\cdot]$ csatorna unitális tulajdonságából kifolyóan a feltételes dinamika hatása ismert a leszűkített tér egységoperátorán

$$\mathcal{M}\mathcal{T}[\mathbb{I}_\Psi] = \mathcal{M}[\mathbb{I}_\Psi] = (\mathbb{I}_\Psi - |\Psi\rangle\langle\Psi|)\mathbb{I}_\Psi(\mathbb{I}_\Psi - |\Psi\rangle\langle\Psi|)^\dagger = \mathbb{I}_\Psi - |\Psi\rangle\langle\Psi|\,. \tag{II.1.25}$$

A II.1.14 definíció segítségével pedig a feltételes dinamika a $\tilde{\varrho}_{\text{cond}}$ operátoron való hatása

$$\mathcal{M}\mathcal{T}[\tilde{\varrho}_{\text{cond}}] = \mathcal{M}\mathcal{T}\left[\sum_{t=0}^{\infty}(\mathcal{M}\mathcal{T})^t[\varrho(0)]\right] = \sum_{t=1}^{\infty}(\mathcal{M}\mathcal{T})^t[|\Psi\rangle\langle\Psi|] = \mathcal{T}[\tilde{\varrho}_{\text{cond}}] - |\Psi\rangle\langle\Psi|\,. \tag{II.1.26}$$

A II.1.25 és a II.1.26 egyenletek különbségéből és a kvantumcsatornák lineáris tulajdonságából adódik a bizonyítani kívánt II.1.24 sajátértékegyenlet. □

II.4. *Lemma.* *Az $\mathcal{M}\mathcal{T}[\cdot]$ feltételes dinamikának, csak a triviális operátor az egyensúlyi eloszlása, azaz ha $\chi = \chi^\dagger : \mathcal{H}_{rel} \to \mathcal{H}_{rel}$ pozitív szemidefinit és kielégíti a következő egyenletet*

$$\mathcal{M}\mathcal{T}[\chi] = \chi\,, \tag{II.1.27}$$

akkor $\chi = 0$.

Bizonyítás. A II.1.27 feltételből következően $\text{Tr}\,\chi = \text{Tr}\,[\mathcal{M}\mathcal{T}[\chi]]$, mely csak akkor lehetséges, ha

$$\mathcal{M}\mathcal{T}[\chi] = \mathcal{T}[\chi]\,. \tag{II.1.28}$$

A II.1.27 és a II.1.28 egyenletek következményeképpen χ a mérésnek is fixpontja, melyből az következik, hogy

$$\langle\Psi|\chi|\Psi\rangle = 0\,. \tag{II.1.29}$$

Ezek ismeretében a χ és a dinamika során érintett $\varrho(t)$ sűrűségoperátor közti átfedést

$$\text{Tr}\,[\chi\varrho(t)] = \text{Tr}\left[\chi\mathcal{T}^t[|\Psi\rangle\langle\Psi|]\right] = \langle\Psi|(\mathcal{T}^*)^t[\chi]|\Psi\rangle = \langle\Psi|\chi|\Psi\rangle = 0\,, \tag{II.1.30}$$

ahol felhasználtam, hogy az I.9 tétel következtében, ha χ a $\mathcal{T}[\cdot]$ csatorna fixpontja, akkor a $\mathcal{T}^*[\cdot]$ duális csatornának is fixpontja. Mivel a II.1.30 egyenlet minden t-re fennáll, továbbá $\varrho(t)$ sajátvektorjai kifeszítik a teljes releváns Hilbert-teret, így a $\chi : \mathcal{H}_{\text{rel}} \to \mathcal{H}_{\text{rel}}$ átfedése a $\{\rho(t)\}$ állapotokkal csak akkor lehet nulla ha $\chi = 0$. □

II.2. *Tétel.* *(Kvantált átlagos első visszatérési idő unitális iterált nyílt rendszerekben[12]) Egy kvantumos bolyongásban, ahol $\mathcal{T}[\cdot]$ unitális a releváns Hilbert-téren, az átlagos első visszatérési idő egész és megegyezik a releváns Hilbert-tér dimenziójával, azaz*

$$\mathcal{T}[\mathbb{I}_\Psi] = \mathbb{I}_\Psi \qquad \to \qquad T_\Psi = dim\ H_{rel}\,. \tag{II.1.31}$$

Bizonyítás. A II.2, II.3 és a II.4 lemmákból következően $\tilde{\varrho}_{\text{cond}} = \mathbb{I}_\Psi$, melyből a II.1.13 egyenlet felhasználásával adódik a bizonyítani kívánt tétel. □

Tehát unitális dinamikákban az átlagos első visszatérési idő a folyamatot megadó csatorna paramétereitől egyészen addig független, amíg a bolyongás során bejárt Hilbert-tér dimenziója változatlan.

1.2.2. Példák

Az előző fejezetekben nyílt rendszer esetén definiáltam az átlagos első visszatérési időt, és kimondtam unitális iterált dinamikák esetére az általunk talált II.2 tételt. Az elkövetkező fejezetekben két analitikus példán megmutatom a releváns Hilbert-tér szemléletes jelentését, majd ezt követően néhány példán keresztül illusztrálom a tételünk erősségét. Azonban mielőtt rátérnék a példák tárgyalására, röviden összegzem az ott használt numerikus módszert.

A II.1.13 egyenlet közvetlen kiértékelése numerikusan nagyon költséges, azonban az I.4 és az I.5 példákban bemutatott trükkhöz hasonló számolás segítségével jelentősen lecsökkenthetjük a futási időt. Ehhez határozzuk meg a d dimenziós Hilbert-téren értelmezett $\mathcal{MT}[\cdot]$ feltételes dinamika d^2 darab $\mathbf{X}^{(i)}$ sajátvektorját és a hozzájuk tartozó λ_i sajátértékei

$$\mathcal{MT}[\mathbf{X}^{(i)}] = \lambda_i \mathbf{X}^{(i)} \,. \tag{II.1.32}$$

Ezt követően határozzuk meg a kezdőállapot

$$|\Psi\rangle\langle\Psi| = \sum_{i=1}^{d^2} c_i \mathbf{X}^{(i)} \tag{II.1.33}$$

felbontását, ahol $c_i \in \mathbb{C}$ kifejtési együtthatók. A kifejtésnek köszönhetően a kezdőállapot időfejlődése egyszerű hatványozásba megy át

$$\varrho_{\text{cond}}(t) = (\mathcal{MT})^t[|\Psi\rangle\langle\Psi|] = \sum_i c_i \lambda_i^t \mathbf{X}^{(i)} \,, \tag{II.1.34}$$

melyből az átlagos első visszatérési idő

$$T_\Psi = \text{Tr} \sum_{t=0}^{\infty} \varrho_{\text{cond}}(t) = \sum_{t=0}^{\infty} \sum_i c_i \lambda_i^t \text{Tr}\, \mathbf{X}^{(i)} = \sum_i c_i \text{Tr}\, \mathbf{X}^{(i)} \sum_{t=0}^{\infty} \lambda_i^t = \sum_{i=1}^{d^2} \frac{c_i}{1-\lambda_i} \text{Tr}\, \mathbf{X}^{(i)} \,. \tag{II.1.35}$$

Fontos megjegyezni, hogy az előbb ismertetett módszer a lehetséges csatornák egy nullmértékű osztályától eltekintve mindig alkalmazható, melyre a futások során ügyeltem.

Releváns Hilbert-tér bemutatása különböző analitikus példákon

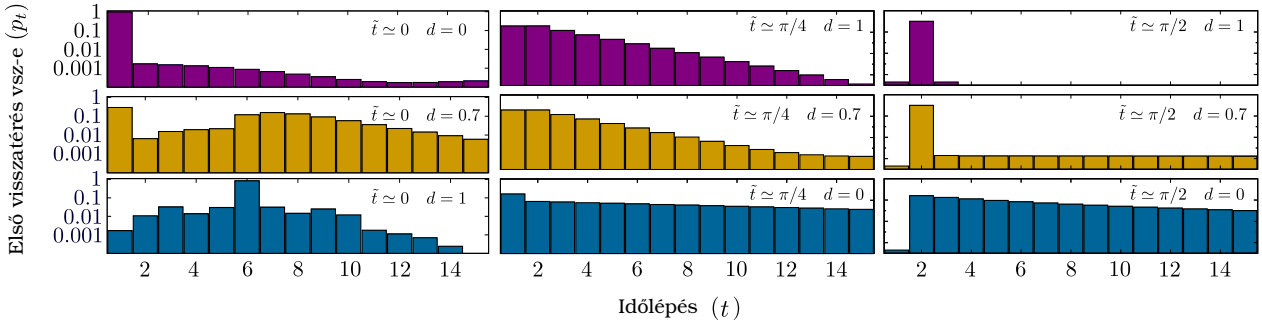
Az általunk kimondott II.2 tétel szerint unitális bolyongások esetén az átlagos első visszatérési idő megegyezik a II.1.3 releváns Hilbert-tér méretével, akárcsak klasszikus esetben, ahol duplán sztochasztikus dinamikákban a kezdőállapothoz rendelt irreducibilis tartomány méretével volt egyenlő. Ebben a fejezetben két analitikus példán demonstrálom, hogy a $\dim\mathcal{H}_{\text{rel}}$ a két határesetben jelentősen eltérhet.

II.2. ***Példa.*** *Határozzuk meg az*

$$H = \sum_{j=1}^{M-1} t_j |j\rangle\langle 0| + H.c. \qquad U = e^{-iH} \tag{II.1.36}$$

M pontú csillaggráfban a $|0\rangle$ állapotba való átlagos első visszatérés értékét, különböző d dekoherencia értékek mellett, azaz a teljes időlépést

$$\mathcal{T}[\cdot] = \mathcal{D}[U \cdot U^\dagger] \,, \tag{II.1.37}$$



II.1.2. ábra. Az első visszatérés valószínűségeloszlásai az $M = 6$ rácspontot tartalmazó csillaggráfban, melyek a $\tilde{t}$ átmeneti amplitúdó változtatásával különbözőképpen viselkednek. Véges dekoherencia esetén $T_0 = 6$, míg a $d = 0$ speciális esetben $T_0 = 2$.

a kvantumcsatorna adja, ahol $\mathcal{D}[\cdot]$-t a

$$K_j = \begin{cases} \sqrt{d}\,|j\rangle\langle j| & ha\ j \in \{0, 1, \ldots, M-1\} \\ \sqrt{1-d}\,\mathbb{I}_M & ha\ j = M \end{cases} \tag{II.1.38}$$

Kruas-operátorok definiálják és a hatása megegyezik a II.1.19 egyenlettel. A $d = 0$ dekoherencia mentes esetben egy bázistranszformációval a folyamatot vezérlő II.1.36 Hamilton-operátor a következő alakra hozható

$$H = \tilde{t}\,|t\rangle\langle 0| + H.c.\,, \tag{II.1.39}$$

ahol

$$\tilde{t} = \left(\sum_{j=1}^{M-1} |t_j|^2\right)^{1/2} \quad és \quad |t\rangle = \tilde{t}^{-1} \sum_{j=1}^{M-1} t_j\,|j\rangle\ . \tag{II.1.40}$$

Mivel a II.1.39 Hamilton operátor

$$|\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle \pm |1\rangle) \tag{II.1.41}$$

két sajátállapota együtt teljesen átfed a $|0\rangle$ állapottal, azaz $|\langle 0|+\rangle| + |\langle 0|-\rangle| = 1$, így ebben az esetben a bejárt altér 2 dimenziós, vagyis $T_0 = 2$. A $d \neq 0$ esetben a II.1.39 Hamilton operátor

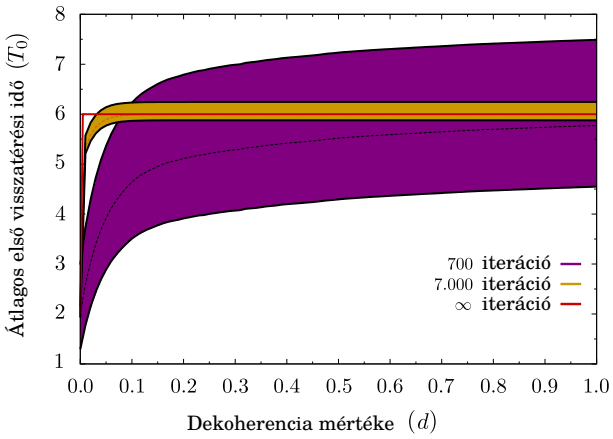
$$\left|v_j\right\rangle = \sum_{l=1}^{M-1} \frac{e^{ijl2\pi/M}}{t_l^*}\,|l\rangle \tag{II.1.42}$$

sajátállapotai már nem lesznek "dark-state"-ek, azaz a $|0\rangle$ kezdőállapottal való átfedésükkel elérhetővé válnak, tehát ebben az esetben $T_0 = M$.

A $d = 0$ analitikus vizsgálatából látható, hogy a p_t első visszatérés valószínűsége érzékeny a $\{t_i\}$ hopping amplitúdókból előállított $\tilde{t}$ mennyiségre. A II.1.2 ábrán található eloszlások az I.14 példa segítségével megérthetőek, hiszen a $d = 0$ esetben a bolyongás helyettesíthető, egy szimmetrikus klasszikus bolyongással, mely átmeneti mátrixa a következő

$$W = \begin{bmatrix} \cos^2\tilde{t} & \sin^2\tilde{t} \\ \sin^2\tilde{t} & \cos^2\tilde{t} \end{bmatrix}. \tag{II.1.43}$$

Tehát $\tilde{t} \simeq 0$ értéke mellett $W \simeq \mathbb{I}$, míg $\tilde{t} \simeq \pi/2$ esetén $W \simeq |t\rangle\langle 0| + |0\rangle\langle t|$, így a $\tilde{t} \simeq 0$ esetben a bolyongó majdnem minden esetben helyben marad, míg $\tilde{t} \simeq \pi/2$-re a két állapot közti majdnem folyamatos ide-oda pattogást végez.



II.1.3. ábra. A T_N részleges átlagos első visszatérési idő az $M = 6$ rácspontot tartalmazó csillaggráf $|0\rangle$ kezdőállapotba $N = 700$ (magenta) és $N = 7000$ (sárga) lépésig, valamint a II.1.35 egyenletből adódó egzakt eredmény (piros). A színessel jelölt tartomány 2000 különböző darab, véletlen $\{t_i\}$ hoppingokkal generált, dinamikák szórásából adódó szimmetrikus eltérés, azaz becsülten, 65% valószínűséggel a $\lim T_N$ a jelölt tartomány belül lesz.

A dekoherencia az átlagos első visszatérési értékre gyakorolt szerepének numerikus vizsgálatához ábrázoltam (II.1.3 ábra), a függelék F.5 egyenletében definiált, T_N véges felösszegzést különböző N-re, a G függelékben szereplő, véletlen módon választott $\{t_i\}$ hopping amplitúdókkal generált sokaságban.

II.3. *Példa.* *Határozzuk meg a II.1 példában definiált bolyongás átlagos első visszatérési idejét a $d = 1$ klasszikus és $d = 0$ koherens limeszben. A $d = 1$ esetben a bolyongás helyettesíthető egy speciális, szimmetrikus klasszikus bolyongással. Általános $M > 2$ gráfméret esetén a bolyongás átmeneti mátrixának diagonális elemi azonosan*

$$W_{i,i} = \frac{M^2+1}{M^2} + \frac{2(M-1)}{M^2}\left(\cos(t)\cos((M-1)t) - \sin(t)\sin((M-1)t)\right) , \tag{II.1.44}$$

továbbá az összes offdiagonális eleme is megegyezik

$$W_{i,j} = \frac{1 - W_{i,i}}{M-1} . \tag{II.1.45}$$

Így az átmeneti mátrix a $M = 6$ és $t = 0.5$ értékek mellett

$$W \simeq 0.447 \cdot \mathbb{I}_6 + 0.111 \sum_{i \neq j} |i\rangle\langle j| . \tag{II.1.46}$$

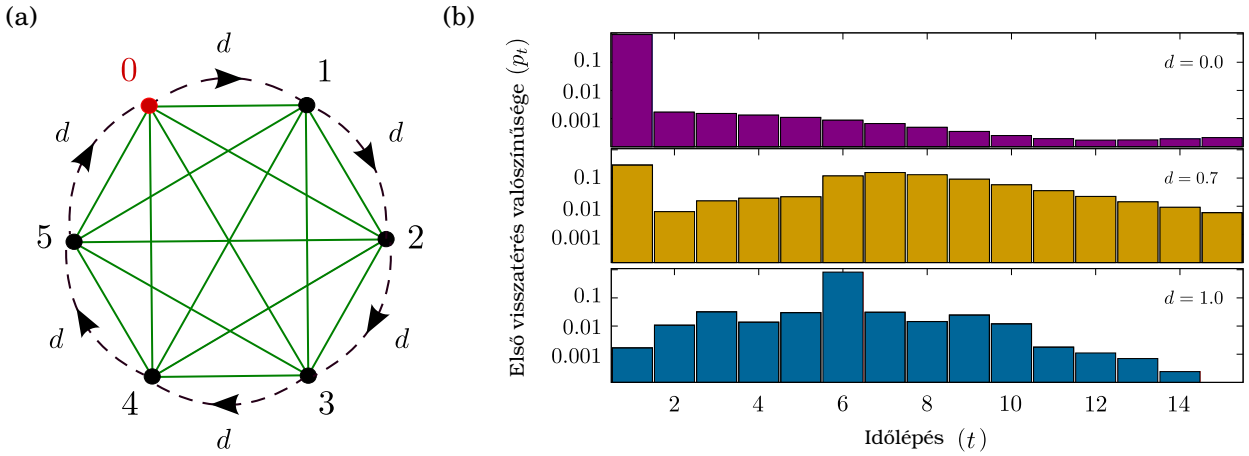
Mivel a bolyongás duplán sztochasztikus (sőt szimmetrikus) és valóban egy 6 rácspontú gráfot jár be, így az átlagos első visszatérési idő ebben az esetben hatnak adódik. Míg a $d = 0$ koherens időfejlődés esetén a bolyongást leképezhető egy

$$H_{red} = \begin{bmatrix} 0 & \sqrt{6-1} \\ \sqrt{6-1} & 6-2 \end{bmatrix} \tag{II.1.47}$$

Hamilton-operátor segítségével egy kétdimenziós altérre[188], tehát ebben az esetben az átlagos első visszatérési idő kettő lesz. Pozitív d esetén az előző leképzés nem tehető meg, így az ott a bejárt tér valóban 6 dimenziós marad.

Szimmetria törő, de nem unitalitás sértő dinamika vizsgálata teljes gráfon

Az I.1.12 példa azt demonstrálta, hogy a duplán sztochasztikus mátrixok nem csak szimmetrikus bolyongásokat írhatnak le. Ebben a fejezetben aszimmetrikus populációátvitel segítségével bemutatok egy unitális kvantumcsatornát, mely által leírt bolyongás semmilyen értelemben sem tekinthető szimmetrikusnak.



II.1.4. ábra. Az első visszatérés valószínűségeloszlása egy $M = 6$ rácspontú teljes gráfban, ahol a dinamikában egy unitér időlépést egy aszimmetrikus populációtranszfer követ (lsd. (a) ábra). A bolyongás unitér időfejlődését egy $U = e^{-iH}$ operátor definiálja, ahol H egy véletlen hermitikus mátrix, mely minden $t_{i,j}$ elemének az abszolútértéke 0.1-nél kisebb. Habár a (b) ábrán látható p_t valószínűségi eloszlások jelentősen eltérnek, mégis a hozzájuk tartozó $T_0 = \sum t p_t$ átlagos első visszatérési idők megegyeznek ($T_0 = 6$).

II.4. *Példa.* *Határozzuk meg*

$$\mathcal{T}[\cdot] = \sum_{j=0}^{M} K_j U \cdot (K_j U)^\dagger \,, \tag{II.1.48}$$

ahol

$$K_j = \begin{cases} \sqrt{d}\,|j\rangle\langle j+1| & ha\ j \in \{0, 1, \ldots, M-2\}\,, \\ \sqrt{d}\,|M-1\rangle\langle 0| & ha\ j = M-1 \\ \sqrt{1-d}\,\mathbb{I}_M & ha\ j = M \end{cases} \tag{II.1.49}$$

időfejlődésben az átlagos első visszatérési időt a $|0\rangle$ állapotba. A II.1.48 egyenlettel leírt folyamatban minden unitér lépés után alkalmazunk egy aszimmetrikus populációtranszfert, mely a II.1.4.a ábrán illusztrált módón, egy kör mentén hajtja a bolyongót, ezzel sértve a bolyongás szimmetrikusságát. Azonban, mivel a $\{K_j\}$ operátorok is eleget tesznek a bisztochasztikusság I.1.63 és I.1.58 feltételeinek, azaz

$$\sum_{j=0}^{M} K_j^\dagger K_j = \mathbb{I}_M = \sum_{j=0}^{M} K_j K_j^\dagger \,, \tag{II.1.50}$$

így a teljes $\mathcal{T}[\cdot]$ időlépés is bisztochasztikus, tehát $T_0 = M$.

A populációtranszfer hatásának vizsgálatához válasszuk az U unitér operátort az $\mathbb{I}_M$ egység közelinek. A II.1.4.b ábrán az $U = e^{-iH}$ választással éltem, ahol H a teljes hatpontú gráfhoz tartozó Hamilton-operátor, mely $t_{i,j}$ átmeneti amplitúdóit a G függelékben megadott módón, egyenletesen választottam a 0.1 sugarú egységkörön. Az unitér operátor ilyen értékei esetén a koherens időfejlődés alig lépteti a bolyongót, így $d \simeq 0$ esetén $p_1 \simeq 1$, míg $d \simeq 1$ esetén $p_6 \simeq 1$. Mivel mindkét esetben a visszatérési idő $T_0 = M$, így a $d \simeq 0$ esetben a p_t egy lassan lecsengő, hatvány farkú eloszlás, szemben a $d \simeq 1$ esettel, ahol exponenciálisan eltűnik.

Egyetlen populációtranszferrel sértet unitális dinamika teljes gráfon

Az eddig áttekintett példákban megmutattam, hogy ha a $\mathcal{T}[\cdot]$ csatorna unitális, akkor a II.2 értelmében a rendszerben definiált átlagos első visszatérési idő egésznek adódik, a csatornában szereplő paraméterek tág tartományában. Most, egyetlen populációtranszfer segítségével, azt mutatom meg, hogy hogyan viselkedik az átlagos első visszatérési idő, ha a $\mathcal{T}[\cdot]$ csatorna fokozatosan elveszti az unitális tulajdonságát.

II.5. *Példa.* *Határozzuk meg a*

$$\mathcal{T}^{(j)}[\cdot] = \sum_{l=0,1} K_l^{(j)} U \cdot (K_l^{(j)} U)^\dagger \tag{II.1.51}$$

ahol

$$K_l^{(j)} = \begin{cases} \sqrt{d_j}\,|(j-1) mod M\rangle\langle j| & ha\ l = 0 \\ \mathbb{I}_M + (\sqrt{1-d_j} - 1)\,|j\rangle\langle j| & ha\ l = 1 \end{cases} \tag{II.1.52}$$

időfejlődésben az átlagos első visszatérési időt a $|0\rangle$ állapotba. A II.1.51 egyenlettel definiált időlépésben minden unitér lépés után alkalmazunk egy populációtranszfert, mely a d ráta függvényében átviszi a bolyongót a $|j\rangle$ állapotból a $|j-1\rangle$ állapotba, mellyel sérül a bolyongás unitalis tulajdonsága, azaz

$$\sum_{j=0}^{M} K_j^\dagger K_j = \mathbb{I}_M\,, \tag{II.1.53}$$

míg $d > 0$ esetén

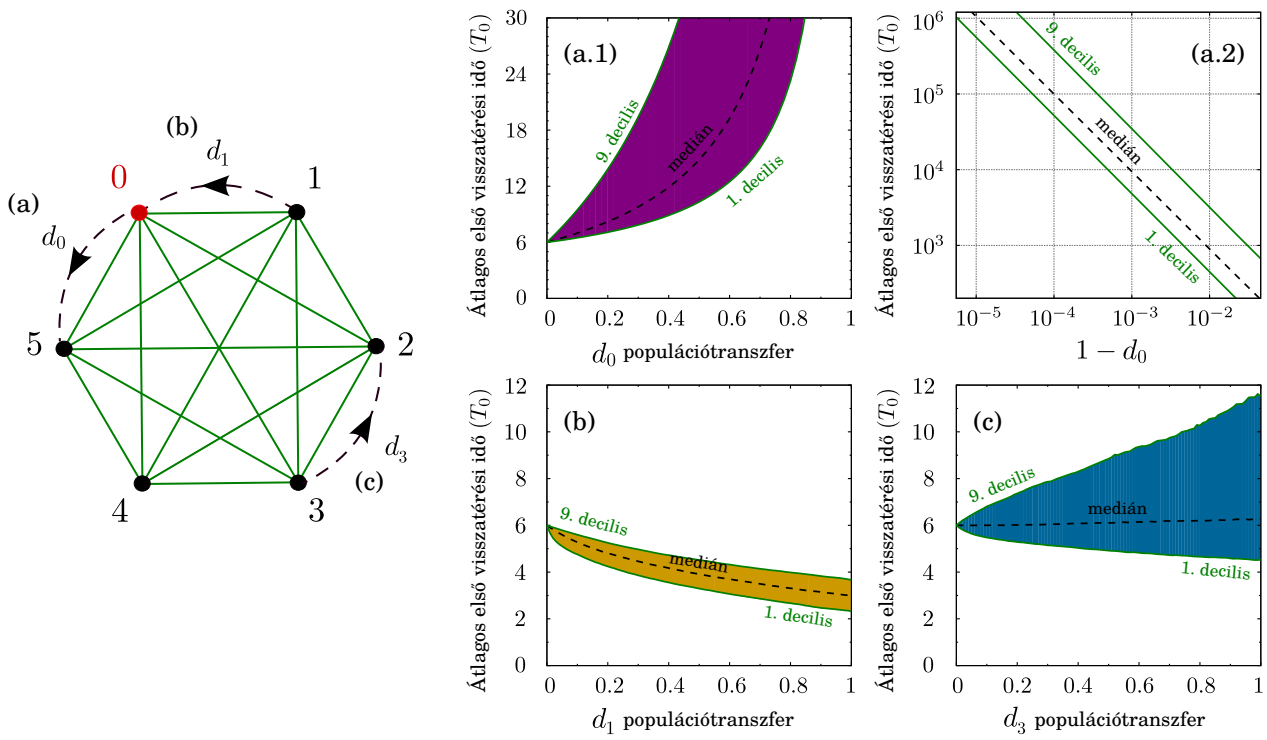
$$\sum_{j=0}^{M} K_j K_j^\dagger \neq \mathbb{I}_M\,, \tag{II.1.54}$$

így $d \neq 0$ értéke mellett már nem biztosított, hogy a T_0 az összefüggő tartomány méretével egyezzen meg.

A populációtranszfer hatásának vizsgálatához válasszunk egy $M = 6$ rácspontú teljes gráfot, melyre a II.1.5 ábra jobb oldalán található a,b,c különböző transzportfolyamatokat teszünk. Az átlagos első visszatérési idő erős d függést mutatott, mely megállapításához, 2000 különböző unitér dinamika mellett meghatároztam az értékét. Az U operátorokat az $M = 6$ dimenziós unitér operátorok halmazából egyenletesen mintavételeztem[189], majd ezt követően, d különböző értékei mellett kiszámoltam a futásokból adódó átlagos első visszatérési idők alkotta statisztikák mediánját, alsó és felső deciliseit.

Az unitalitás fokozatos megsértésével, várakozásunknak megfelelően, a II.1.5 ábra jobb oldalán látható kiszélesedést mutatták a statisztikák. Továbbá jól megfigyelhető, hogy a populációtranszfer irányától függően az átlagos első visszatérési idő nőhet és csökkenhet is. A $j = 0$ esetben a populációtranszfer a visszatérés ellen dolgozik, mely végső soron az átlagos első visszatérési idő $T \propto 1/(d-1)$ divergenciáját okozza (lsd. II.1.5.a.2 ábra). A $j = 1$ esetben a visszatérés felgyorsul és a $d = 1$ limeszben az átlagos első visszatérési időkből készített statisztika mediánja az $M/2 = 3$-hoz tart, mely egybevág az intuitív képünkkel, hiszen ekkor az M lehetséges rácspont közül az unitér dinamika végén a bolyongó $|0\rangle$ és a $|1\rangle$ állapotokban levését visszatéréssel azonosítjuk. Végezetül, a $j = 3$ indifferens populációtranszfer esetén a II.1.5.c ábrán látható, hogy a statisztika mediánja érzéketlen a d ráta értékére, a statisztika kiszélesedése pedig az unitalitás sértésnek köszönhető.

A II.5 példában látható, hogy nem unitális csatornákban is felvehet az átlagos első visszatérési idő egész értéket. Azonban, feltehetően a példában szereplő ilyen esetek a bolyongás paramétereinek véletlen finomhangolásából erednek, azaz a kialakult kvantáltság nem robusztus a paraméterek változtatására. Mégis fontos



II.1.5. ábra. A T_0 átlagos első visszatérési idő egy $M = 6$ pontú teljes gráfon, ahol minden unitér időlépést különböző populációátvitel követi. Az egyes inkoherens folyamatok elrontják a csatorna unitalitását, így a T_0 több lehetséges értéket vehet fel, a kiszélesedések tipikus értékeit a besatírozott tartományok jelölik.

megjegyezni, hogy még klasszikus esetben is lehet találni, a duplán sztochasztikus folyamatokon túl, a bolyongásoknak egy olyan osztályát, ahol széles tartományon belül egész az átlagos első visszatérési idő (lsd. következő példa).

II.6. *Példa.* *Határozzuk, meg a*

$$W = \frac{1}{M}\begin{bmatrix} 0 & 1 & 1 & \dots & 1 & 1 \\ w_1 & w_2 & w_3 & \dots & w_{M-1} & w_M \end{bmatrix} \tag{II.1.55}$$

M dimenziós átmeneti mátrixszal definiált klasszikus bolyongásban az átlagos első visszatérési időt az 1 állapotba, ahol a $\{w_i\}$ vektorok $M-1$ darab komponense tetszőleges, míg W kielégíti az I.1.11 sztochasztikus tulajdonságot. Ha a bolyongás reguláris, akkor a π egyensúlyi eloszlás meghatározható a W mátrix hatványozásával. Tehát, ekkor az átlagos első visszatérési idő megállapításához elegendő a

$$\Pi_{1,1} = \lim_{t\to\infty}(W^t)_{1,1} \tag{II.1.56}$$

komponenst meghatározni. Némi vizsgálódás után belátható, hogy

$$(W^t)_{1,1} = (W^{t-1})_{1,2}\,, \tag{II.1.57a}$$

$$(W^t)_{1,2} = \frac{1}{M-1}\left[(W^{t-2})_{1,1} + (M-2)(W^{t-1})_{1,2}\right], \tag{II.1.57b}$$

így a következő rekurzív egyenletet kell megoldanunk

$$a_t = \frac{1}{M-1}\left[a_{t-2} + (M-2)a_{t-1}\right], \tag{II.1.58}$$

ahol $a_0 = 0$ és $a_1 = 1/(M-1)$. A II.1.58 egyenlet a polinom módszer segítségével megoldható, ehhez helyettesítsük az a_t-t az x^t-nel, azaz

$$x^2 = \frac{1}{M-1}\left[1 + (M-2)x\right]$$
$$x_1 = 1 \quad \text{és} \quad x_2 = \frac{1}{1-M}\,, \tag{II.1.59}$$

melyből

$$a_t = c_1 1^t + c_2 \left(\frac{1}{1-N}\right)^t . \tag{II.1.60}$$

A kezdeti értékekből meghatározhatjuk a $\{c_i\}$ konstansok értékét: $a_0 = 0 \to c_1 = -c_2$ és $a_1 = 1/(M-1) \to c_1 = 1/M$. Így alkalmazhatjuk az I.6 Kac lemmát, melyből az átlagos visszatérési idő a következőnek adódik

$$T_1 = \frac{1}{\Pi_{1,1}} = \lim_{t\to\infty}\left[\frac{1}{M} - \frac{1}{M}\left(\frac{1}{1-M}\right)^t\right]^{-1} = M\,. \tag{II.1.61}$$

A kapott eredmény a következő szemléletes jelentést hordozza: az adott folyamatra tekinthetünk úgy, mint egy kétpontú gráfon (ahova nézzük a visszatérést és a rendszer többi része) vett

$$W_{red} = \begin{bmatrix} 0 & (M-1)^{-1} \\ 1 & \frac{M-2}{M-1} \end{bmatrix} \tag{II.1.62}$$

átmeneti mátrixszal megadott bolyongás, azaz a bolyongó egy lépés alatt elhagyja a kezdeti pontot, majd átlagosan $M-1$ lépés után visszajön. A II.1.62 mátrix hatványozásából a

$$\Pi_{red} = \lim_{t\to\infty} W_{red}^t = \begin{bmatrix} \frac{1}{M} & \frac{1}{M} \\ \frac{1}{M-1} & \frac{1}{M-1} \end{bmatrix} \tag{II.1.63}$$

egyensúlyi eloszlást kapjuk, mely az előzővel megegyező átlagos első visszatérési értéket adja.

1.3. A csatorna fixpontja és az átlagos első visszatérési idő kapcsolata

Vegyük észre, hogy a duplán sztochasztikus rendszerekre vonatkozó I.7 lemma az I.6 Kac lemma egy speciális esete. Így, a homogén Markov láncok és az iterált nyílt kvantumrendszerek között húzható analógiából, felmerült bennünk annak az igénye, hogy találjunk az unitális dinamikákhoz rendelt II.2 tételnél tágabb, a I.6 Kac lemmának a kvantumcsatornázónkra vonatkozó megfelelőjét. Ebben a fejezetben kimondom és bebizonyítom a kvantumcsatornák egy széles osztályára talált tételünket, melyben rámutatunk az egyensúlyi eloszlás és az átlagos első visszatérési idő közti kapcsolatra, továbbá egy konkrét példán át érzékeltetem a tételünk transzportfolyamatokban való alkalmazhatóságát.

1.3.1. Általánosított Kac lemma

Ebben a fejezetben megmutatom, hogy a bolyongások bizonyos eseteiben a T_Ψ átlagos első visszatérési idő meghatározható a kezdeti $\varrho(0) = |\Psi\rangle\langle\Psi|$ állapot a $\mathcal{T}[\cdot]$ csatorna

$$\chi = \lim_{T\to\infty}\frac{1}{T}\sum_{t=0}^{T-1}\mathcal{T}^t[|\Psi\rangle\langle\Psi|] \tag{II.1.64}$$

fixpontjával vett várhatóértékének a reciprokaként.

II.5. *Lemma.* *Ha $|\Psi\rangle$ sajátállapota a II.1.64 egyenlettel definiált χ egyensúlyi eloszlásnak, $\lambda \neq 0$ sajátértékkel, akkor a $|\Psi\rangle$-hez tartozó $\tilde{\varrho}_{cond}$ a χ egyensúlyi eloszlás $1/\langle\Psi|\chi|\Psi\rangle$-szorosa, azaz*

$$\chi|\Psi\rangle = \lambda|\Psi\rangle \qquad \Rightarrow \qquad \tilde{\varrho}_{cond} = \frac{1}{\langle\Psi|\chi|\Psi\rangle}\chi \tag{II.1.65}$$

Bizonyítás. Ha $|\Psi\rangle$ sajátállapota a $\chi = \chi^\dagger$ egyensúlyi eloszlásnak λ sajátértékkel, akkor χ a következő alakba írható

$$\chi = \lambda|\Psi\rangle\langle\Psi| + \chi_\perp\,, \tag{II.1.66}$$

ahol $\chi_\perp : \mathcal{H} \to \mathcal{H}_\perp$ és $\mathcal{H}_\perp$ az E függelékben megadott $|\Psi\rangle$-re merőleges Hilbert-tér. A χ I.1.74 fixponttulajdonságából következően

$$\chi_\perp = \lambda\mathcal{MT}[\varrho(0)] + \mathcal{MT}[\chi_\perp]\,. \tag{II.1.67}$$

Az előző egyenlet a II.1.14 egyenletbe való behelyettesítéséből

$$\begin{aligned}\tilde{\varrho}_{\text{cond}} &= |\Psi\rangle\langle\Psi| + \lim_{T\to\infty}\sum_{t=0}^{T}(\mathcal{MT})^t\left[\frac{1}{\lambda}(\chi_\perp - \mathcal{MT}[\chi_\perp])\right] = |\Psi\rangle\langle\Psi| + \frac{1}{\lambda}\left(\lim_{T\to\infty}\sum_{t=0}^{T}(\mathcal{MT})^t[\chi_\perp] - \right.\\ &- \left.\sum_{t=1}^{T+1}(\mathcal{MT})^t[\chi_\perp]\right) = |\Psi\rangle\langle\Psi| + \frac{1}{\lambda}\chi_\perp - \lim_{T\to\infty}(\mathcal{MT})^T[\chi_\perp] = \\ &= \frac{1}{\langle\Psi|\chi|\Psi\rangle}\chi - \lim_{T\to\infty}(\mathcal{MT})^T[\chi_\perp]\end{aligned} \tag{II.1.68}$$

adódik. Mivel $\lambda \neq 0$, így a II.5 lemma bizonyításához már csak a

$$\lim_{T\to\infty}(\mathcal{MT})^T[\chi_\perp] = 0 \tag{II.1.69}$$

egyenlőség igazolása van hátra. A $\chi_\perp = \mathcal{MT}[\chi] = \mathcal{M}[\chi]$ feltételes sűrűségoperátor II.1.64 konstrukciójából könnyen látható, hogy $\chi_\perp \in \mathcal{H}_{\text{rel}}$. Továbbá a véges d dimenziós $\mathcal{H}$ Hilbert-téren ható $\mathcal{T}[\cdot]$ csatorna szuperoperátoros alakjából fakadóan a releváns Hilbert-tér felfogható úgy, mint egy a $|\Psi\rangle$ kezdeti állapothoz és a $\mathcal{T}[\cdot]$ csatornához rendelt (végtelenedig) véges dimenziós Krylov-altér, melyet az orbit első d állapota már kifeszíti[190], azaz minden $\sigma \in \mathcal{B}(\mathcal{H}_{\text{rel}})$ felírható az első d darab $\varrho_{\text{cond}}(n)$ feltételes sűrűségoperátor lineáris kombinációjaként, mely esetünkben biztosítja, hogy

$$\chi_\perp = \sum_{n=0}^{d-1} c_n(\mathcal{MT})^n[|\Psi\rangle\langle\Psi|] \tag{II.1.70}$$

alakban írható, ahol $c_n \in \mathbb{C}$. A $\chi_\perp$ II.1.70 alakját vissza írva a II.1.69 egyenletbe a következőt adja:

$$\lim_{T\to\infty}(\mathcal{MT})^T[\chi_\perp] = \lim_{T\to\infty}(\mathcal{MT})^T\left[\sum_{n=0}^{d-1}c_n(\mathcal{MT})^n[|\Psi\rangle\langle\Psi|]\right] = \sum_{n=0}^{d-1}c_n\lim_{T\to\infty}(\mathcal{MT})^{T+n}[|\Psi\rangle\langle\Psi|] = 0, \tag{II.1.71}$$

ahol a releváns Hilbert-tér végességét felhasználva felcserélhettük a limeszt és a szummát, majd a H függelékben bemutatott számolás segítségével vettük a kifejezés határértékét. Tehát a II.1.71 egyenlettel zárva bebizonyítottuk a kívánt állítást.□

II.6. *Lemma.* *Ha a II.1.14 egyenlettel definiált $\tilde{\varrho}_{cond}$ arányos a $\mathcal{T}[\cdot]$ kvantumcsatorna a II.1.64 egyenlettel megadott χ egyensúlyi eloszlásával, akkor az $\mathcal{MT}[\cdot]$ feltételes dinamika során (megfigyelt) $|\Psi\rangle$ kezdeti állapot sajátállapota a χ egyensúlyi eloszlásnak λ sajátértékkel, azaz*

$$\chi \propto \tilde{\varrho}_{cond} \qquad \Rightarrow \qquad \chi|\Psi\rangle = \lambda|\Psi\rangle \tag{II.1.72}$$

Bizonyítás. A lemma közvetlenül következik a II.1.14 egyenlet

$$\tilde{\varrho}_{\text{cond}} = |\Psi\rangle\langle\Psi| + \lim_{t\to\infty}\sum_{t=1}^{T}(\mathcal{M}\mathcal{T})^t[|\Psi\rangle\langle\Psi|] \tag{II.1.73}$$

alakjából, hiszen a feltételes dinamika az E függelékben megadott $|\Psi\rangle$-re merőleges $\mathcal{H}_\perp$ Hilbert-térre képez, azaz $(\tilde{\varrho}_{\text{cond}} - |\Psi\rangle\langle\Psi|)|\Psi\rangle = 0$, melyből adódóan $\tilde{\varrho}_{\text{cond}}|\Psi\rangle = |\Psi\rangle$. Tehát a λ sajátérték a χ és a $\tilde{\varrho}_{\text{cond}}$ közti arányossági tényező. □

II.3. *Tétel.* *(Kvantum Kac (qKac) tétel[13]) Ha a $|\Psi\rangle$ kezdeti állapot $\lambda \neq 0$ sajátértékkel sajátállapota a II.1.64 egyenlettel definiált χ egyensúlyi eloszlásnak, azaz*

$$\chi|\Psi\rangle = \lambda|\Psi\rangle\ , \tag{II.1.74}$$

akkor a $|\Psi\rangle$ állapotba átlagosan

$$T_\Psi = \frac{1}{Tr\,[\varrho(0)\chi]} = \frac{1}{\langle\Psi|\chi|\Psi\rangle} \tag{II.1.75}$$

idő múlva térünk először vissza.

Bizonyítás. A II.6 lemmából következik, hogy a II.5 lemma megfordítása is igaz, azaz

$$\chi|\Psi\rangle = \lambda|\Psi\rangle \qquad \Leftrightarrow \qquad \tilde{\varrho}_{\text{cond}} = \frac{1}{\langle\Psi|\chi|\Psi\rangle}\chi, \tag{II.1.76}$$

melyből az átlagos első visszatérési idő II.1.13 definíciójából következik a tétel bizonyítása. □

Vegyük észre, hogy a II.1.74 feltétel teljesül az unitális (így unitér) csatornák esetén is, ahol $\chi \propto \mathbb{I}$. Továbbá a II.3 qKac tétel joggal mondható a I.6 Kac lemma kvantumfolyamatokra vett általánosításának, hiszen klasszikus folyamatok esetén az egyensúlyi eloszlás diagonális, így a II.1.75 egyenlet az eredeti Kac tételben szereplő I.1.92 egyenletet adja vissza, valamint akárcsak a Kac tételben, a qKac tételben is a átlagos első visszatérési idő a kezdeti $\varrho(0) = |\Psi\rangle\langle\Psi|$ állapot a folyamat egyensúlyi eloszlásában vett várhatóértékének a reciprokja.

1.3.2. Példák

A II.3 qKac tétel segítségével a II.1.74 feltétételnek eleget tevő $\mathcal{T}[\cdot]$ dinamikákban az $|\Psi\rangle$ állapotba való II.1.9 átlagos első visszatérési idő meghatározhatóvá vált az II.1.64 egyensúlyi eloszlás ismeretében. Ebben a fejezetben egy analitikus példán alkalmazom az általunk talált qKac tételt, majd ezt követően megmutatom, hogy tetszőleges kvantumrendszer transzportidejének meghatározásának a problémája átfogalmazható a II.1.74 feltételt kielégítő rendszer visszatérési idejének vizsgálatára, és végezetül egy példa segítségével kitekintést adok a χ és a T_Ψ közt található további kapcsolatra.

II.7. *Példa.* *Határozzuk meg a*

$$\mathcal{T}[\varrho] = \sum_{i,j} B_i A_j U \varrho (B_i A_j U)^\dagger\ . \tag{II.1.77}$$

dinamikában a $|0\rangle$ állapotba való átlagos első visszatérési időt, ahol a csatornát definiáló Kraus-operátorok a következőek

$$U = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \tag{II.1.78a}$$

és

$$A_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{1-p} \end{pmatrix}, \quad A_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \sqrt{p} \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \tag{II.1.78b}$$

$$B_0 = \begin{pmatrix} \sqrt{1-q} & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad B_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ \sqrt{q} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \tag{II.1.78c}$$

Tehát U az $|1\rangle$ és $|2\rangle$ állapotok között egy Hadamard-érme segítségével keverést végez, míg az A_j (B_i) mátrixok p (q) valószínűséggel létrehozzák a $|2\rangle \to |0\rangle$ ($|0\rangle \to |1\rangle$) átmenetet. Felhasználva, hogy a

$$\chi = \mathcal{T}[\chi] = \begin{bmatrix} \chi_{00} & 0 & 0 \\ 0 & \chi_{11} & \chi_{12} \\ 0 & \chi_{21} & \chi_{22} \end{bmatrix} \tag{II.1.79}$$

elemei valósak és $\chi_{1,2} = \chi_{2,1}$, megoldhatjuk az I.1.74 fixpont egyenlet, melyből a χ mátrixelemeire a kifejezést kapjuk:

$$\chi_{00} = \frac{\sqrt{1-q}\left(1-\sqrt{1-p}\right)p^{3/2}}{\sqrt{1-q}\left(1-\sqrt{1-p}\right)p^{3/2} + 2q\left(1+p\sqrt{1-p}-\sqrt{1-p}\right)}, \tag{II.1.80}$$

$$\chi_{11} = \frac{q\left[1+\left(1+\sqrt{1-p}\right)p-\sqrt{1-p}\right]}{2q\left(1+p\sqrt{1-p}-\sqrt{1-p}\right)+\sqrt{1-q}\left(1-\sqrt{1-p}\right)p^{3/2}}, \tag{II.1.81}$$

$$\chi_{12} = \frac{pq\sqrt{1-p}}{\sqrt{1-q}\left(1-\sqrt{1-p}\right)p^{3/2} + 2q\left(1+p\sqrt{1-p}-\sqrt{1-p}\right)}, \tag{II.1.82}$$

$$\chi_{22} = \frac{q(1-p)\left(1-\sqrt{1-p}\right)}{\sqrt{1-q}\left(1-\sqrt{1-p}\right)p^{3/2} + 2q\left(1+p\sqrt{1-p}-\sqrt{1-p}\right)}. \tag{II.1.83}$$

ami például a $p_1 = 0.3$ és $p_2 = 0.7$ esetén

$$\chi = \begin{pmatrix} 0.307 & 0 & 0 \\ 0 & 0.637 & 0.159 \\ 0 & 0.159 & 0.056 \end{pmatrix}, \tag{II.1.84}$$

a következő egyensúlyi eloszlást adja. A II.1.75 qKac tétel felhasználásából az átlagos első visszatérési idő a $|0\rangle$ állapotba

$$T_0 = \frac{1}{\chi_{00}} = 3.263\,, \tag{II.1.85}$$

ami megegyezik a II.1.9 egyenlet közvetlen kiértékeléséből kapott értékkel.

Egy $\mathcal{H}_{\text{sys}}$ Hilbert-téren értelmezett rendszer vezetési tulajdonságainak vizsgálata során felmerülő egyik központi kérdése a rendszer $|\varphi_m\rangle$ állapotából indított folyamat $|\varphi_n\rangle$ állapotának $T_{m,n}$ átlagos elérési ideje. Melyet folytonos idejű dinamikákban való vizsgálatához szokás a rendszer dinamikáját leíró Hamilton-operátorba bevezetni a $|\varphi_m\rangle$ állapothoz tartozó forrás és a $|\varphi_n\rangle$ állapothoz tartozó nyelőt, majd az így definiált modellben egy gerjesztés átlagos élettartalma megegyezik a keresett idővel[191–194]. Ezt az ötletet alkalmazhatjuk diszkrét

idejű bolyongásokra is, hiszen a II.7 példa tovább általánosításából látható, hogy a qKac lemma alkalmazható minden olyan folyamatra, ahol a $\mathcal{T}[\cdot]$ kvantumcsatorna felbontható

$$\varrho(t+1) = \mathcal{T}[\varrho(t)] = \mathcal{S}[\mathcal{D}[\varrho(t)]]\,, \tag{II.1.86}$$

két részre, ahol az időlépést egy $\mathcal{D}[\cdot]$ klasszikus folyamattal kezdünk, mely egy klasszikus sztochasztikus folyamattal összeköti a $|\Psi\rangle$ kezdeti állapotot a rendszer maradék részével, majd az időlépés második felében ($|\Psi\rangle$ kivételével) a rendszer a $\mathcal{S}[\cdot]$ evolúcióval megadott nyílt kvantumos időfejlődést végzi. Így a $|\Psi\rangle$, mint egy kontroll állapot használható, ezt demonstrálja a következő példa.

II.8. *Példa.* *Vegyünk egy $\mathcal{H}_{sys}$ Hilbert-téren értelmezett rendszert és határozzuk meg a $|\varphi_m\rangle$ állapotából indított folyamat $|\varphi_n\rangle$ állapotának $T_{m,n}$ átlagos elérési idejét. A $T_{m,n}$ megállapításához vezessünk be egy külső $|\Psi\rangle \in \mathcal{H}_{kont.}$ kontroll állapotot, mely felhasználásával elindíthatjuk a $|\varphi_m\rangle$ állapotból, illetve kivehetjük a $|\varphi_n\rangle$ állapotban a bolyongót, ez a klasszikus operáció megadható a*

$$\mathcal{D}[\cdot] = \sum_{\nu=1}^{3} K_\nu \cdot K_\nu^\dagger\,, \tag{II.1.87}$$

ahol

$$K_1 = |\varphi_m\rangle\langle\Psi|\,, \qquad K_2 = |\Psi\rangle\langle\varphi_n|\,, \qquad K_3 = \mathbb{I}_{\mathcal{H}_{sys}\otimes\mathcal{H}_{kont}} - |\Psi\rangle\langle\Psi| - |\varphi_n\rangle\langle\varphi_n| \tag{II.1.88}$$

trace őrző csatorna segítségével. Majd ezt követően a $|\Psi\rangle$-vel kiterjesztett teljes $\varrho_{tot} = \varrho_{sys} \otimes \varrho_{kont}$ rendszert hagyjuk fejlődni az $(\mathcal{S} \otimes \mathbb{I}_{kont})[\cdot]$ csatornával. Tehát a teljes rendszer időfejlődése a következő

$$\varrho_{tot}(t+1) = (\mathcal{S} \otimes \mathbb{I}_{kont})[\mathcal{D}[\varrho_{tot}(t)]] \tag{II.1.89}$$

melyben definiált T_Ψ átlagos első visszatérési idő és a keresett átlagos elérési idő között a

$$T_{m,n} = T_\Psi - 1 \tag{II.1.90}$$

kapcsolat áll fent, ahol a két idő közti különbség a kiolvasáshoz szükséges időből ered, továbbá látható, hogy a visszatérést ellenőrző mérés segítségével elkerüljük a többszörös eléréseket. (Megj.: A teljes $\mathcal{T}[\cdot]$ csatorna három részre osztásával definiálható olyan protokoll ami mellett az ancilla/kontroll állapot átlagos visszatérési ideje és a megfigyelt állapotok közti átlagos elérési ideje megegyezik[13])

Véletlen numerikus futások során azt tapasztaltam, hogy az átlagos első visszatérési idő és az egyensúlyi eloszlás között általában nem áll fent a II.1.75 egyenlettel megadott kapocslat, azonban a terület irodalmának fokozatos megismerése során belefutottam a következő példába, ahol a qKac tételhez szükséges II.1.74 feltétel nem teljesül, azonban a II.1.75 egyenlet mégis helyes eredményre vezet.

II.9. *Példa.* *(Klasszikus-kvantum csatornák[195]) Egy tetszőleges klasszikus-kvantum csatorna megadható a*

$$\varrho_{cq}(t+1) = \mathcal{T}_{cq}\left[\varrho(t)\right] = \sum_{n=1}^{dim\mathcal{H}} \langle\varphi_n|\,\varrho(t)\,|\varphi_n\rangle\ \sigma_n \tag{II.1.91}$$

időlépés segítségével, ahol a dinamika $\{\sigma_n\}$ generátorai $Tr\,\sigma_n = 1$-re normált, önadjungált és pozitív operátorok. Az így definiált dinamika általában nem teljesíti a qKac tételhez szükséges II.1.74 feltételt, azonban az átlagos első visszatérési időre mégis igaz a II.1.75 egyenlet.

A példa rövid analizálásából látható, hogy annak speciális tulajdonsága abból ered: ha az érdeklődésünket lekorlátozzuk a sűrűségoperátor diagonális elemeinek dinamikájára, akkor az megadható egy W időfüggetlen átmeneti mátrixszal, mely elemei

$$W_{m,n} = \langle \varphi_m | \sigma_n | \varphi_m \rangle \tag{II.1.92}$$

megadják annak a valószínűségét, hogy a bolyongó a $|\varphi_m\rangle$ állapotból a $|\varphi_n\rangle$ állapotba átmegy. Tehát a W segítségével a folyamathoz rendelhető egy homogén Markov-lánc, mely visszatérési tulajdonságai megegyeznek az eredeti rendszerével. Így az ehhez tartozó átlagos első visszatérési idő meghatározható az I.6 Kac lemma segítségével.

Ez előző példa könnyen általánosítható és azt mondhatjuk, hogy a II.1.75 egyenlet minden olyan bolyongásban is megadja az átlagos első visszatérési időt, ahol a folyamatot során a sűrűségoperátor diagonális elemeinek változása a többi diagonális elemtől függ csak (időfüggetlen módón). Hiszen, ekkor a diagonális elemek időfejlődése leválasztható az off-diagonális tagok időfejlődéséről, és evolúciójuk megadható egy homogén Markov-lánc segítségével, melyben az I.6 Kac tétel alkalmazható.

Míg klasszikus folyamatokban az átlagos első visszatérési időt a π egyensúlyi eloszlás megfelelő eleme teljesen megadja, addig általános kvantumfolyamat esetén egyenlőre még nyitott kérdés, hogy a $\langle \Psi | \chi | \Psi \rangle$ egy komplexebb függvénye, vagy akár a teljes χ ismerete elegendő-e a $|\Psi\rangle$ állapotba való átlagos első visszatérési idő megállapításához.

Összegzés

A fejezet első felében a feltételes sűrűségoperátor bevezetésével adtam egy alternatív meghatározásmódját az átlagos első visszatérési időnek iterált nyílt dinamikákban. Valamint bevezettem a releváns Hilbert-tér fogalmát, mely nem más mint az a minimális elnyelő tartomány mely tartalmazza a kezdőállapotot.

A fejezet második felében bemutattam az általunk talált tételt, miszerint unitér iterált kvantumcsatornák esetén az átlagos első visszatérési idő megegyezik a releváns Hilbert-tér dimenziójával. Ezen dinamika definiáló tulajdonságaként a folyamathoz rendelt Kraus-operátorok teljesítik az ún. bisztochasztikus tulajdonságot, melyet párhuzamba állítottam a klasszikus dinamikák átmeneti mátrixának duplán sztochasztikus tulajdonságával, valamint az ott kapott átlagos első visszatérési idővel. Ezt a részt zárva egy analitikus példán keresztül elemeztem a tételben fontos szerepet játszó releváns Hilbert-teret, majd további numerikus példán megmutattam a tételünk általánosságát.

A fejezet végén ismertettem a klasszikus Kac lemma általunk felírt általánosítását kvantumos csatornákra, mely teljesülését megmutattam egy analitikus példán. Ezt követően bizonyítottam a tétel széleskörű alkalmazhatóságát egy tetszőleges rendszer két állapota közötti várható elérési idő meghatározásával egy iterált, de azon belül tetszőleges dinamika mellett.

– 2 –
Order-by-disorder mechanizmus során kialakuló alapállapot az SU(4) Heisenberg-modellben

Szilárdtest spinjei antiferromágneses csatolás esetén egymásra merőlegesen, míg ferromágneses csatolás esetén egymással megegyező irányba próbálnak rendeződni. A lehetséges spin konfigurációkhoz képest alacsony koordinációs számú rácsgeometriákban az ilyenfajta rendeződés nem egyértelmű. Túlmenve az előző naiv képen az egyes konfigurációk ekvivalenciája felhasadhat, ezt a jelenséget nevezzük "order-by-disorder" mechanizmusnak. Az elkövetkező fejezetben bemutatom hogy az fcc rácsgeometrián értelmezett su(4) szimmetrikus Heisenberg-modellben hogyan jelentkezik ez a felhasadás.

"Science is the captain, and practice the soldiers."
Leonardo da Vinci

2.1. Az su(4) Heisenberg-modell vizsgálata fcc rácson

Az irodalmi áttekintés 2.5 fejezetében röviden kiemeltem a Heisenberg-modell fundamentális szerepét a szilárdtestek elemi mágneseinek kölcsönhatásában. A modell ezen kruciális tulajdonságát a 2.2.1 fejezetben igazoltam, ahol megmutattam, hogy a Pauli-elv révén spinfüggetlen Hamilton-operátor is befolyásolhatja a megvalósuló állapot spinjét, valamint a direkt- és a kinetikus kicserélődésen keresztül adtam egy mikroszkopikus képet a modellben szereplő csatolási konstans nagyságára és előjelére. Majd ezt követően felírtam a homogén Heisenberg-modellt, mint az optikai csapdákba helyezett atomok erősen kölcsönható határesetének legegyszerűbb modelljét.

Azonban a Heisenberg-modell, egyszerűségének ellenére, mégis az optikai asztaloknál realisztikusabb fizikai rendszerek leírására is alkalmas, mint például az átmenetifémek egyes oxidjaiban és egyéb vegyületeiben kialakuló mágneses rend meghatározására. Ezen kristályok közös szerkezete olyan, hogy az átmenetifémek külső d elektronjai, a Coulomb-kölcsönhatásnak köszönhetően, lokalizáltak, és az adalékolt elem (például az oxigén) mágneses tere felhasítja ezeket egy e_g kétszeresen és egy t_{2g} háromszorosan degenerált állapotokra, mely állapotok degenerációja a Jahn-Teller effektus[196] következtében teljesen felhasadhat. Tehát ezekben a modellekben a külső e_g héjon lévő elektronok superexchange kicserélődésének leírásához a spin és a töltés szabadsági fokon túl a pálya szabadsági fokokat is figyelembe kell vennünk, mely kísérletileg igazolt[197–200] legjobb modellje a Kugel-Khomskii modell[201,202]. A Kugel-Khomskii modell legmagasabb szimmetriájú határesetében, amikor e_g degenerációja megmarad, a spin és a pálya szabadsági fokok egyenlő súllyal kezelhetőek,

így a modell az e_g pályán lévő elektronnak 2×2 belső állapotot enged meg, mely lokalizáltsága, az általunk is vizsgált[203], su(4) antiferromágneses Heisenberg-modellt adja[204–206].

A bevezető rész 2.2.3 fejezetében megmutattam, hogy az antiferromágneses Heisenberg-modell alapállapota igen sokrétű és erősen függ a modell szimmetriájától és az adott rács geometriájától. Továbbá arra is felhívtam a figyelmet, hogy egyik ismert klasszikus vagy kvantumos rendeződés se lehet véges rendszerekben a modell egzakt alapállapota, viszont a rácsméret növelésével egyre jobb közelítést adnak. Az su(4) Heisenberg-modell fontosságát mutatja, hogy su(2) Heisenberg-modell után az egyik legkiterjedtebb az alapállapotának meghatározásának vizsgálata. A korábbi eredmények egy és két dimenzióban valamint egyszerű köbös rácsban spinfolyadékot jósolnak[207–217], míg a koordinációs szám növelésével, bcc és swedenborgite rácsokban klasszikusan rendezett fázist adtak[157,218,219]. Így joggal feltételezhetjük, hogy a koordinációs szám további növelésével, fcc rács esetén az alapállapot klasszikus rendeződésű.

A hátralevő részben az áttekintés 2.4.1 fejezetben bemutatott spinhullám számolás segítségével meghatározom az

$$H = J \sum_{r,r'} \sum_{\alpha,\beta} S^{\alpha}_{\beta}(r) S^{\beta}_{\alpha}(r') \tag{II.2.1}$$

su(4) szimmetrikus antiferromágneses Heisenberg-modell alapállapotát, majd megvizsgálom a kapott megoldás stabilitását nulla és véges hőmérsékleten is. A D függelék alapján a modell teljes megválasztásához az $M = 1$ fundamentális ábrázolást is kirójuk, mely összhangban van a kísérleti összeállításokkal. (Fundamentális ábrázolás esetén minden rácsponthoz egy négy dimenziós lokális Hilbert-teret rendelünk /amit az $\alpha \in \{A, B, C, D\}$ irányok feszítenek ki/).

Habár az M értékét egyre rögzítettük, az elkövetkező fejezetekben meghagyom az explicit M függést, hogy a spinhullám-számolás egyes rendjei jól elkülönüljenek. Továbbá a számolás terjedelmessége miatt a munkánkat igyekszem jól követhetően, de csak a fő eredményekre koncentrálva bemutatni.

2.1.1. Klasszikus alapállapot

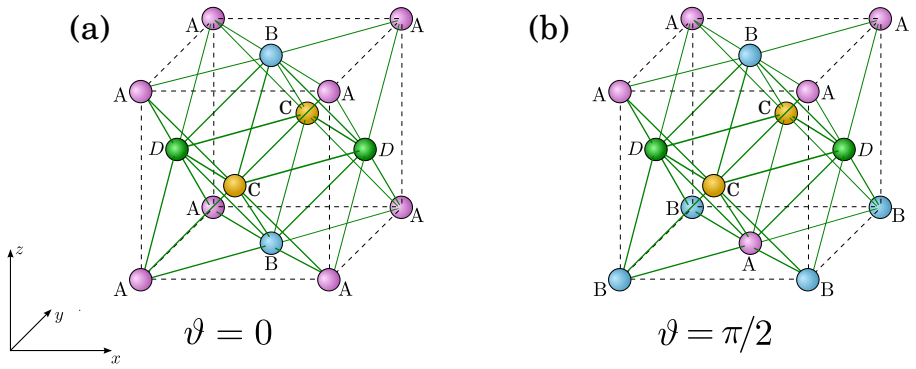
A spinhullám számolás első lépéseként meg kell állapítanunk, hogy milyen közelítő klasszikus rendeződés (spinkonfiguráció) valósul meg az alapállapotban, majd a Goldstone-módusokat elkerülve az I.2.57 Holstein-Primakoff transzformáció segítségével meghatározhatjuk az erre ráülő kvantum és termikus fluktuációkat. Ebben a fejezetben megkeresem az összes lehetséges spinkonfigurációt, mely az alapállapotban megvalósulhat.

Az su(N) szimmetriát sértő, klasszikus rendeződésben a szimmetria $\{S^{\alpha}_{\beta}(i)\}$ generátorai közül minden rácsponton legalább az egyiknek a várható értéke nullától különböző. Továbbá a spinoperátorok Schwinger-reprezentációja lehetővé teszi, hogy az őket felépítő C.12 Schwinger-bozonokat a klasszikus limeszben helyettesítsük a

$$\langle b_{r,\alpha} \rangle = \sqrt{M} \xi_{r,\alpha} \quad \text{és} \quad \langle b^{\dagger}_{r,\alpha} \rangle = \sqrt{M} \xi^{*}_{r,\alpha} \tag{II.2.2}$$

várható értékeikkel, ahol a $\{\xi_{r,\alpha}\}$ vektorok tetszőleges négy dimenziós komplex egységvektorok. Így a klasszikus határesetben a $S^{\alpha}_{\beta}(r) = \xi^{*}_{r,\alpha} \xi_{r,\beta}$ helyettesítéssel élhetünk. Tehát az alapállapoti konfigurációt úgy kell megválasztanunk, hogy az minimalizálja a

$$E^{(0)} = JM^2 \sum_{\langle r,r' \rangle} \left| \sum_{\alpha} \xi^{*}_{r,\alpha} \xi_{r',\alpha} \right|^2 . \tag{II.2.3}$$



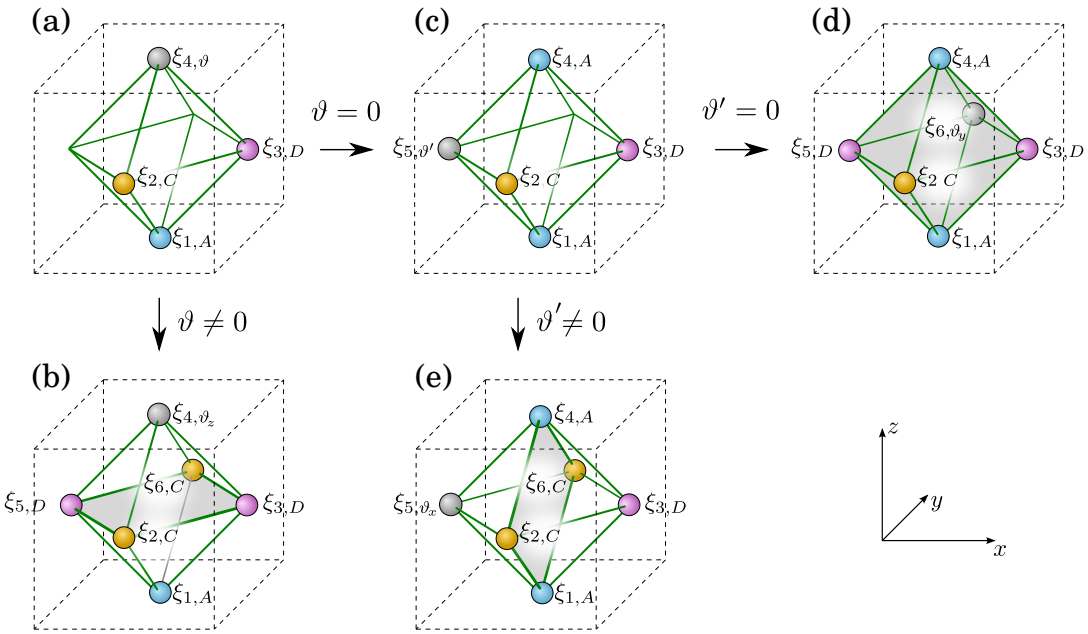
II.2.1. ábra. A klasszikus konfiguráció két speciális esete. Az ábrán a $\{\xi_{i,\alpha}\}$ vektorok által kifeszített lokális négydimenziós tér különböző bázisvektorait eltérő színekkel jelöltem, mely irányok páronként merőlegesek egymásra.

klasszikus energiát. Mivel a II.2.3 egyenletben megadott $E^{(0)}$ négyzetszámok összege, így annak az alsó korlátja nulla. Másként, a teljes energiát csak úgy minimalizálhatjuk, ha sikerül minden egyes tagját szimultán eltüntetni a szomszédos $\xi_{r,\alpha}$ és $\xi_{r',\alpha}$ vektorok merőleges megválasztásával. Ennek egy lehetséges módja a II.2.1 ábrán látható négyalrácsos konfigurációk, azonban ezeknél általánosabb konfigurációk is megvalósulhatnak, melyeket bemutatására szentelem a fejezet hátralevő részét.

A legáltalánosabb klasszikus konfiguráció a következőképpen konstruálható meg: a {100} kristálytani irányok közül válasszunk ki egyet, például haladjunk a z-tengely mentén (001). A kristály adott z-vel jellemzett síkjában válasszuk a ξ vektortorokat a $(\cos\vartheta_z, \sin\vartheta_z, 0, 0)$ és a $(-\sin\vartheta_z, \cos\vartheta_z, 0, 0)$ sakktáblaszerű ismétléséből a páros síkokban és a páratlan síkokat a $(0, 0, \cos\vartheta_z, \sin\vartheta_z)$ és a $(0, 0, -\sin\vartheta_z, \cos\vartheta_z)$ vektorok ugyancsak sakktáblaszerű elrendezése alkossák, ahol ϑ_z a rácspont állapotainak z koordinátától függő keverési szöge. Így az egyes síkok mentén függetlenül választott $\{\vartheta_z\}$ értékek mellett is biztosított hogy a szomszédos spinállások egymásra merőleges, valamint hogy a II.2.3 klasszikus energia a minimumát veszi fel.

Az klasszikus alapállapot bemutatott konstrukciója során a kristálytani irány és az egyes síkokban lévő bázisvektorok megválasztása önkényes volt, azonban a rendszer globális su(4) szimmetriájából fakadóan bármilyen ettől eltérő konfiguráció egy szimmetriatranszformációval összeköthető a bemutatott konfigurációkkal.

Az fcc rács kocka elemi cellájának belsejében lévő oktaéder és az oktaéder lapjára fektetett tetraéder alaposabb megvizsgálásával belátható, hogy az előbb említett konfiguráció a legáltalánosabb amit megkonstruálhatunk. Vegyünk először egy oktaédert, mely három szomszédos rácspontján a globális su(4) transzformációnak köszönhetően a spinkonfigurációk iránya tetszőlegesen megválasztható, mindaddig amíg a spinek páronként merőlegesek. Legyen ez a három irány a következő: $\xi_A = (1, 0, 0, 0)$, $\xi_C = (0, 0, 1, 0)$ és $\xi_D = (0, 0, 0, 1)$. A II.2.2a. ábrán jelzett negyedik rácsponton a spinállás azonban már nem egyértelmű, hiszen tetszőleges ϑ esetén a $\xi_{4,\vartheta} = (\cos\vartheta, \sin\vartheta, 0, 0)$ állapot kielégíti a megkívánt ortogonalitási feltételt. Most ϑ-tól függően ketté kell bontanunk a konfigurációk megválasztását: 1) Ha $\vartheta \neq 0$, akkor a maradék két rácspont konfigurációja már a II.2.2b. ábrán látható egyértelmű irányt veszi fel, ahol $\xi_D = (0, 0, 0, 1)$. 2) Ha $\vartheta = 0$, akkor a II.2.2c. ábra ötödik rácspontján a spinállás $\xi_{5,\vartheta'}(0, 0, \sin\vartheta', \cos\vartheta')$ irányú lehet. A ϑ szabad megválasztásához hasonlóan a ϑ' megválasztásánál is két lehetőségünk van, ezt szimbolizálja a II.2.2d. és a II.2.2e. ábra. A három végállapotot összegezve látható, hogy egy oktaéder spinkonfigurációjának megállapítása során az egyik rácsponton marad egy szabad ϑ paraméter. Az fcc rács oktaéderei tetraéderekkel csatlakoznak, amikben három rácspont meg-



II.2.2. ábra. Az fcc rács egy oktaéderének klasszikus alapállapoti spinkonfigurációjának megválasztásának elemi lépései. A konstrukciós gráf mindhárom végállapotában marad egy rácspont, melyen egy szabad ϑ paraméter, mellyel két szélsőérték között folytonosan megválaszthatjuk annak a konfigurációját.

választása után a negyedik csúcs már egyértelmű, így könnyen belátható, hogy az fcc rács egy oktaéderének spinkonfigurációjának megválasztása két irányba teljesen meghatározza a rács spinkonfigurációját, a harmadik irány mentén, viszont egy szintről-szinte szabadon választható ϑ_z változóval parametrizálhatunk. Így beláttuk, hogy a klasszikus konfigurációk száma igen nagy, hiszen egy sík mentén szabadon választható a síkhoz tartozó ϑ_z paraméter.

Helikális rendeződés

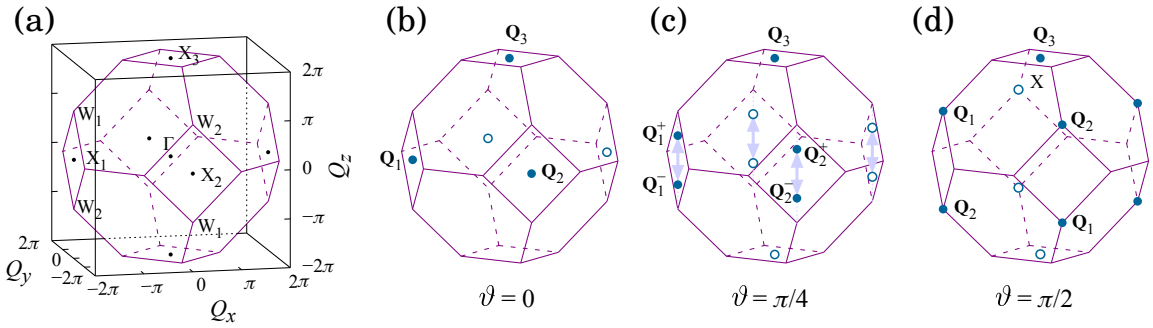
Az egyszerűség kedvéért a lehetséges alapállapoti konfigurációk közül kiválasztjuk, az úgynevezett helikális-állapotokat, melyekben a szintek mentén szabadon megválasztható ϑ_z a $\vartheta_z = z\vartheta$ lineáris függést mutatja, azaz a kiválasztott kristálytani irány mentén a ξ vektorok relatív elcsavarodása a köztük lévő távolsággal arányos. Tehát a helikális rendeződés a

$$\xi_{r\pm\delta} = R(\mp\vartheta/2)\xi_r \tag{II.2.4}$$

rekurzív összefüggéssel adható meg, ahol

$$R(\vartheta) = \begin{bmatrix} 0 & 0 & \cos\vartheta & -\sin\vartheta \\ 0 & 0 & \sin\vartheta & \cos\vartheta \\ \cos\vartheta & -\sin\vartheta & 0 & 0 \\ \sin\vartheta & \cos\vartheta & 0 & 0 \end{bmatrix} \tag{II.2.5}$$

transzformálja a bozonok várható értékét két rácspont között, melyek egymáshoz képest $\delta = (1/2, 0, 1/2)$-vel vannak eltolva. Nevezzük a rács egy kiszemelt síkját a $z = 0$ síknak, mely két alrácsát $\xi_A = (1, 0, 0, 0)$ és $\xi_B = (0, 1, 0, 0)$ irányúra rögzítjük. A $z = 0$ sík ξ_A és ξ_B vektorokkal jellemezett rácspontokból, δ eltolás segítségével elérhető pozíciókat a Λ_A és a Λ_B alrácsokba soroljuk. Tehát a Λ_A alrácsot az (n_x, n_y, n_z) és $(n_x+1/2, n_y, n_z+1/2)$



II.2.3. ábra. A helikális állapot ordering wave vektorjainak ábrázolása különböző ϑ értékek mellett. (a) A Brillouin zóna és a magas szimmetriájú pontok. (b) A $\vartheta = 0$ triviális konfigurációban a ordering wave vektorok az X magaszimmetriájú pontban találhatóak. (c) Egy közbülső ϑ érték mellet a Q_1 és a Q_2 ordering wave vektorok felhasadnak. (d) A $\vartheta = \pi/2$ csavart állapotban a ordering wave vektorok a W_1 és a W_2 magas szimmetriájú pontokba kerülnek ($Q_1^+ = Q_1^-$ és $Q_2^+ = Q_2^-$).

koordinátájú pontok, míg a Λ_B alrácsot a $(n_x + 1/2, n_y + 1/2, n_z)$ és $(n_x, n_y + 1/2, n_z + 1/2)$ pontok alkotják, ahol n_x, n_y és n_z tetszőleges pozitív egész értéket vesznek fel. Az Λ_A és a Λ_B alrácsok bevezetésével a II.2.4 rekurziós összefüggés a

$$\xi_{x,y,n/2} = R^n(-\vartheta/2)\xi_{x-n/2,y-n/2,0} = R^n(-\vartheta/2)\tilde{\xi}_{x,y,n/2} \tag{II.2.6}$$

egyenlettel az $R(\vartheta)$ megfelelő hatványával vett szorzássá írható át, ahol $\tilde{\xi}_r = \xi_A$ ha $r \in \Lambda_A$ és $\tilde{\xi}_r = \xi_B$ ha $r \in \Lambda_B$.

A II.2.1 ábrán illusztrált módon látható, hogy a helikális rendeződés a $\vartheta = 0$ és a $\vartheta = \pi/2$ speciális értékei mellett visszaadják a már korábban megállapított négyalrácsos elrendezést. Hiszen a $\vartheta = 0$ esetén $R^2 = \mathbb{I}$, így az egymás feletti szintek ($\Delta z = 1$) alrácsai ugyanolyan rendeződést mutatnak, míg a $\vartheta = \pi/2$ esetén ez a periodicitás $\Delta z = 2$-re nő fel.

Spin-spin korrelációs függvény

Az áttekintő rész 2.5 fejezetében demonstráltam, hogy szilárdtestekben neutronszórás segítségével kísérletileg feltérképezhető az adott állapot spinkonfigurációja. A hosszútávú rendeződésre utaló I.2.64a Bragg-csúcsok helyét ordering wave vektorokkal[220] jellemzik, melyek megadják a rendeződés periodicitását. A helikális állapotok ordering wave vektorának megállapításához definiáljuk a

$$\mathcal{S}(r) = \sum_{\alpha,\beta} \left\langle \left[S_\alpha^\beta(0) - \frac{M}{4}\delta_{\alpha,\beta} \right] \left[S_\beta^\alpha(r) - \frac{M}{4}\delta_{\alpha,\beta} \right] \right\rangle, \tag{II.2.7}$$

spin-spin korrelációs függvényt, mely a klasszikus limeszben a

$$\mathcal{S}_{\mathrm{kl}}(r) = M^2 \left(\left| \sum_\alpha \xi_{0,\alpha}^* \xi_{r,\alpha} \right|^2 - \frac{1}{4} \right). \tag{II.2.8}$$

alakot ölti. A helikális állapotok konfigurációjának 2.1.2 konstrukciójának felhasználásával a II.2.8 korrelációs függvény a

$$\mathcal{S}_{\mathrm{kl}}(r) = \begin{cases} (1+2\cos 2n_z\vartheta)\frac{M^2}{4}, & \text{ha } r=(n_x,n_y,n_z)\,, \\ (1-2\cos 2n_z\vartheta)\frac{M^2}{4}, & \text{ha } r=(n_x+\frac{1}{2},n_y+\frac{1}{2},n_z)\,, \\ -\frac{M^2}{4}, & \text{ha } r=(n_x+\frac{1}{2},n_y,n_z+\frac{1}{2})\,, \\ -\frac{M^2}{4}, & \text{ha } r=(n_x,n_y+\frac{1}{2},n_z+\frac{1}{2}). \end{cases} \tag{II.2.9}$$

formába írható, mely

$$\mathcal{S}_{\mathrm{kl}}(q) = \sum_r e^{-irq}\mathcal{S}_{\mathrm{kl}}(r) \tag{II.2.10}$$

Fourier-transzformáltjának pólusai az fcc Brillouin zónáján belül a

$$\mathbf{Q}_1^{\pm} = 2\pi(1,0,\pm\vartheta/\pi)\,, \tag{II.2.11a}$$

$$\mathbf{Q}_2^{\pm} = 2\pi(0,1,\pm\vartheta/\pi)\,, \tag{II.2.11b}$$

$$\mathbf{Q}_3 = 2\pi(0,0,1)\,, \tag{II.2.11c}$$

ordering wave vektorokra vezet. Az fcc rács Brillouin zónája a II.2.3a ábrán látható téralakzat (csonkolt oktaéder), mely nyolc hatszöget és négy négyzetet tartalmaz. A további ábrákon pedig megfigyelhető, hogy a ϑ változtatásával a ordering wave vektorok hogyan mozdulnak el. Látható, hogy a $\vartheta = 0$ és a $\vartheta = \pi/2$ speciális értékek esetén a csúcsok helyei a Brillouin zóna magas szimmetriájú pontjaiba tolódik. A $\vartheta = 0$ triviális rendeződés esetén az összes $\{Q_i\}$ pont az X-szel jelzett négyzetlapközepekbe kerül, míg a ϑ változtatásával a Q_1 és a Q_2 ordering wave vektorok felhasadnak és egymásnak ellentétesen elindulnak a négyszögek sarkaiba, majd a $\vartheta = \pi/2$ csavart rendeződésben újra találkoznak, hiszen a négyzetek W_1 és W_2 csúcsait egy reciprok rácsvektor köti össze.

A helikális állapot két speciális esetében az $\mathcal{S}_{\mathrm{kl}}(q)$ az ordering wave vektorokban azonos értéket vesz fel

$$\mathcal{S}_{\mathrm{kl}}(Q_1) = \mathcal{S}_{\mathrm{kl}}(Q_2) = \mathcal{S}(_{\mathrm{kl}}Q_3) = \frac{M}{4}\,, \tag{II.2.12}$$

míg a közbülső állapotok esetén a Q_1 és a Q_2 csúcs felhasadásából fakadóan (ezekben a pontokban) lecsökken az értéke

$$\mathcal{S}_{\mathrm{kl}}(Q_1^{\pm}) = \mathcal{S}_{\mathrm{kl}}(Q_2^{\pm}) = \frac{M}{8}\,, \quad \mathcal{S}_{\mathrm{kl}}(Q_3) = \frac{M}{4}\,. \tag{II.2.13}$$

Ha a II.2.8 klasszikus struktúrafaktor helyett a II.2.7 teljes spin-spin korrelációs függvénnyel számoltunk volna, akkor a kvantum és a termikus zajnak megfelelően az egyes csúcsok kiszélesednének ugyan, de a csúcsok maximumhelyei az általunk meghatározott II.2.11 pontokban maradnának.

2.1.2. Kvantum fluktuációk

Az előző fejezetben megmutattam, hogy a II.2.3 energia minimumához végtelen sok klasszikus konfiguráció tartozik, melyek közül kiválasztottuk a egyparaméteres állapotokat (helikális állapotok). Ebben a részben megmutatom, hogy a spinhullámok (azaz a kvantumfluktuációk) bevezetésével a helikális állapotok által képviselt degeneráció felhasad és alapállapotnak a II.2.1a ábrán bemutatott triviális spinkonfiguráció választódik ki.

A helikális állapotok 2.1.2 klasszikus rendeződéséhez tartozó fluktuációkat az I.2.57 egyenlettel megadott magas spinekre kiterjesztett Holstein-Primakoff transzformáció segítségével vezethetjük be. Az I.2.57 összefüggésben feltételeztük, hogy az adott rácspont spinoperátora vezető rendben az S^{α}_{α} irányba mutat, ami helikális állapotoknál nem teljesül, hiszen az $R(\vartheta)$ mátrixszal megadott transzformáció a további diagonális komponenseket is bekeveri. Azonban a 2.1.2 összefüggés mintájára bevethetjük az eredeti $\{b_{r,\alpha}\}$ bozon operátorok helyett azok $\{\tilde{b}_{r,\alpha}\}$-vel jelölt kanonikus transzformáltját a következőképpen:

$$\tilde{b}_{(x,y,n/2),\alpha} = \sum_{\beta} \left[R^{n}(\vartheta/2)\right]_{\alpha\beta} b_{(x,y,n/2),\beta}\,, \tag{II.2.14}$$

ahol az egyes $\tilde{b}_{r,\alpha}$ operátorok várhatóértékei már egyetlen "tiszta" irányba mutatnak, azaz $\left\langle \tilde{b}_{r,\alpha} \right\rangle = \sqrt{M}\tilde{\xi}_{r,\alpha}$. A $\tilde{\xi}_{r,\alpha}$ vektorok a $\xi_{r,A} = (1,0,0,0)$ és a $\xi_{r,B} = (0,1,0,0)$ értékeket veszik fel, attól függően hogy az r vektor a Λ_A vagy Λ_B alrácshoz tartozik. A II.2.14 kanonikus transzformáció segítségével már a $\{\tilde{b}_{r,\alpha}\}$ operátorokra használhatjuk az I.2.57 Holstein-Primakoff transzformációt:

$$\tilde{b}_{r,\alpha} = \begin{cases} c_{r,\alpha}, & \text{ha } r \notin \Lambda_{\alpha}, \\ \sqrt{M - \mu_{r,\alpha}}, & \text{ha } r \in \Lambda_{\alpha}, \end{cases} \tag{II.2.15a}$$

ahol

$$\mu_{r,\alpha} = \sum_{\beta \neq \alpha} c^{\dagger}_{r,\beta} c_{r,\beta}\,. \tag{II.2.15b}$$

a rácsponthoz tartozó, a klasszikus rendeződésre merőleges fluktuációk betöltése és $\{c_{r,\alpha}\}$ az újonnan bevezetett Holstein-Primakoff bozonok. Amennyiben a feltételezett klasszikus rend valóban jó közelítése az alapállapotnak, akkor abban az esetben az M értéke mellett a $\{\langle \mu_{r,\alpha} \rangle\}$ kvantumfluktuációk várható értékei perturbatívan kezelhetőek és a II.2.15a egyenletben szereplő gyök sorba fejthető. A sorfejtést

$$\sqrt{M - \mu_{r,\alpha}} \approx \sqrt{M}\left(1 - \frac{\mu_{r,\alpha}}{2M}\right), \tag{II.2.16}$$

lineáris rendjéig elmenve, majd a bozon operátokra kapott alakot visszaírva a II.2.1 eredeti Hamilton-operátorba M-ben különböző rendű tagokat kapunk: 1) Az M^2-tel arányos tagok a II.2.3 klasszikus energiát adják, mely a helikális állapotok konstrukciójából fakadóan nulla. 2) az $M^{3/2}$-vel arányos tagok szintén eltűnnek, hiszen a helikális állapotok minimalizálják a Hamilton operátort, így ezekben a pontokban az energia deriváltja is nulla (nyeregpont egyenletek). 3) Tehát a II.2.1 Hamilton operátor vezető rendjét az M-mel arányos tagok adják.

A számolás ezen pontján az $M \gg \{\langle \mu_{r,\alpha} \rangle\}$ feltételt pusztán csak megköveteltük, azonban ezt a számolás végeztével ellenőriznünk kell, mint egy önkonzisztencia felvételt.

A kvantum fluktuációk teljes energiajáruléka vezető rendben

A helikális állapotok 2.1.2 konstrukciójából látható, hogy az elemi cella leszűkíthető pusztán két rácspontra, melyek a Λ_A, illetve a Λ_B alrácsokhoz tartoznak. Az r helyvektor a Λ_A alrácshoz tartozik, ha a koordinátájái (m_x, m_y, m_z) alakba írhatóak és a Λ_B alrácshoz ha $(m_x + 1/2, m_y, m_z + 1/2)$ képpen, ahol $m_i \in \mathbb{Z}^+$. Belátható, hogy ha az állapotok csavarodásának 2.1.2 alakja helyett ennél egy fokkal bonyolultabb transzformációt alkalmazunk, akkor a két rácspont helyett egyre szűkíthető az elemi cella, azonban ez az érthetőség rovására ment volna.

A II.2.15 egyenletek felhasználásával megmutatható, hogy például a páros síkokban az egyes alrácsok közötti I.2.59 bond operátorok vezető rendben (azaz M-ben lináris tagok) a következők:

$$\frac{1}{M}\sum_{\alpha,\beta} S^{\alpha}_{\beta}(r\in\Lambda_A)S^{\beta}_{\alpha}(r'\in\Lambda_A) = c_\vartheta^2\left[c_{r,C}c_{r',C}+c^\dagger_{r,C}c_{r,C}+c^\dagger_{r',C}c_{r',C}+c^\dagger_{r,C}c^\dagger_{r',C}\right]+c_\vartheta s_\vartheta\left[c^\dagger_{r,C}c^\dagger_{r',D}-c_{r,D}c_{r',C}+\right.$$
$$\left.+\text{ h.c.}\right]+s_\vartheta^2\left[c^\dagger_{r,D}c_{r,D}+c^\dagger_{r',D}c_{r',D}-c^\dagger_{r,D}c^\dagger_{r',D}-c_{r',D}c_{r,D}\right], \tag{II.2.17a}$$

$$\frac{1}{M}\sum_{\alpha,\beta} S^{\alpha}_{\beta}(r\in\Lambda_A)S^{\beta}_{\alpha}(r'\in\Lambda_B) = c_\vartheta^2\left[c_{r,D}c_{r',C}+c^\dagger_{r,D}c_{r,D}+c^\dagger_{r',C}c_{r',C}+c^\dagger_{r,D}c^\dagger_{r',C}\right]+c_\vartheta s_\vartheta\left[c_{r,C}c_{r',C}+c_{r,D}c_{r',D}+\right.$$
$$\left.+\text{ h.c.}\right]+s_\vartheta^2\left[c_{r,C}c_{r',D}+c^\dagger_{r,C}c_{r,C}+c^\dagger_{r',D}c_{r',D}+c^\dagger_{r,C}c^\dagger_{r',D}\right], \tag{II.2.17b}$$

$$\frac{1}{M}\sum_{\alpha,\beta} S^{\alpha}_{\beta}(r\in\Lambda_B)S^{\beta}_{\alpha}(r'\in\Lambda_A) = c_\vartheta^2\left[c_{r,C}c_{r',D}+c^\dagger_{r,C}c_{r,C}+c^\dagger_{r,C}c^\dagger_{r',D}+c^\dagger_{r',D}c_{r',D}\right]-c_\vartheta s_\vartheta\left[c_{r,C}c_{r',C}+c_{r,D}c_{r',D}+\right.$$
$$\left.+\text{ h.c.}\right]+s_\vartheta^2\left[c_{r,D}c_{r',C}+c^\dagger_{r,D}c_{r,D}+c^\dagger_{r,D}c^\dagger_{r',C}+c^\dagger_{r',C}c_{r',C}\right], \tag{II.2.17c}$$

$$\frac{1}{M}\sum_{\alpha,\beta} S^{\alpha}_{\beta}(r\in\Lambda_B)S^{\beta}_{\alpha}(r'\in\Lambda_B) = c_\vartheta^2\left[c_{r,D}c_{r',D}+c^\dagger_{r,D}c_{r,D}+c^\dagger_{r',D}c_{r',D}+c^\dagger_{r,D}c^\dagger_{r',D}\right]-c_\vartheta s_\vartheta\left[c^\dagger_{r,D}c^\dagger_{r',C}+c_{r,D}c_{r',C}+\right.$$
$$\left.+c^\dagger_{r',D}c_{r',C}+c^\dagger_{r',C}c_{r',D}-c_{r,C}c_{r',D}-c^\dagger_{r,C}c^\dagger_{r',D}-c^\dagger_{r,D}c_{r,C}-c^\dagger_{r,C}c_{r,D}\right]+$$
$$+s_\vartheta^2\left[c^\dagger_{r,C}c_{r,C}+c^\dagger_{r',C}c_{r',C}-c^\dagger_{r,C}c^\dagger_{r',C}-c_{r,C}c_{r',C}\right], \tag{II.2.17d}$$

ahol a képletek egyszerűsítésére bevezettem a $c_\vartheta = \cos\vartheta$ és a $s_\vartheta = \sin\vartheta$ jelöléseket. A páratlan síkok bond operátorainak szerkezete megegyezik a páros síkokban lévő II.2.17 bond operátorokéval, annyi különbséggel, hogy ha $r\in\Lambda_A$ és $r'\in\Lambda_B$, akkor $\{c_{r,C}, c^\dagger_{r,C}\}$ operátorokat a $\{c_{r,B}, c^\dagger_{r,B}\}$ operátorokra és a $\{c_{r',D}, c^\dagger_{r',D}\}$ operátorokat a $\{c_{r',C}, c^\dagger_{r',C}\}$ operátorokra kell cserélnünk. Különböző paritású síkok esetén pedig a maradék kombinációkban keveredenek.

Vegyük észre, hogy Fourier-térben a II.2.1 Hamilton operátor vezető rendjét a II.2.17 egyenletben megadott alaknál lényegesen egyszerűbb alakra hozhatjuk a

$$\Phi_r = (c_{r,B}, c_{r,C}, c_{r,D}, c_{r+\delta',A}, c_{r+\delta',C}, c_{r+\delta',D})^T \tag{II.2.18}$$

Holstein-Primakoff bozonvektor segítéségével, ahol $\delta' = (1/2, 1/2, 0)$, mely Fourier-transzformáltja:

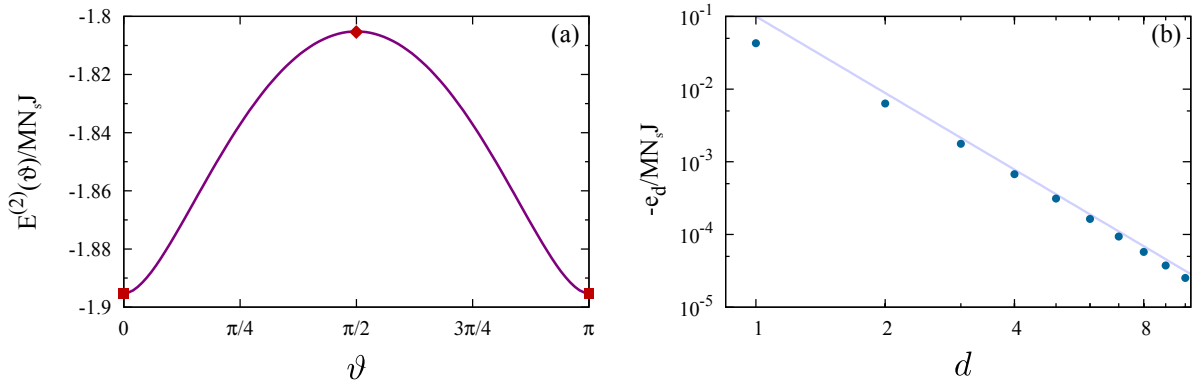
$$\Phi_q = \sqrt{\frac{2}{N_s}}\sum_r \Phi_r\, e^{-iq\cdot r}. \tag{II.2.19}$$

A helikális állapotok homogén csavarodásának köszönhetően, Fourier térben a II.2.1 Hamilton operátor vezető rendje

$$H^{(2)} = JM\sum_{q\in BZ}\left[4\,\Phi_q^\dagger\Phi_q + 2\left(\Phi_q^T B^*(q)\Phi_{-q}+\text{h.c.}\right)\right], \tag{II.2.20}$$

egy 12 dimenziós

$$B(q) = \begin{bmatrix} -c_xc_y & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & c_yc_zc_\vartheta^2 & -ic_ys_zc_\vartheta s_\vartheta & 0 & -ic_xs_zc_\vartheta s_\vartheta & c_xc_zs_\vartheta^2 \\ 0 & ic_ys_zc_\vartheta s_\vartheta & -c_yc_zs_\vartheta^2 & 0 & -c_xc_zc_\vartheta^2 & -ic_xs_zc_\vartheta s_\vartheta \\ 0 & 0 & 0 & -c_xc_y & 0 & 0 \\ 0 & ic_xs_zc_\vartheta s_\vartheta & -c_xc_zc_\vartheta^2 & 0 & -c_yc_zs_\vartheta^2 & ic_ys_zc_\vartheta s_\vartheta \\ 0 & c_xc_zs_\vartheta^2 & ic_xs_zc_\vartheta s_\vartheta & 0 & -ic_ys_zc_\vartheta s_\vartheta & c_yc_zc_\vartheta^2 \end{bmatrix} \tag{II.2.21}$$



II.2.4. ábra. (a) A spinhullámok által okozott energiakorrekció a ϑ függvényében. A korrekció a $\vartheta = 0$-ban veszi fel a minimum és $\vartheta = \pi/2$-ben pedig a maximum értékét. A kapott korrekció a ϑ páros függvénye, azaz $E^{(2)}(\vartheta) = E^{(2)}(-\vartheta)$, valamint π-ben periodikus, azaz $E^{(2)}(\vartheta) = E^{(2)}(\vartheta + \pi)$. A π periodicitás és a $\pi/2$ pontra vett szimmetriája az $E^{(2)}$-nek a modell globális su(4) szimmetriájából fakad. (b) Az energiakorrekció $E^{(2)}/N_s = e_0 + \sum e_d \cos(2d\vartheta)$ Fourier-transzformációjában szereplő e_d együtthatók $\propto d^{-3.5}$-es skálázásából látható, hogy közel sem analitikus a viselkedése, habár ránézésre annak tűnik. Az első két Fourier-együttható $e_0 = -1.843MJ$-nek és $e_1 = -0.043MJ$-nek adódott.

mátrix segítségével megadható, ahol a $c_\vartheta = \cos\vartheta$ és a $s_\vartheta = \sin\vartheta$ rövidítésekkel analóg módon bevezettem a $c_\nu = \cos(q_\nu/2)$ és $s_\nu = \sin(q_\nu/2)$ jelöléseket, továbbá $\nu \in \{x, y, z\}$ értékeken fut végig. A 221 szakdolgozatban (valamint a 222 jegyzetben és a 125 könyvben) kellő precizitással áttekintet Bogoliubov-transzformációval a II.2.20 Hamilton-operátor diagonalizálható, és a

$$\frac{E^{(2)}(\vartheta)}{N_s} = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{6}\left[\int_{\mathrm{BZ}} \frac{d^3q}{32\pi^3}\,\frac{\omega_i(q)}{2} - 4JM\right], \tag{II.2.22}$$

energiakorrekciót adja, ahol a $32\pi^2$ a Brillouin zóna mérete, $N_s = 2$ az elemi cella rácspontjainak a száma és a hat darab $\{\omega_i(q)\}$ pedig az

$$M(q) = 4JM\begin{bmatrix} \mathbb{I}_{6\times6} & B(q) \\ -B^*(q) & -\mathbb{I}_{6\times6} \end{bmatrix}, \tag{II.2.23}$$

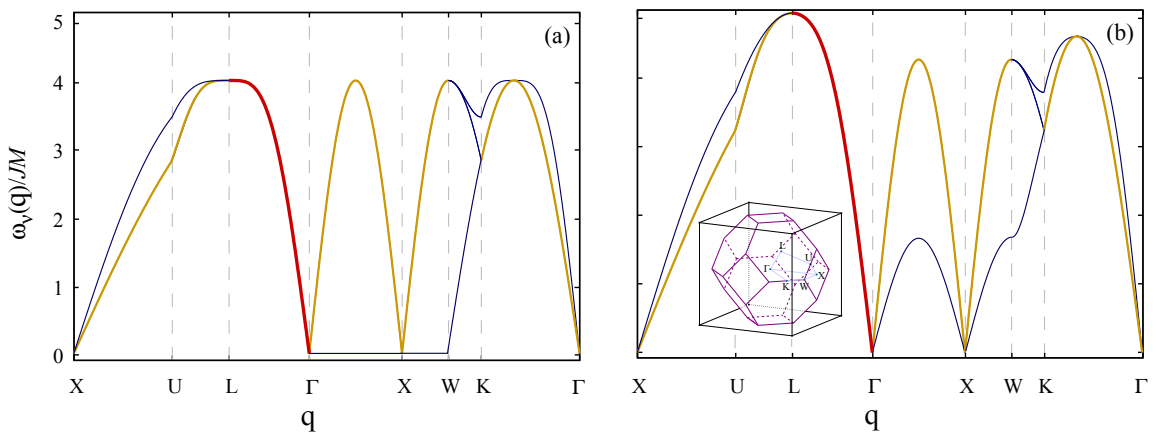
Bogoliubov-mátrix pozitív sajátértékei, melyek meghatározását a $\vartheta = 0$ és a $\vartheta = \pi/2$ speciális esetektől eltekintve csak numerikusan végeztük el, melyből adódó energiakorrekciót a II.2.4a ábrán ábrázoltam a ϑ csavarodás mértékének a függvényében. Az ábra szimmetrikus a $\vartheta = \pi/2$ pontra, valamint az is látható, hogy a fluktuációkból származó energiakorrekció a $\vartheta = 0$ triviális állapotban minimális és a $\vartheta = \pi/2$ csavart állapotban maximális, így az order-by-disorder mechanizmus a $\vartheta = 0$ konfigurációt választja ki alapállapotnak.

A elkövetkező két alfejezetekben analitikusan is meghatározom a két szélsőértékben a kvantumfluktuációk okozta energiakorrekciót.

A $\vartheta = 0$ alapállapot energiájának egzakt meghatározása

A $\vartheta = 0$ esetben a II.2.23 Bogoliubov-mátrix hat darab

$$M_\nu^{\mathrm{sq}} = 4JM\begin{bmatrix} 1 & \gamma_\nu^{\mathrm{sq}}(q) \\ -\gamma_\nu^{\mathrm{sq}}(q) & -1 \end{bmatrix}, \quad \nu \in \{x, y, z\}, \tag{II.2.24}$$



II.2.5. ábra. A spinhullámszámolás kvantum fluktuációinak diszperziós relációja (a) az első szomszéd és (b) a másodszomszéd kölcsönhatásokkal kiterjesztett Heisenberg-modellben. Az ábra elkészítéséhez a másodszomszéd kölcsönhatásokat egy $J_2/J = -0.086$ erősségű ferromágneses csatolással vettük figyelembe. Az egyes energianívók egyszeresen, kétszeresen, illetve háromszorosan degeneráltak, melyeket a vonalak vastagságának fokozatos növelésével, illetve rendre a kék, arany és piros színekkel jelöltünk.

2×2-es mátrixra esik szét, ahol

$$\gamma_x^{\mathrm{sq}}(q) = \cos\frac{q_y}{2}\cos\frac{q_z}{2}\,, \tag{II.2.25a}$$

$$\gamma_y^{\mathrm{sq}}(q) = \cos\frac{q_x}{2}\cos\frac{q_z}{2}\,, \tag{II.2.25b}$$

$$\gamma_z^{\mathrm{sq}}(q) = \cos\frac{q_x}{2}\cos\frac{q_y}{2}\,. \tag{II.2.25c}$$

A II.2.24 mátrixok egymástól függetlenül diagonalizálhatóak, azaz permutációs operátorok segítségével blokk-diagonális alakra hozható a teljes Bogoliubov-mátrix, mely egyes blokkjaiban a fent említett mátrixok lesznek. A szétesést követően a ν minden lehetséges indexe kétszer fordul elő.

A Bogoliubov-mátrix előbb említett felhasadása a következőképpen magyarázható: A $\vartheta = 0$ triviális állapotban minden egyes rácsponton a ξ_A, ξ_B, ξ_C és ξ_D vektoroknak megfelelő klasszikus spinállás található, melyeket a $\Lambda_A, \Lambda_B, \Lambda_C, \Lambda_D$ alrácsokba sorolunk. Ebben a határesetben a II.2.17 egyenletek szerkezetét megvizsgálva láthatjuk, hogy a bond operátorok két általános $r \in \Lambda_\mu$ és $r' \in \Lambda_\nu$ rácspontok között csak a $c_{r,\nu}, c^\dagger_{r,\nu}$ és a $c_{r',\mu}, c^\dagger_{r',\mu}$ operátorokat tartalmazzák. Továbbá az egyes alrács párosításokhoz tartozó bond operátorok független síkokra estnek szét, melyekben a két különböző alrácsok sakktáblaszerűen helyezkedik el. Például, a II.2.1a ábrán az Λ_A és a Λ_B alrácshoz tartozó spinek csak az $x - y$ síkban hatnak kölcsön és a z irányba független síkokra szakadnak. Így tehát a teljes $M_\nu(q)$ Bogoliubov-mátrixot helyettesíthetjük az összes lehetséges e_ν normálvektorú síkban lévő két alrács, sakktábla elhelyezkedéséhez tartozó bond operátor okból adódó $\gamma_\nu^{\mathrm{sq}}(q)$ struktúrafaktorú[93] $M_\nu^{\mathrm{sq}}(q)$ Bogoliubov-mátrixok összegével.

A II.2.24 Bogoliubov-mátrixok analitikusan diagonalizálása a

$$\omega_\nu^{\mathrm{sq}}(q) = 4JM\sqrt{1 - \left|\gamma_\nu^{\mathrm{sq}}(q)\right|^2}\,. \tag{II.2.26}$$

diszperziót adják, melyek a Brillouin zóna magas szimmetriájú pontjainak bejárása során az II.2.5a ábrán látható módon változik. Az egyik gerjesztési ágban a diszperzió konstans viselkedése a Γ és az X pontok között az

$M_\nu^{\mathrm{sq}}(q)$ mátrixok q_ν-től való függetlenségét mutatja. Az egyes blokkok az energiakorrekcióhoz adott járulékai azonos, mégpedig

$$\frac{E_{\mathrm{sq}}^{(2)}}{N_s} = -0.316JM\,, \tag{II.2.27}$$

mely segítségével a $\vartheta = 0$ konfigurációban a kvantumfluktuációkból származó teljes energiakorrekció:

$$\frac{E_{\vartheta=0}^{(2)}}{N_s} = 6\frac{E_{\mathrm{sq}}^{(2)}}{N_s} = -1.896\,JM\,. \tag{II.2.28}$$

Az így kapott energiakorrekció a ϑ összes többi lehetséges értékénél kisebb energiát ad, így a $\vartheta = 0$ állapot lesz a fluktuációk által kiválasztott alapállapot.

A $\vartheta = \pi/2$ maximális energiájú állapot energiájának egzakt meghatározása

A $\pi/2$ határesetben a II.2.23 Bogoliubov-mátrix felhasadása messze nem szembetűnő, hiszen a ϑ ezen értékének közvetlen beírása még nem eredményezi a mátrix blokkdiagonális alakra egyszerűsödését. Szükségünk van egy további unitér transzformációhoz, mely az egyes rácspontokon lévő két irány teljesen szimmetrikus és antiszimmetrikus kombinációit vissza transzformálja tiszta irányokká, ezt az unitér transzformációt elvégezve jutunk el a II.2.1b ábrán látható teljesen csavart állapothoz.

Az ábráról azonnal látszik, hogy az A és B, illetve a C és a D spiniránybba kondenzált Holstein-Primakoff bozonok megint egy-egy négyszög alrács elrendezést alkotnak, melyhez a $\gamma_x^{\mathrm{sq}}(q) = \cos\frac{q_y}{2}\cos\frac{q_z}{2}$ struktúrájú II.2.24 Bogoliubov-mátrix tartozik. A további alrácspárok már valódi háromdimenziós struktúrát alkotnak, mely alaposabb vizsgálatából látható, hogy megint négy darab

$$M^{\mathrm{diam}}(q) = 4JM\begin{bmatrix} 1 & \gamma^{\mathrm{diam}}(q) \\ -\gamma^{\mathrm{diam}}(q) & -1 \end{bmatrix}, \tag{II.2.29}$$

2×2-es mátrixra esik szét, melyek a

$$\gamma^{\mathrm{diam}}(\mathbf{q}) = \frac{1}{4}\left(e^{i\frac{1}{4}(q_x+q_y+q_z)} + e^{i\frac{1}{4}(q_x-q_y-q_z)} + e^{i\frac{1}{4}(q_y-q_x-q_z)} + e^{i\frac{1}{4}(q_z-q_x-q_y)}\right) \tag{II.2.30}$$

gyémántrács elrendezéshez tartoznak. A II.2.29 Bogoliubov-mátrix a

$$\frac{E_{\mathrm{diam}}^{(2)}}{N_s} = -0.293JM\,, \tag{II.2.31}$$

energiakorrekciót adja, melyekből a $\vartheta = \pi/2$ konfigurációban a kvantumfluktuációkból származó teljes energiakorrekció:

$$\frac{E_{\vartheta=\pi/4}^{(2)}}{N_s} = 2\frac{E_{\mathrm{sq}}^{(2)}}{N_s} + 4\frac{E_{\mathrm{diam}}^{(2)}}{N_2} = -1.804\,JM\,. \tag{II.2.32}$$

Az így kapott energiakorrekció nem csak, hogy a $\vartheta = 0$-nál, de a ϑ többi értékénél is nagyobb energiát ad.

2.1.3. A másodszomszéd kölcsönhatással kiterjesztett modell

A spinhullámszámolás során az eredeti II.2.1 modell sorfejtése során elhanyagolt bizonyos magasabb rendű tagjait figyelembe vehetjük egy effektív másodszomszédkölcsönhatással, mely J_2 csatolása $1/M$ nagyságrendű, mely kiterjesztéssel a teljes Hamilton-operátor a következő:

$$H^{\mathrm{ext}} = H + J_2\sum_{\langle\langle r,r'\rangle\rangle}\sum_{\alpha,\beta} S_\beta^\alpha(r)S_\alpha^\beta(r')\,. \tag{II.2.33}$$

ahol a második tagban szereplő $\langle\langle r, r'\rangle\rangle$-re vett összegzés a másodszomszédokon fut végig. Tehát a II.2.33 kiterjesztett modellben minden rácsponthoz 12 első- és 6 másodszomszédot kell figyelembe vennünk.

Egészen addig míg $J_2 \ll J$ valószínűsíthetjük, hogy a II.2.33 kiterjesztett modell és az eredeti II.2.1 modell alapállapota megegyezik, így a számolás során biztonsággal feltételezhetjük, hogy az effektív modell alapállapota a II.2.4 helikális állapotok között kereshető. Ezen feltételezést felhasználva a II.2.3 klasszikus energiához hasonlóan az új modell klasszikus energiáját is meghatározhatjuk, mely

$$\frac{E_{\text{ext}}^{(0)}(\vartheta)}{N_s} = \left(3 - \sin^2\vartheta\right) J_2 M^2 \,. \tag{II.2.34}$$

nem nulla energiát eredményez. A J_2 előjelétől függően a $\vartheta = 0$ vagy a $\vartheta = \pi/2$ állapot választódik ki alapállapoti konfigurációnak. A J_2 csatolás értékét a legegyszerűbben úgy becsülhetjük meg, ha megköveteljük, hogy a kiterjesztett modell vezető rendben visszaadja az eredeti modell eggyel nagyobb rendjének a II.2.4a ábrán található energiáját. Az illesztéshez vegyük az előzőleg kapott energia II.2.4b ábrán látható Fourier-felbontását, így a

$$J_2^{\text{eff}} = \frac{2e_1}{M^2} = -0.086\frac{J}{M} \tag{II.2.35}$$

választással a II.2.33 energia közel azonos lesz a II.2.22 energiával. Tehát az illesztésből adódóan J_2 egy ferromágneses csatolás. Ezzel a választással a II.2.34 szintén a $\vartheta = 0$ triviális alapállapoti konfigurációt adja.

Az előző fejezetben bemutatott számolást elvégezve kiderül, hogy a II.2.23 Bogoliubov-mátrix a

$$M_\nu^{\text{ext}} = M_\nu^{\text{sq}} + M^{\text{NNN}} \,, \tag{II.2.36}$$

helyettesítéssel, ahol

$$M^{\text{NNN}} = -6J_2 M \begin{bmatrix} \bar{\gamma}^{\text{NNN}}(q) & 0 \\ 0 & -\bar{\gamma}^{\text{NNN}}(q) \end{bmatrix} , \tag{II.2.37a}$$

$$\bar{\gamma}^{\text{NNN}}(q) = 1 - \frac{\cos q_x + \cos q_y + \cos q_z}{3} \,, \tag{II.2.37b}$$

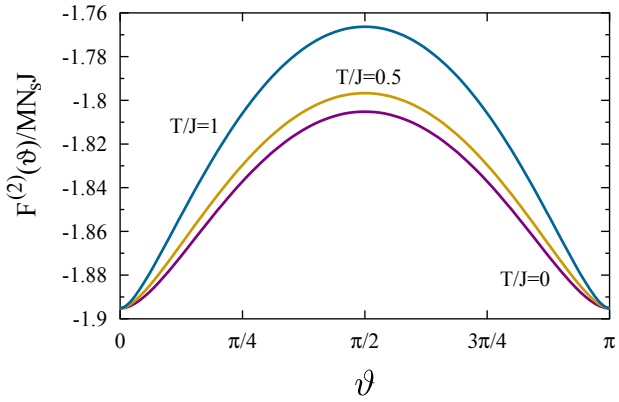
a korábban levezetett összefüggéseink érvényesek maradnak. A II.2.37a Bogoliubov-mátrix diagonális szerkezete ferromágneses kölcsönhatásra utal. A Bogoliubov-mátrix a II.2.37a egyenlettel megadott ferromágneses taggal való kiterjesztésével a

$$\omega_\nu^{\text{ext}}(\mathbf{q}) = M\sqrt{[4J - 6J_2\bar{\gamma}^{\text{NNN}}(\mathbf{q})]^2 - \left[4J\gamma_\nu^{\text{sq}}(\mathbf{q})\right]^2} \tag{II.2.38}$$

spektrumot adja. Az így kapott spektrum (II.2.5b ábra) egyetlen lényeges különbséget mutat az eredeti spektrumhoz képest (II.2.5a ábra), mégpedig: Γ és X magas szimmetriájú pontok között eredetileg lapos sáv már valódi háromdimenziós szerkezetet mutat. Továbbá $J \ll |J_2|$ esetén a II.2.38 diszperzió a ferromágneses rendszerekre jellemző $\omega_\nu \propto |q|^2$ függést mutatja a Γ pont körül, míg a $|q| \leq \sqrt{J/J_2}$ közelében, az antiferromágneses rendszereknél megszokott, lineáris függést.

2.1.4. A $\vartheta = 0$ konfiguráció stabilitásvizsgálata véges hőmérsékleten

Ebben a fejezetben a $\vartheta = 0$ triviális konfigurációjának stabilitásvizsgálatát fogom elvégezni véges hőmérsékleten. Ehhez a helikális állapotokra vonatkozó szabadenergiát és a $\vartheta = 0$ konfigurációhoz tartozó alrácsmágnesezettséget fogom felhasználni.



II.2.6. ábra. A helikális állapot szabadenergiája különböző hőmérséklet értékek mellett. A $T/J = 1$ (kék) és a $T/J = 0.5$ (arany) hőmérsékletekhez tartozó görbéket egy hőmérséklet függő konstanssal való eltolással illesztettem a $T/J = 0$ (magenta) görbéhez. Jól látható, hogy az egyes görbék a $\vartheta = 0$ érték mellett veszik fel a minimumukat. Az ábra adatait a $J_2/J = -0.086$ érték mellett határoztam meg.

Egy adott rendszer különböző állapotainak szabadenergiáinak összehasonlításából megállapíthatjuk, hogy az adott hőmérsékleten melyik állapot lesz a rendszer alapállapota. A II.2.23 Bogoliubov-mátrix diagonalizálását követően a II.2.20 (fluktuációkban) másodrendű Hamilton-operátor diagonalizálható. A Hamilton-operátor így kapott alakja már $\{\omega_i(q)\}$ frekvenciájú harmonikus-oszcillátorok összegeként írható fel, ahonnan a helikális állapotok

$$\frac{F^{(2)}(\vartheta,T)}{N_s} = \frac{E^{(2)}(\vartheta)}{N_s} - k_B T \sum_i \int_{\mathrm{BZ}} \frac{d^3q}{32\pi^3} \ln\left(1 - e^{-\beta\omega_i(q)}\right) \tag{II.2.39}$$

szabadenergiáját közvetlenül megkaphatjuk[93] (k_B a Boltzmann állandó és $\beta = 1/k_B T$ inverz hőmérséklet). A II.2.6 ábrán különböző hőmérsékletekre meghatároztam a II.2.39 szabadenergiát. Az egyes görbék összehasonlíthatóságának érdekében a nulla hőmérséklettől különbözők egy (T függő) ϑ-ban konstans érték segítségével rátoltam a II.2.4 ábrán látható referencia görbe megfelelő pontjaira.

Az ábrán látható, hogy a $\vartheta = 0$ konfiguráció a hőmérséklet növelésével a rendszer alapállapota marad. A $\vartheta = 0$ konfiguráció a termikus fluktuációval szemben tanúsított viselkedéséből következően (a modell érvényességi körén belül) ez a rendszer stabil alapállapota.

A $\vartheta = 0$ konfiguráció alrácsmágnesezettsége véges hőmérsékleten

A feltételezett klasszikus spinállást a spinhullámszámolás magasabb rendjében megjelenő fluktuációk megváltoztatják, mely mértékét a II.2.15b egyenletben definiált $\mu_{r,\alpha}$ adja. Továbbá a számolás során végig feltételeztük, hogy az egyes rácsponton megjelenő, a vélt rendeződési irányra merőleges, kvantumfluktuációk betöltési számának várható értéke kellően alacsony ahhoz, hogy a II.2.16 közelítést elvégezhessük. Így a kapott eredményeink megbízhatóságának határt szab, a $\langle\mu_{r,\alpha}\rangle \ll M$ vagy tágabb értelemben a $\langle\mu_{r,\alpha}\rangle \simeq M$ felső korlát.

A kvantumfluktuációk jelenlétében az $r \in \Lambda_A$ alrács mágnesezettségét az I.2.57a egyenlet várható értékének vételével határozhatjuk meg, melyből

$$\left\langle S_A^A(r)\right\rangle = M - \langle\mu_{r,A}\rangle \ , \tag{II.2.40a}$$

hasonlóan az $r \in \Lambda_B$ alrács mágnesedzettségét is megkaphatjuk

$$\left\langle S_B^B(r)\right\rangle = M - \langle\mu_{r,B}\rangle \ . \tag{II.2.40b}$$

A II.2.40a és a II.2.40b egyenletek kiértékeléséhez vezessük be az

$$\sum_k M_{j,k}(q) T_{k,i}(q) = \omega_i T_{j,i}(q) \tag{II.2.41}$$

egyenlettel definiált

$$T(q) = \begin{pmatrix} U(q) & -V(q) \\ -V(q) & U(q) \end{pmatrix} \tag{II.2.42}$$

transzformációs mátrixot. Az ily módon definiált T mátrix egyes oszlopai a II.2.23 Bogoliubov-mátrix egyes sajátvektorait tartalmazzák (az első oszlop a legnagyobb sajátértékhez tartozó sajátvektort, majd ezt követően csökkenő sorrendben a többit). Így könnyen belátható, hogy a

$$U(q)U^{\dagger}(q) - V(q)V^{\dagger}(q) = \mathbb{I}_{6\times 6}\,, \tag{II.2.43a}$$

$$V^{(}q)U^{*}(q) - U^{\dagger}(q)V^{*}(q) = \mathbb{O}_{6\times 6} \tag{II.2.43b}$$

feltételek teljesülése mellett a T mátrix egy Bogoliubov-transzformáció, azaz diagonalizálja a II.2.20 Hamilton-operátort[93], mely kvázirészecskéi

$$\tilde{\Phi}_q = U(q)^{\dagger}\Phi_q + V^{\dagger}(q)\Phi^{\dagger}_{-q}\,, \tag{II.2.44a}$$

$$\tilde{\Phi}^{\dagger}_{-q} = U^{T}(q)\Phi^{\dagger}_{-q} + V^{T}(q)\Phi_q\,. \tag{II.2.44b}$$

Az újonnan bevezetett jelölések segítségével az $r \in \Lambda_A$ alrács mágnesezettségét a következő alakba írhatjuk

$$M - \langle \mu_{r,A} \rangle = M - \sum_{\alpha\in\{B,C,D\}} \sum_{m=1}^{12} \int_{\mathrm{BZ}} \frac{\mathrm{d}q}{32\pi^3} T^{*}_{\alpha,m}(q) T_{\alpha,m}(q)\, C_m(q)\,, \tag{II.2.45}$$

ahol

$$C_m(q) = \begin{cases} \left\langle \tilde{\Phi}^{\dagger}_m(q)\tilde{\Phi}_m(q) \right\rangle, & \text{ha } m = 1,\ldots,6, \\ 1 + \left\langle \tilde{\Phi}^{\dagger}_m(q)\tilde{\Phi}_m(q) \right\rangle, & \text{ha } m = 7,\ldots,12. \end{cases} \tag{II.2.46}$$

A T transzformáció diagonalizáló tulajdonságából fakadóan a C vektorban szereplő termikus várhatóértékek az adott kvázirészecskékhez tartozó bozon betöltési számmal helyettesíthetőek, mely minden paramétere ismert.

A $\vartheta = 0$ triviális állapotban a II.2.23 Bogoliubov-mátrix analitikusan diagonalizálható, így ebben az esetben ismerjük a II.2.42 transzformáció explicit alakját és a másodszomszéd kölcsönhatással kiterjesztett II.2.33 modell II.2.38 spektrumát. Tehát a korábbi számolásokból adódóan minden a rendelkezésünkre áll ahhoz hogy meghatározzuk a kvantumfluktuációk okozta

$$\langle \mu_{r,A} \rangle = \sum_{\nu=x,y,z} \int_{\mathrm{BZ}} \frac{\mathrm{d}^3 q}{32\pi^3} \left\{ \frac{4JM}{\omega^{\mathrm{ext}}_{\nu}(q)} \left[n_{\nu}(q) + \frac{1}{2} \right] - \frac{1}{2} \right\} \tag{II.2.47}$$

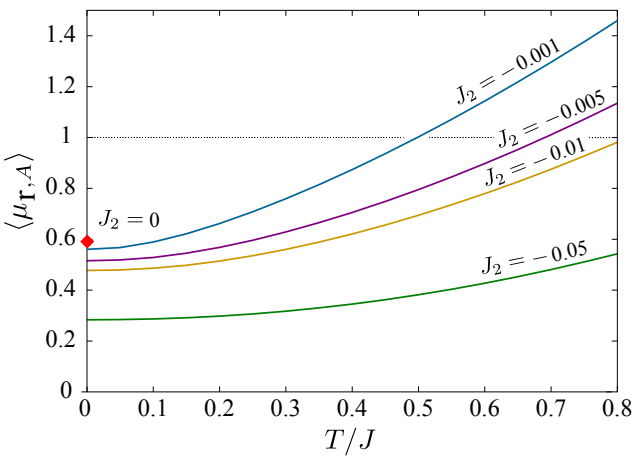
rövidülését az $r \in \Lambda_A$ alrács mágnesezettségnek, ahol

$$n_{\nu}(q) = \frac{1}{\exp(\omega^{\mathrm{ext}}_{\nu}(q)/T) - 1}\,. \tag{II.2.48}$$

Nulla hőmérsékleten a II.2.44 kvázirészecskék betöltése nulla, azaz $n_{\nu}(q) = 0$, így a $C_m(q) = 1$ ha $m = 7,\ldots,12$, ellenben nulla. Továbbá $J_2 = 0$ csatolás esetén

$$\langle \mu_{r,A} \rangle\big|_{T=0} = \frac{1}{2} \sum_{\nu} \int_{\mathrm{BZ}} \frac{\mathrm{d}^3 q}{32\pi^3} \left[\frac{1}{\sqrt{1 - \left|\gamma^{\mathrm{sq}}_{\nu}(q)\right|^2}} - 1 \right] \simeq 0.590 \tag{II.2.49}$$

eredményre vezet, mely a nem kondenzálódott B, C, D irányokban lévő Holstein-Primakoff bozonok azonos, $\gamma^{\mathrm{sq}}_{\nu}(q)$ sakktábla elrendeződéshez tartozó, rövidülést tartalmazzák. Az egyes rövidülések várható értékének a



II.2.7. ábra. A J_2 másodszomszéd kölcsönhatással kiterjesztett modellben a spinrövidülés hőmérséklet függése. A $J_2 = 0$ értéke esetén a $T \neq 0$ hőmérsékleten a spinrövidülés divergál, így csak a $T = 0$ pontban jeleztem az értékét, ahol is 0.590-cel egyezik meg. Valamint különböző $J_2 \neq 0$-ra ábrázoltam a spinrövidülés hőmérséklet függését.

$0.590/3 \simeq 0.197$ értéke jó összhangban van az irodalomban található értékekkel[93]. Az $M = 1$ nagyságához viszonyítva a 0.590-nek adódott rövidülés meglehetősen nagy ahhoz, hogy nyugodt szívvel megbízzunk a II.2.16 közelítésből származó eredményekben, azonban a J_2 csatolás II.2.35 egyenletben becsült $J_2^{\text{eff}} = -0.086J$ értékére $\langle \mu_{r,A} \rangle < 0.1$ már elegendően kicsi.

A $J_2 = 0$ esetben a II.2.47 integrál csak $T = 0$ hőmérsékleten lesz véges, mely azzal magyarázható, hogy nullától különböző, tetszőleges hőmérsékleten a II.2.5a ábrán látható spektrum nulla energiás tartományában, energia befektetés nélkül, végtelen sok, nulla energiás, úgynevezett zérus-módust kelthetünk, mely elrontja az integrál konvergenciáját. A spinrövidülés a hőmérsékletváltozásra mutatott ekkora érzékenysége összhangban van a Mermin-Wagner-Hohenberg tétellel[106,107], hiszen az előző fejezetben bemutattak alapján, a paraméterek ezen értéke mellett, a teljes rendszer független, kétdimenziós rendszerekké esik szét, azonban a tétel szerint véges hőmérsékleten két dimenzióban nem alakulhat ki hosszútávú rend. Így tehát a $\vartheta = 0$ konfigurációt a $J_2 = 0$ esetben csak $T = 0$ mellett feltételezhetjük alapállapoti konfigurációnak.

Véges hőmérsékleten és tetszőleges $J_2 \neq 0$ csatolási állandó esetén a II.2.47 egyenlet numerikus kiértékeléséből adód rövidülést a II.2.7 ábra szemlélteti, melyből látható, hogy J_2 növelésével a spinhullám számolás egyre jobban önkonzisztens közelítés lesz. A másodszomszéd kölcsönhatás II.2.5b ábrán illusztrált gap nyitó szerepének hatására a hőmérséklet növelése során nem jellennek meg zérus-módusok, valamint az extra különhatások bevételével a modell már valódi háromdimenziós rendszerként viselkedik. Így a $\vartheta = 0$ konfigurációt $J_2 \neq 0$ értéke mellett véges hőmérsékleten is feltételezhetjük alapállapoti konfigurációnak.

Összegzés

Az előző fejezetben a spin-hullám számolás keretein belül elvégzett az fcc rácsra tett su(4) szimmetrikus antiferromágneses Heisenberg-modell véges hőmérsékletű vizsgálatát. A spin-hullám számolás első lépéseként meghatároztam a klasszikus alapállapoti konfigurációt. A kapott konfigurációk közül kiválasztottuk a kitüntetett szerepet játszó ún. helikális állapotokat és a továbbiakban az állapotteret ezekre leszűkítve folytattuk a számolást. Valamint az egyes helikális állapotok kísérleti beazonosíthatóságához meghatároztuk a hozzájuk tartozó spin-spin korrelációs függvényeket.

A spin-hullám számolás második lépéseként figyelembe vettem a klasszikus rendeződést befolyásoló kvantum, illetve termikus fluktuációk vezető rendjéből adó járulékot. A kvantum fluktuációk hatására, a klasszikus szinten ekvivalens helikális állapotok közül a triviális állapot választódott ki az alapállapoti konfigurációnak.

Ezt a jelentséget az irodalomban *order-by-disorder* néven emlegetik. A termikus fluktuációk figyelembevétele viszont rámutatott arra, hogy a triviális rendeződés véges hőmérsékleten nem stabil, mely abból fakad, hogy a rács ekkor kvázi két dimenziós alrácsokra esik szét.

A fluktuációk magasabb rendjének figyelembevétele egy, a másodszomszédok közötti effektív ferromágneses csatolásra vezetett. Az ily módón származtatott modellben a triviális állapot már valódi háromdimenziós struktúrát mutat, így véges hőmérsékleten is stabil alapállapot marad.

Függelék

A. Átlagos elérési idő

Definiáljuk az i állapot elérési idejét a következőképpen

$$T_i^0 = \min\{t \geq 0 : X_t = i\}\,. \tag{A.1}$$

Sztochasztikus folyamatok esetén a T_i^0 is egy sztochasztikus változó, így annak értéke helyett a várhatóértékét vizsgálhatjuk, ehhez vezessük be a gráf adott i pontjából indított folyamat ($X_0 = i$), j állapotba való $\mathbb{E}_i T_j^0$ átlagos elérési idejét, melyet a következő tétel segítségével határozhatunk meg.

A.1. *Tétel.* *A $\mathbb{E}_i T_j^0$ átlagos elérési idő a*

$$\mathbb{E}_i(T_j^0) = \begin{cases} 0 & \text{ha } i = j \\ 1 + \sum\limits_k \mathbb{E}_k(T_j^0) W_{k,i} & \text{ha } i \neq j \end{cases} \tag{A.2}$$

lineáris egyenletrendszer minimális, nem negatív megoldása.

Bizonyítás. A tétel első felének bizonyítása triviális, hiszen ha $i = j$, akkor $T_j^0 = 0$ és a konstans nulla várhatóértéke is nulla, így következik, hogy $\mathbb{E}_i(T_i^0) = 0$. A tétel második felének bizonyításához használjuk fel I.1.5 Markov tulajdonságból következő

$$\mathbb{E}_i(T_j^0 | X_1 = k) = 1 + \mathbb{E}_k(T_j^0) \tag{A.3}$$

azonosságot, mely minden $X_0 \neq j$ kezdőállapotú folyamatra igaz. Így $i \neq j$ esetén

$$\begin{aligned} \mathbb{E}_i(T_j^0) &= \sum_{t=1}^{\infty} t\,\mathbf{P}(T_j^0 = t | X_0 = i) = \sum_{t=1}^{\infty} \sum_{k\in\Omega} t\,\mathbf{P}(T_j^0 = t | X_1 = k)\mathbf{P}(X_1 = k | X_0 = i) = \\ &= \sum_{k\in\Omega} \underbrace{\sum_{t=1}^{\infty} t\,\mathbf{P}(T_j^0 = t | X_1 = k)}_{=\mathbb{E}_i(T_j^0 | X_1 = k)} \mathbf{P}(X_1 = k | X_0 = i) = \sum_{k\in\Omega} (1 + \mathbb{E}_k(T_j^0)) W_{k,i} = \\ &= 1 + \sum_k \mathbb{E}_k(T_j^0) W_{k,i}\,. \end{aligned} \tag{A.4}$$

□

Az A.1 tétel a következő szemléletes jelentéssel bír; A j állapot átlagos elérési ideje egy $X_0 = i$ állapotból megadható, úgy hogy a kezdő állapotból egy időlépés alatt átmegyünk egy k állapotba, mely k-ra átlagolunk, majd onnan átlagosan $\mathbb{E}_k(T_j^0)$ idő alatt érjük el a kívánt j állapotot.

Továbbá az A.1 tételből következik, hogy az átlagos első visszatérési idő (pozitív elérési ideje a kezdőállapotnak), meghatározható a következőképpen

$$\mathbb{E}_i(T_i) = 1 + \sum_k \mathbb{E}_k(T_i^0) W_{k,i} \,. \tag{A.5}$$

B. A Hubbard-modell $n_i = M$ és $U >> t$ effektív modelljének származtatása

Ebben a fejezetben az $n_i = 1$ egyszeres betöltés és $\alpha, \beta \in \{\uparrow, \downarrow\}$ esetben alkalmazott másodrendű perturbációszámítás segítségével bemutatom, hogy az I.2.28 Heisenberg-modell megfeleltethető az I.2.36 Hubbard-modell egy $U \gg t$ alacsony energiás határesetének.

Sokrészecske rendszerek vizsgálata során az állapottér exponenciálisan növekvő mérete miatt a valós fizikai rendszer megoldása során közelítésekre van szükségünk, hiszen ha csak egy N rácspontot tartalmazó, $S = 1/2$ Hubbard-modellt veszünk, akkor az állapottér 4^N dimenziós. Míg, ha a rendszer minden rácspontjára bevezetünk egy taszító on-site potenciált, akkor $n_i = 1$ betöltés mellett már csak 2^N különböző konfiguráció létezik. Ezen a lényegesen kisebb állapottéren a rendszer dinamikáját egy perturbációszámítás segítségével meghatározható effektív Hamilton-operátor vezérli. A perturbációszámítás elvégzéséhez a Schrieffel-Wolff transzformáció használjuk

$$H\,|\Psi\rangle = E\,|\Psi\rangle \quad \rightarrow \quad \tilde{H}\left|\tilde{\Psi}\right\rangle = e^{-S} H e^{S} e^{-S}\,|\Psi\rangle = E e^{-S}\,|\Psi\rangle = E\left|\tilde{\Psi}\right\rangle \,, \tag{B.1}$$

ahol S generálja a bázistranszformációt. Legyen $H = H_0 + \lambda H_1$ alakú, ahol a $H_0\left|\Psi_n^{(0)}\right\rangle = E_n^{(0)}\left|\Psi_n^{(0)}\right\rangle$ sajátértékprobléma ismert, ekkor az eltranszformált rendszerben a Hamilton-operátor

$$\begin{aligned}\tilde{H} &= e^{-\lambda S} H e^{\lambda S} = \left[1 - \lambda S + \frac{\lambda^2}{2} S^2 + \vartheta(\lambda^3)\right] H \left[1 - \lambda S + \frac{\lambda^2}{2} S^2 + \vartheta(\lambda^3)\right] = \dots \\ &= H_0 + \lambda\,(H_1 + [H_0, S]) + \lambda^2 \left([H_1, S] + \frac{1}{2}\,[[H_0, S], S]\right) + \vartheta(\lambda^3) \,.\end{aligned} \tag{B.2}$$

Az elsőrendű tag eltüntethető, S következő választásával:

$$[H_0, S] = -H_1 \tag{B.3}$$

Az S transzformációnak a B.3 egyenletben előírt hatásával a B.2 eltranszformált Hamilton-operátor

$$\tilde{H} = H_0 + \frac{\lambda^2}{2}[H_1, S] + \vartheta(\lambda^3) \tag{B.4}$$

már csak λ^2 rendben tartalmaz offdiagonális tagokat.

A Hubbard-modell $U \gg t$ határesetében a H_{kh} dominál, mely sajátállapotai ismertek az $\langle n_i \rangle = 1$ esetben, így a perturbációszámításban, mint szabad Hamilton-operátor kezelhetjük

$$H_0 = H_{\mathrm{kh}} = U \sum_i n_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow} \tag{B.5}$$

és a hozzá tartozó perturbáció pedig

$$\lambda H_1 = H_{\mathrm{kin}} = -t \sum_{<i,j>} f_{i,\alpha}^{\dagger} f_{j,\alpha}^{\dagger} \,. \tag{B.6}$$

A szabad Hamilton-operátor sajátállapotai az úgynevezett $|n\rangle, |m\rangle \ldots$ neutrális állapotok, melyekben szigorúan egy részecske található rácspontonként (2^N különböző konfiguráció), így a hozzájuk tartozó $E_0^{(n)} = E_0^{(m)} = \ldots$ sajátértékek nullák. A B.4 egyenlet alapján

$$\langle n| H_{\text{eff}} |m\rangle = \frac{t^2}{2} \langle n| (H_{\text{kin}} S - S H_{\text{kin}}) |m\rangle = \frac{t^2}{2} \sum_j \left[\langle n| H_{\text{kin}} |j\rangle \langle j| S |m\rangle - \langle n| S |j\rangle \langle j| H_{\text{kin}} |m\rangle \right] \tag{B.7}$$

ahol $|j\rangle$ kétszeres betöltésű bázisok (melyek energiája $E_j^{(0)} = U$), továbbá a B.3 egyenletből kifolyólag

$$\langle n| H_{\text{kin}} |j\rangle = \langle n| S |j\rangle (E_j^{(0)} - E_n^{(0)}), \tag{B.8}$$

mely visszahelyettesítéséből

$$\begin{aligned} \langle n| H_{\text{eff}} |m\rangle &= \frac{t^2}{2} \sum_j \left[\langle n| H_{\text{kin}} |j\rangle \left(-\frac{1}{U} \langle j| H_{\text{kin}} |n\rangle \right) - \frac{1}{U} \langle n| H_{\text{kin}} |j\rangle \langle j| H_{\text{kin}} |n\rangle \right] = \ldots = \\ &= \frac{t^2}{U} \sum_{\langle i,j\rangle} \sum_{\alpha,\beta} \langle n| f_{i,\alpha}^\dagger f_{i,\beta} f_{j,\beta}^\dagger f_{j,\alpha} |m\rangle , \end{aligned} \tag{B.9}$$

aminek a hatása a leszűkített altérben megegyezik a következő effektív Hamilton-operátoréval

$$H_{\text{eff}} = \frac{t^2}{U} \sum_{\langle i,j\rangle} \sum_{\alpha,\beta} f_{i,\alpha}^\dagger f_{i,\beta} f_{j,\beta}^\dagger f_{j,\alpha} . \tag{B.10}$$

Mivel a levezetés csak formálisan függött az $n_i = M$ betöltési szám és a S spin nagyságának konkrét értékétől, így a kapott eredmény általános M-re és S-re is elvégezhető. Továbbá nem használtuk ki az $\{f_{i,\alpha}\}$ és $\{f_{i,\alpha}^\dagger\}$ fermionoperátorok között fennálló kommutációs relációt, így általánosítható az előző levezetés és megmutatható, hogy a rácspontok tetszőleges $M \in \mathbb{Z}^+$ várható betöltése esetén a tetszőleges spinű részecskét tartalmazó Hubbard-modell $U \gg t$ alacsony energiás határesete a következő alakban írható:

$$H_{\text{eff}} = \frac{t^2}{U} \sum_{<i,j>} \sum_{\alpha,\beta} c_{i,\alpha}^\dagger c_{i,\beta} c_{j,\beta}^\dagger c_{j,\alpha} \tag{B.11}$$

ahol $\{c_{i,\alpha}\}$ az eredeti modelltől függően $\{f_{i,\alpha}\}$ fermion vagy $\{b_{i,\alpha}\}$ bozon operátorokat jelölnek és az így származtatott effektív modell az egyes rácspontokon M részecskét tartalmazó állapotokra van értelmezve.

C. Schwinger-reprezentáció

Ebben a fejezetben bemutatom az I.2.28 Heisenberg-modellnek egy lehetséges, úgynevezett Schwinger-reprezentációját, melyben a spinoperátorok két betöltési szám operátor szorzataként vannak reprezentálva. A Schwinger-reprezentációnak köszönhetően az egyes rácspontok elemi mágnesességére úgy gondolhatunk, mint az ott lévő bozonok/fermionok spinje, és a Heisenberg-modellt, mint sokrészecskerendszer kezelhetjük. A reprezentáció bemutatását az

$$H_{\text{Heisenberg}}^{N=2} = J \sum_{<i,j>} \sum_{a\in\{x,y,z\}} S_a(i) S_a(j) \tag{C.1}$$

SU(2) szimmetrikus Heisenberg-modellből kezdem, majd a kapott eredményt kiterjesztem tetszőleges SU(N)-re.

A C.1 modellben szereplő $2^2 - 1 = 3$ darab független $\{S_a(i)\}$ spin-operátor generálja az SU(2) csoportot, azaz a

$$[S_a(i), S_b(j)] = i\varepsilon_{a,b,c}\delta_{i,j}S_c(i) \tag{C.2}$$

Lie-algebrát követik. A spin-operátorok minden olyan lehetséges kifejtését lehetséges reprezentációnak nevezzük, melyben továbbra is eleget tesznek az I.2.26 kommutációs relációnak. Így a reprezentáció egy lehetséges módja a

$$S_a(i) = \sum_{\alpha,\beta=1}^{2} c^\dagger_{i,\alpha}\frac{\sigma^a_{\alpha,\beta}}{2}c_{i,\beta} \tag{C.3}$$

Schwinger-reprezentáció[223–226], ahol a $\{c^\dagger_{i,\alpha}\}$ és $\{c_{i,\alpha}\}$ operátorok egyaránt lehetnek fermion, illetve bozon statisztikájú részecskék keltő és eltüntető operátorai, valamint $\{\sigma^a\}$ a szokásos Pauli-mátrixok a

$$\left[\frac{\sigma^a}{2}, \frac{\sigma^b}{2}\right] = i\varepsilon_{a,b,c}\frac{\sigma^c}{2} \tag{C.4}$$

kommutációs relációval.

A.10. *Példa.* *Határozzuk meg az $S_x(i)$ és $S_y(j)$ operátorok kommutációs relációját a C.3 Schwinger-fermion reprezentáció mellett. Látható, hogy ha $i \neq j$ akkor a kommutátor automatikusan nullát ad, így csak az $i = j$ esettel foglalkozok, ami a következő*

$$[S_x, S_y] = \left[\sum_{\alpha,\beta} f^\dagger_\alpha \frac{\sigma^x_{\alpha,\beta}}{2} f_\beta, \sum_{\mu,\nu} f^\dagger_\mu \frac{\sigma^y_{\mu,\nu}}{2} f_\nu\right] = \frac{i}{2}\left(f^\dagger_x f_y f^\dagger_y f_x - f^\dagger_y f_x f^\dagger_x f_y\right) = \ldots = \frac{i}{2}\left[f^\dagger_x f_x - f^\dagger_y f_y\right] = iS_z\,. \tag{C.5}$$

A spin-operátorok C.3 Schwinger-reprezentációjával kifejezve a C.1 Hamilton-operátor már nem tartalmazza a reprezentációban segítségül hívott Pauli-mátrixokat, valamint fermion és bozon esetben is a következő alakra hozható

$$H^{N=2}_{\text{Heisenberg}} = J' \sum_{\alpha,\beta=1}^{2} c^\dagger_{i,\alpha} c_{i,\beta} c^\dagger_{j,\beta} c_{j,\alpha} + \text{konst.}\,, \tag{C.6}$$

ahol a bevezetett konstanstól a továbbiakban elfeledkezünk és J', a reprezentációtól függően, az eredeti J csatolási állandó átskálázottja.

A.11. *Példa.* *Határozzuk meg a C.6 Hamilton-operátorban szereplő konstans értékét a C.3 Schwinger-fermion reprezentációban. Felhasználva a Pauli-mátrixok*

$$\sum_a \sigma^a_{\alpha,\beta}\sigma^a_{\mu,\nu} = 2\delta_{\alpha,\nu}\delta_{\beta,\mu} - \delta_{\alpha,\beta}\delta_{\mu,\nu} \tag{C.7}$$

tulajdonságát és a fermion-operátorok szokásos kommutációs relációját a következőt kapjuk

$$\begin{aligned} H^{N=2}_{Hesenberg}(f) &= J\sum_{\langle i,j\rangle}\sum_{a\in\{x,y,z\}}\sum_{\alpha,\beta}^{2}\sum_{\mu,\nu=1}^{2}\left(f^\dagger_{i,\alpha}\frac{\sigma^a_{\alpha,\beta}}{2}f_{i,\beta}\cdot f^\dagger_{j,\mu}\frac{\sigma^a_{\mu,\nu}}{2}f_{j,\nu}\right) = \frac{J}{4}\sum_{\substack{\langle i,j\rangle\\ \alpha,\beta}}\left(2f^\dagger_{i,\alpha}f_{i,\beta}f^\dagger_{j,\beta}f_{j,\alpha} - f^\dagger_{i,\alpha}f_{i,\alpha}f^\dagger_{j,\beta}f_{j,\beta}\right) = \\ &= \frac{J}{2}\sum_{\langle i,j\rangle}\sum_{\alpha,\beta} f^\dagger_{i,\alpha}f_{i,\beta}f^\dagger_{j,\beta}f_{j,\alpha} - \frac{J}{4}\sum_{\langle i,j\rangle} M^2\,, \end{aligned} \tag{C.8}$$

ahol $M = \sum f^\dagger_\alpha f_\alpha$ betöltési szám. Tehát ebben a reprezentációban $J' = J/2$ és a nem kiírt konstans pedig $-\frac{J}{4}L^2M^2$, ahol L a rács lineáris mérete.

Tehát az SU(2) szimmetrikus esetben az eredeti C.1 Hamilton-operátor helyett foglalkozhatunk a C.6 Hamilton-operátorral, hiszen ekvivalensek. Továbbá mindaddig amíg két különböző reprezentációból származó energiát nem akarunk összehasonlítani, addig a C.6 egyenletben szereplő konstanstól eltekinthetünk, valamint ha például csak az alapállapotban megjelenő spin-konfigurációra vagyunk kiváncsiak, akkor a csatolási állandó átskálázásától is eltekinthetünk, így ez esetben élhetünk a

$$H^{N=2}_{\text{Heisenberg}} = J \sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{a \in \{x,y,z\}} S_a(i) S_a(j) = J \sum_{\alpha,\beta=1}^{2} c^{\dagger}_{i,\alpha} c_{i,\beta} c^{\dagger}_{j,\beta} c_{j,\alpha} \,. \tag{C.9}$$

helyettesítéssel. Ha a Hamilton-operátor magasabb, SU(N) szimmetriával rendelkezik akkor a C.3 Schwinger-reprezentációt a következőképpen általánosíthatjuk

$$S_a(i) = \sum_{\alpha,\beta=1}^{N} c^{\dagger}_{i,\alpha} \frac{\lambda^a_{\alpha,\beta}}{2} c_{i,\beta} \tag{C.10}$$

ahol $\{\lambda^a\}$ az adott szimmetria $N^2 - 1$ generátora, mellyel a SU(N) Heisenberg-modell Hamilton-operátora[227,228]

$$H_{\text{Heisenberg}} = J \sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{a=1}^{N^2-1} S_a(i) S_a(j) = J \sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{\alpha,\beta=1}^{N} S^{\alpha}_{\beta}(i) S^{\beta}_{\alpha}(j) \,, \tag{C.11}$$

ahol már nem jelöltem az esetleges átskálázását a csatolási állandónak, valamint a megjelenő konstanst, továbbá bevezettem a

$$S^{\alpha}_{\beta}(i) = c^{\dagger}_{i,\alpha} c_{i,\beta} \tag{C.12}$$

jelölést az általánosított spin-operátorokra, melyek a

$$\left[S^{\alpha}_{\beta}(i), S^{\mu}_{\nu}(j) \right] = \delta_{i,j} \left(\delta_{\alpha,\nu} S^{\mu}_{\beta}(i) - \delta_{\beta,\mu} S^{\alpha}_{\nu}(i) \right) \,, \tag{C.13}$$

kommutációs relációt követik. Az $\{S_a\}$ és az $\{S^{\alpha}_{\beta}\}$ operátorok egyaránt csoport generátorok, míg az $\{S_a\}$ az SU(N) csoportot, addig $\{S^{\alpha}_{\beta}\}$, a véges trace-üknél fogva ($M = \sum_{\alpha} S^{\alpha}_{\alpha}$), pedig az U(N) csoportot generálják.

D. Rácspont betöltés és az SU(N) szimmetria kapcsolata

Az appendix ezen fejezetében, a 228–230 referenciákat követve, a teljesség igénye nélkül megmutatom, hogy az $\{S^{\alpha}_{\beta}\}$ operátorok nyomának M értéke, vagy ezzel ekvivalensen az egyes rácspontok M-szeres betöltöttsége, hogyan határozza meg a spin-modellhez tartozó SU(N), illetve U(N) szimmetriák reprezentációját, azaz milyen vizsgálódási alteret jelölünk ki az M értékének rögzítésével.

Vezessük be az $\{E^{\alpha}_{\beta}\}$ összevont jelölést az $\{S^{\alpha}_{\beta}\}$ U(N) generátorokra és a hozzájuk rendelt

$$A^{\alpha}_{\beta}(i) = S^{\alpha}_{\beta} - \frac{1}{N} \delta_{\alpha,\beta} M \tag{D.1}$$

trace nélküli SU(N) generátorokra, ahol

$$M = \sum_{\alpha=1}^{N} S^{\alpha}_{\alpha}(i) \,. \tag{D.2}$$

A két generátor ugyanazt a Lie-algebrát követi, mely tényt az újonnan bevezetett jelölés segítségével a következő tömör formába írhatjuk

$$\left[E^{\alpha}_{\beta}(i), E^{\mu}_{\nu}(j)\right] = \delta_{i,j}\left(\delta_{\alpha,\nu}E^{\mu}_{\beta}(i) - \delta_{\beta,\mu}E^{\alpha}_{\nu}(i)\right) , \tag{D.3}$$

továbbá a két operátor által definiált

$$H_{\text{Heisenberg}} = \sum_{\langle i,j\rangle}\sum_{\alpha,\beta=1}^{N} E^{\alpha}_{\beta}(i)E^{\beta}_{\alpha}(j) \tag{D.4}$$

Heisenberg-modell egy konstans erejéig megegyezik, így azonosnak tekintjük őket. A modell konstrukciójából fakadóan látható, hogy SU(N) szimmetrikus.

D.1. Az SU(N) és az U(N) szimmetria reprezentációja

Az SU(N) csoport irreducibilis ábrázolásait szemléltethetjük a Young-diagramok segítségével[231], mely megadja, hogy a reprezentáció egyes bázisai hogyan, hány indexes tenzorként transzformálódnak és az egyes indexek között milyen szimmetria van. Egy $T_{\alpha,\beta,\ldots,\gamma}$ mennyiséget akkor nevezünk tenzornak, ha a következőképpen transzformálódik

$$T_{a,b,\ldots,c} = \sum_{\alpha,\beta,\ldots,\gamma=1}^{N} U^{a}_{\alpha}U^{b}_{\beta}\cdots U^{c}_{\gamma}T_{\alpha,\beta,\gamma} , \tag{D.5}$$

ahol U a szimmetriacsoport egy eleme. A Young által bevezetett jelölésben a báziselemek minden α indexéhez egy $\boxed{\alpha}$ "dobozt" rendelhetünk, mely N különböző értéket vehet fel, továbbá az egyes indexek közti szimmetriát pedig a következőképpen ábrázolhatjuk: az indexek cseréjére szimmetrikus viselkedés esetén a dobozokat egymás mellé, míg antiszimmetrikus transzformációjuk esetén egymás alá írjuk. Továbbá a boxok egymás mellé helyezéséből csak olyan táblákat építhetünk, melyekben az indexek felülről lefelé csökkennek és balról jobba nem nőnek. Így az adott ábrázolásnak megfelelő összes bázist összevonva megadhatjuk a szimmetria Young-táblázatával, azaz pongyolán mondva az index nélküli, dobozok számával és elrendezésével.

A.12. *Példa.* *Határozzuk meg az SU(2) szimmetria definiáló ábrázolásból képzett kétindexes tenzorokat. Mivel a keresett tenzorok két indexesek, így két* $\boxed{}$*-ra van szükségünk, melyet egymás alá (ami az indexek antiszimmetrikus transzformációját jelöli), vagy egymás mellé (ami pedig az indexek szimmetrikus transzformációját tükrözi) írhatunk. A definiáló ábrázolás 2 dimenziós, az indexek két értéket vehetnek fel* ($\alpha \in \{2, 1\}$)*, így antiszimmetrikus irreducibilis ábrázoláshoz 1 dimenziós altér tartozik*

$$\begin{array}{|c|}\hline 2 \\ \hline 1 \\ \hline\end{array} \tag{D.6}$$

melyet azonosítható a két spin szinglet állapotával, és a szimmetrikus irreducibilis reprezentációhoz háromdimenziós altér tartozik

$$\begin{array}{|c|c|}\hline & \\ \hline\end{array} = \begin{cases} \begin{array}{|c|c|}\hline 2 & 2 \\ \hline\end{array} \\ \begin{array}{|c|c|}\hline 2 & 1 \\ \hline\end{array} \\ \begin{array}{|c|c|}\hline 1 & 1 \\ \hline\end{array} \end{cases} , \tag{D.7}$$

melyek a két spin triplet állapotainak felel meg.

A.13. *Példa.* *Határozzuk meg az SU(3) szimmetria háromindexes tenzorjait. A háromindexes tenzornak megfelelő három dobozt három féleképpen rendezhetjük el*

$$
\begin{aligned}
&\textit{antiszimmetrikus:} && \begin{array}{|c|}\hline \\ \hline \\ \hline \\ \hline\end{array} = \begin{array}{|c|}\hline 3\\ \hline 2\\ \hline 1\\ \hline\end{array}\,,\\
&\textit{kevert szimmetriájú:} && \begin{array}{|c|c|}\hline &\\ \hline &\\ \hline\end{array} = \left\{\begin{array}{|c|c|}\hline 3&3\\ \hline 2&\\ \hline\end{array}, \begin{array}{|c|c|}\hline 3&3\\ \hline 1&\\ \hline\end{array}, \begin{array}{|c|c|}\hline 3&2\\ \hline 2&\\ \hline\end{array}, \begin{array}{|c|c|}\hline 3&2\\ \hline 2&\\ \hline\end{array}, \begin{array}{|c|c|}\hline 2&2\\ \hline 1&\\ \hline\end{array}, \begin{array}{|c|c|}\hline 2&1\\ \hline 1&\\ \hline\end{array}\right\},\\
&\textit{szimmetrikus:} && \begin{array}{|c|c|c|}\hline &&\\ \hline\end{array} = \begin{array}{|c|c|c|}\hline 3&2&1\\ \hline\end{array}\,,
\end{aligned}
\tag{D.8}
$$

melyek rendre $1, 6$ *és* 1 *dimenziós ábrázolásokat jelölnek.*

Tehát az U(N) szimmetria irreducibilis reprezentációjának bázisait egy N soros Young-táblával szemléltethetjük, melyet az egyes sorokban lévő dobozok $\{\lambda_\alpha\}$ számának tudatában ismertnek tekintjük. A dobozok száma és elrendezése szabadon választott, az egyértelműség kedvéért a $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \ldots \geq \lambda_N$ egyenlőtlenséget meg szokták követelni, azaz az egyes sorokban lévő dobozok száma felülről lefele nem nőhet. Az SU(N) szimmetria irreducibilis ábrázolásában az előző N független paraméter helyett már csak $N-1$ van, hiszen az operátorok trace-rögzített (nulla), mely az ábrázolásban úgy jelentkezik, hogy a reprezentálást nem változtatva meg, minden sor doboztartalma eltolható egy $s \leq \lambda_N$ egész számmal. Az s szabad paraméter konvenció szerint λ_N szokott lenni.

A két szimmetria lehetséges reprezentációk közül a $\lambda_1 = 1$ és $\{\lambda_{i\neq 1} = 0\}$ reprezentációt fundamentális reprezentációnak nevezzük, melyben egy tetszőleges csoportelemet egy $U : \mathbb{C}^N \to \mathbb{C}^N$ dimenziós unitér operátorral reprezentálhatunk.

A.14. *Példa.* *Határozzuk meg az SU(2) szimmetria fundamentális ábrázolását. A fundamentális ábrázolást a* $\boxed{}$ *Young-tábla jelöl, mely két független báziselemet foglal magában, jelöljük ezeket a következőképpen*

$$
|\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \qquad \textit{és} \qquad |\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \tag{D.9}
$$

A választott bázisvektorok tetszőleges ortogonális kombinációja is megengedett. Ezen bázisokban az SU(2) csoportot úgy reprezentálhatjuk, mint 2×2 *-es trace nélküli unitér operátorok, melyeket előállíthatunk a*

$$
\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & i \\ -i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_x = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{D.10}
$$

Pauli mátrixok lineáris kombinációjaként.

D.2. Az SU(N) és az U(N) csoportok közös Casimir-operátorai

A szimmetria azon $\{C_n\}$ elemeit Casimir-operátornak nevezzük, mely a szimmetria minden elemével felcserélnek, ennek teljesülését elegendő csak a csoport generátorain ellenőriznünk. Tehát az SU(N) és U(N) Casimir-operátorait a

$$
\left[E^\alpha_\beta(i), C_n\right] = 0 \tag{D.11}
$$

egyenlet definiálja, mely megoldása nem egyértelmű, hiszen két Casimir-operátor összege, illetve Casimir-operátor számszorosa is eleget tesz ennek, azonban tudjuk hogy U(N) esetében N és SU(N) esetében $N-1$ független Casimir-operát van, melyek egyértelműen definiálhatunk a következőképpen:

$$C_n^E(i) = \sum_{\{\alpha\}} E_{\alpha_1}^{\alpha_2}(i) E_{\alpha_2}^{\alpha_3}(i) \cdot \dots \cdot E_{\alpha_{n-1}}^{\alpha_n}(i) E_{\alpha_n}^{\alpha_1}(i)\,, \tag{D.12}$$

ami az $n = 1$ és SU(N) esetén definíció szerint nullát ad.

Mivel minden Casimir-operát felcserél a szimmetria összes elemével (azaz a többi Casimir-operátorral is), így található olyan reprezentációs bázis ahol a Casimir-operátok számszorosai az egységoperátornak, az arányossági tényező pedig meghatározható a szimmetria reprezentációját ábrázoló Young-táblák $\{\lambda_i\}$ sorainak segítségével:

$$\left\langle C_n^E(i) \right\rangle = B_n(\lambda) - N B_{n-1}(\lambda)\,, \tag{D.13a}$$

a $\{B_n\}$ polinomokat a következő generátor segítségével határozhatjuk meg

$$1 - e^{-\phi(\lambda,z)} = \sum_{n=0}^{\infty} B_n(\lambda) z^{n+1} \tag{D.13b}$$

ahol

$$\phi(\lambda, z) = \sum_{k=2}^{\infty} a_k(\lambda) z^k \tag{D.13c}$$

és

$$a_k(\lambda) = \sum_{j=1}^{k-1} \frac{(k-1)!}{(k-j)!} b_j(\lambda), \qquad b_k(\lambda) = \sum_{l=1}^{N} \left(l_i^k(\lambda) - \rho_i^k \right) \tag{D.13d}$$

numerikus faktorok, $\rho = N - i$ független a reprezentációtól és $l_i(\lambda) = m_i(\lambda) + n - i$ az ami magában foglalja a reprezentáció választást, hiszen

$$m_i(\lambda) = \begin{cases} \lambda_i & \text{u(N) szimmetria esetén} \\ \lambda_i - \sum_i \lambda_i / N & \text{su(N) szimmetria esetén} \end{cases}. \tag{D.13e}$$

Látható, hogy a Casimir-operátorok meghatározásának procedúrája nagyon körülményes és technikai, így a fejezet hátralevő részében csak az

$$\left\langle C_2^A(i) \right\rangle = \sum_{i=1}^{N-1} \lambda_i^2 + \sum_{i=1}^{N-1} (N-i)\lambda_i - (N-1)\lambda - \frac{\lambda^2}{N} \tag{D.14}$$

su(N) másodrendű Casimir-operátorának példáján keresztül érzékeltetem a jelentőségüket, mely kifejezésében bevezettem a $\lambda = \sum_i \lambda_i$ egyszerűsítő jelölést.

D.3. A rácspont egyszeres betöltése és az su(N) szimmetria fundamentális reprezentációjának kapcsolata

A D.14 egyenlet $N = 2$ és $\lambda_i = \delta_{i,1}$ speciális esetben

$$\left\langle C_2^A(i) \right\rangle_{N=2}^{\square} = \frac{1}{2}\lambda_1(\lambda_1 + 2) = \frac{3}{2} \tag{D.15}$$

értéket veszi fel. Másrészt a Casimir-operátor D.12 definíciójából következően meg kell hogy egyezzen a

$$C_2^A(i) = \sum_{\alpha,\beta} A_\beta^\alpha(i) A_\alpha^\beta(i) = \sum_{\alpha,\beta} S_\beta^\alpha(i) S_\alpha^\beta(i) - \frac{M^2}{N} \tag{D.16}$$

operátor várhatóértékével.

A C.12 egyenletnek köszönhetően az $\{S_\beta^\alpha(i)\}$ spin-operátorokat reprezentálhatjuk fermion, illetve bozon részecskékkel, mely fermion esetben

$$\left\langle C_2^A(i) \right\rangle_{\text{fermion}} = (N+1)M - \frac{N+1}{N} M^2 \tag{D.17a}$$

és bozon esetben

$$\left\langle C_2^A(i) \right\rangle_{\text{bozon}} = (N-1)M - \frac{(N-1)}{N} M^2 \tag{D.17b}$$

a sajátértékeket adja. Melyek az $N = 2$ és $M = \sum_\alpha c_{i,\alpha}^\dagger c_{i,\alpha} = 1$ értéke mellett megegyeznek a D.15 fundamentális reprezentációban vett várható értékkel, így azt mondhatjuk, hogy $N = 2$ esetén a rácspontok $M = 1$ betöltésének választása megegyezik a spinek fundamentális ábrázolásának választásával.

Az $N = 2$ esetben bemutatott számolás magasabb szimmetria esetén is elvégezhető, ekkor azonban a többi Casimir-operátorhoz is illesztenünk kell a rácspontok átlagos betöltöttségét, mely hosszadalmas számolás már túlmutat a dolgozat keretein. Azonban bizonyítás nélkül elfogadhatjuk, hogy tetszőleges N esetén az $M = 1$, egyszeres betöltés mindig a fundamentális reprezentációnak felel meg.

Klasszikus rendeződés esetén a szimmetria generátorai közül legalább egyikének a várható értéke nem nulla.

E. Releváns Hilbert-tér tulajdonságai

Legyen $\mathcal{H}$ egy d dimenziós Hilbert-tér, $\mathcal{T}[\cdot]$ egy kvantumcsatorna, melynek a $\varrho : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ sűrűségoperátorokon való hatása megadható a K_ν Kraus-operátorok segítségével

$$\mathcal{T}[\varrho] = \sum_{\nu=1}^{D<d^2} K_\nu \varrho K_\nu^\dagger \,. \tag{E.1}$$

Válasszuk ki a Hilbert-tér egy $|\Psi\rangle$ elemét, melyre merőleges $\mathcal{H}_\perp = \{|i\rangle \in \mathcal{H} | \langle i|\Psi\rangle = 0\}$ altérbe való képzést a

$$\varrho_\perp = \mathcal{M}[\varrho] = (\mathbb{I} - |\Psi\rangle\langle\Psi|)\varrho(\mathbb{I} - |\Psi\rangle\langle\Psi|) \tag{E.2}$$

méréssel definiáljuk, ahol $\varrho_\perp : \mathcal{H} \to \mathcal{H}_\perp$. Valamint vezessük be a $|\underline{\nu}\,\rangle$ egyszerűsítő jelölést a $|\Psi\rangle$-ből a Kraus-operátorok segítségével elérhető (nem normált) tisztaállapotokra, azaz minden $\underline{\nu} = (\nu_1, \nu_2, \ldots, \nu_t)$ sorozathoz definiáljuk a következő

$$|\underline{\nu}\,\rangle = K_{\nu_t} K_{\nu_{t-1}} \ldots K_{\nu_2} K_{\nu_1} |\Psi\rangle \tag{E.3}$$

állapotot. Ezen jelölés segítségével a $\mathcal{T}[\cdot]$ csatorna t-szeri alkalmazása a $|\Psi\rangle\langle\Psi|$ kezdőállapoton a következőképpen adható meg

$$\mathcal{T}^t[|\Psi\rangle\langle\Psi|] = \sum_{\nu_1=1}^{D} \sum_{\nu_2=1}^{D} \ldots \sum_{\nu_{t-1}=1}^{D} \sum_{\nu_t=1}^{D} |\underline{\nu}\,\rangle\langle\,\underline{\nu}| \,. \tag{E.4}$$

A $|\underline{\nu}\,\rangle$-höz hasonlóan definiálhatjuk a $\mathcal{MT}[\cdot]$ feltételes dinamikához tartozó

$$|\underline{\nu}\,\rangle_{\text{cond}} = (\mathbb{I} - |\Psi\rangle\langle\Psi|)K_{\nu_t}\dots(\mathbb{I} - |\Psi\rangle\langle\Psi|)K_{\nu_1}|\Psi\rangle = |\underline{\nu}\,\rangle + \sum_{n=2}^{t+1} c_{(\nu_n,\dots,\nu_t)}(\underline{\nu})\,|\nu_n,\dots,\nu_t\rangle \tag{E.5}$$

tiszta állapotot, ahol a $c_{(\nu_n,\dots,\nu_t)}(\underline{\nu})$ kifejtési együtthatók komplex számok és a $\{(\nu_n,\dots,\nu_t)\}$ sorozatok az $\underline{\nu} = (\nu_1,\dots,\nu_t)$ sorozatból lettek kiválasztva, mely $n = t+1$ eleme definíció szerint a $|\Psi\rangle$ állapothoz tartozik. A bevezetett jelölés segítségével a $|\Psi\rangle\langle\Psi|$ állapotból indított feltételes dinamika a következőképpen adható meg

$$(\mathcal{MT})^t[|\Psi\rangle\langle\Psi|] = \sum_{\nu_1=1}^{D}\sum_{\nu_2=1}^{D}\dots\sum_{\nu_{t-1}=1}^{D}\sum_{\nu_t=1}^{D}|\underline{\nu}\,\rangle_{\text{cond}}\langle\,\underline{\nu}|_{\text{cond}}\,. \tag{E.6}$$

A $\mathcal{H}_{\text{rel}}(\mathcal{T},\Psi)$ releváns Hilbert-tér ezen jelölésekben nem más, mint az a tér, amit az összes lehetséges $|\underline{\nu}\,\rangle$ vektor kifeszít. Mivel a releváns Hilbert-tér egy invariáns altér, így minden $\sigma \in \mathcal{B}(\mathcal{H}_{\text{rel}})$ és $\sigma(t) = \mathcal{T}^t[\sigma]$ sűrűségoperátor felírható a $\sigma = \sum s_{\underline{\nu}}|\underline{\nu}\,\rangle\langle\,\underline{\nu}|$, illetve a $\sigma(t) = \sum s_{\underline{\nu}}(t)|\underline{\nu}\,\rangle\langle\,\underline{\nu}|$ alakban. Továbbá, a csatorna nem vezet ki ebből az invariáns altérből, így minden $|\Phi\rangle \in \mathcal{H}_{\perp}$ állapotra teljesülnie kell a következőnek: $\langle\Phi|\,\sigma(t)\,|\Phi\rangle = 0$.

E.1. *Tétel.* *A $\mathcal{H}_{rel}(\mathcal{T},\Psi)$ releváns Hilbert-teret nem csak a $\{|\underline{\nu}\,\rangle\}$ állapotok, hanem a $\{|\underline{\nu}\,\rangle_{cond}\}$ állapotok is kifeszítik, azaz $\mathcal{H}_{rel}(\mathcal{T},\Psi)$ és $\mathcal{H}_{rel}(\mathcal{MT},\Psi)$ megegyezik, tehát a rájuk vett projekciók is*

$$\mathbb{I}(\mathcal{T},\Psi) = \lim_{T\to\infty} supp\left[\sum_{t=0}^{T}\mathcal{T}^t[|\Psi\rangle\langle\Psi|]\right] \equiv \mathbb{I}_\Psi \equiv \lim_{T\to\infty} supp\left[\sum_{t=0}^{T}(\mathcal{MT})^t[|\Psi\rangle\langle\Psi|]\right] = \mathbb{I}(\mathcal{MT},\Psi)\,. \tag{E.7}$$

Bizonyítás. Az E.5 egyenletből következően minden $|\underline{\nu}\,\rangle_{\text{cond}}$ megadható a $|\underline{\nu}\,\rangle$ állapotok lineáris kombinációjaként, azaz $\mathbb{I}(\mathcal{MT},\Psi) \le \mathbb{I}(\mathcal{T},\Psi)$. Az állítás második felének bizonyításához használjunk teljes indukciót. Látható, hogy $t = 1$ esetén

$$|(\nu_1)\rangle = |(\nu_1)\rangle_{\text{cond}} + |\Psi\rangle\langle\Psi|(\nu_1)\rangle\,. \tag{E.8}$$

Az E.5 egyenletet, mint indukciós lépés felhasználva tetszőleges t-re belátható, hogy minden $|\underline{\nu}\,\rangle$ állapot megadható a $|\underline{\nu}\,\rangle_{\text{cond}}$ és a $|\underline{\nu}'\,\rangle_{\text{cond}}$ állapotok lineáris kombinációjaként, ahol a $\underline{\nu}'$ a $\underline{\nu}$ sorozatnál rövidebb sorozatot jelöli. Tehát $\mathbb{I}(\mathcal{T},\Psi) \le \mathbb{I}(\mathcal{MT},\Psi)$. A kapott két egyenlőtlenség csak úgy oldható fel, ha $\mathbb{I}(\mathcal{MT},\Psi) = \mathbb{I}(\mathcal{T},\Psi)$. □

F. Átlagos első visszatérési idő egyszerűbb alakja

A II.1.7 egyenletben definiált q_t annak a valószínűsége, hogy a bolyongó t időlépésig nem tért vissza a $|\Psi\rangle$ kezdeti állapotba. A q_t az idő egy nem növekvő, pozitív értékű függvénye, mely q_0 kezdőértéke definíció szerint 1. A bolyongások vizsgálata során feltettük, hogy a bolyongás visszatérő, azaz

$$\lim_{T\to\infty} q_T = 0\,. \tag{F.1}$$

A $\mathcal{T}[\cdot]$ csatorna trace őrzésének következményeképpen a t időpillanatban való első visszatérés p_t valószínűsége a következőképpen adható meg:

$$p_1 = 1 - q_1\,, \tag{F.2a}$$

$$p_2 = q_1 - q_2\,, \tag{F.2b}$$

$$\dots$$

$$p_t = q_{t-1} - q_t\,, \tag{F.2c}$$

mely véges T-ig való felösszegezéséből látható, hogy a közbülső τ időlépésekben adódó q_τ valószínűségek kiesnek, így

$$\sum_{t=1}^{T} p_t = 1 - q_T \,, \tag{F.3}$$

ami ekvivalens a következővel

$$q_T = 1 - \sum_{t=1}^{T} p_t = \left(\sum_{t=1}^{\infty} p_t + \lim_{T\to\infty} q_T \right) - \sum_{t=1}^{T} p_t = \sum_{t=T+1}^{\infty} p_t \,. \tag{F.4}$$

Ezek segítségével az átlagos első visszatérési idő véges részleges időösszege

$$T_N = \sum_{t=1}^{N} t p_t = 1 + \sum_{t=1}^{N-1} q_t - N q_N = \sum_{t=0}^{N-1} q_t - N q_N \,. \tag{F.5}$$

Az F.5 egyenletben elvégzett átalakítás egy diszkrét parciális integrálásnak feleltethető meg, így az Nq_N tagra mint a határon fellépő konstansra tekinthetünk. A II.1.12 egyenlet igazolásához meg kell mutatnunk, hogy

$$T_\Psi = \lim_{N\to\infty} T_N \,, \tag{F.6}$$

azaz a limeszképzés során a Nq_N tag eltűnik, vagy T_Ψ és $\lim T_N$ is egyszerre divergál.

Először tegyük fel, hogy $\lim T_N$ konvergál, ekkor

$$\lim_{N\to\infty} \sum_{t=N}^{\infty} t p_t = 0 \,. \tag{F.7}$$

Így az F.4 egyenlet segítségével a nem negatív $\lim Nq_N$ tagot

$$\lim_{N\to\infty} N q_N = \lim_{N\to\infty} N \sum_{t=N+1}^{\infty} p_t \leq \lim_{N\to\infty} \sum_{t=N+1}^{\infty} t p_t = 0 \,, \tag{F.8}$$

felülről becsülhetjük nullával, tehát ebben az esetben $\lim Nq_N = 0$.

Ha azonban a $\lim T_N$ divergál, akkor a $\sum q_t$ kifejezésnek is divergálnia kell, hiszen az F.5 egyenletben szereplő divergencia nem származhat más tagból. Így T_Ψ és $\lim T_N$ is divergál, azaz a két mennyiség megegyezik.

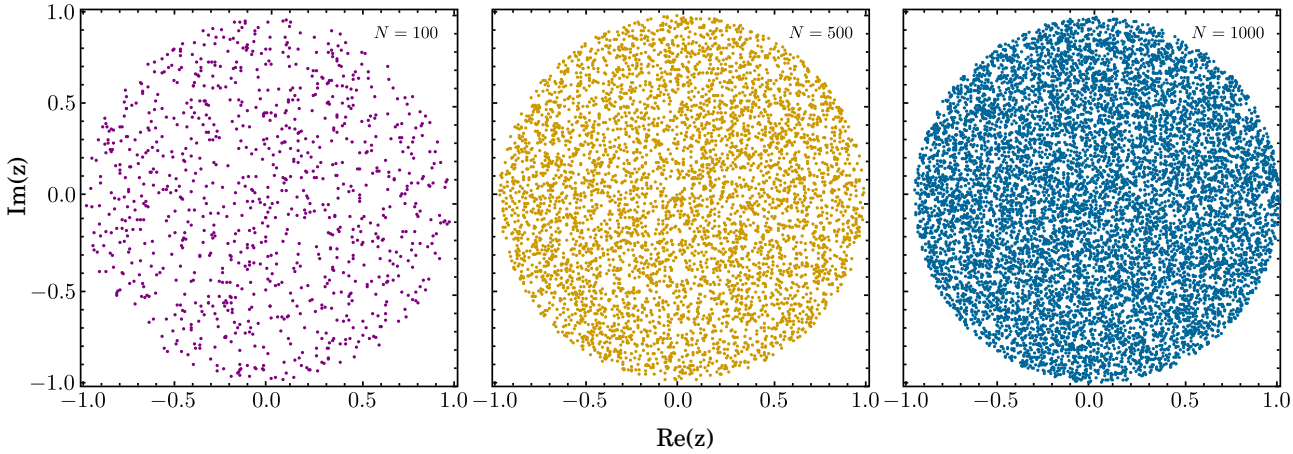
Tehát a bizonyítás mindkét ágában helyettesíthető a visszatérési időt definiáló II.1.9 egyenlet a II.1.12 egyenlettel.

G. Egyenletes eloszlású véletlen szám generálása a komplex egységkörön

A saját eredmények 1.2.2 fejezetének bizonyos példáiban az ott definiált Hamilton-operátorokban szereplő $t_{i,j}$ hoppingok generálásához a komplex egységkörön vett egyenletes eloszlású véletlen z szám generálására volt szükségem, melyet az itt ismertetett módon tettem meg.

A $z = re^{i\phi}$ komplex szám ϕ fázisát egyenletesen választottam a $[0 : 2\pi)$ intervallumon belül, míg annak r sugarát a következőképpen generáltam:

$$r_{\text{work}} = \text{rand}() + \text{rand}() \qquad r = \begin{cases} r_{\text{work}} & \text{ha } r_{\text{work}} \leq 1 \\ 2 - r_{\text{work}} & \text{ha } r_{\text{work}} > 1, \end{cases} \tag{G.1}$$



A.3.1. ábra. A komplex egységkörön egyenletes eloszlást követő $N = 100$, 500 és 1000 darab numerikusan generált véletlen szám.

ahol a rand() egy $[0 : 1)$ tartományban lévő egyenletes eloszlású véletlen számot jelöl. Így a kapott véletlen szám:

$$z_{\text{rand}} = r\,(\cos\phi + i\sin\phi)\ . \tag{G.2}$$

mely az A.3.1 ábrán látható egyenletes eloszlást követ. A $t_{i,j}$ mátrixelem ilyenfajta generálásra azért volt szükségem, mert ha a sugár egy egyenletes véletlen szám lenne (azaz $r = \text{rand}()$), akkor a hozzárendelt komplex szám nem követne egyenletes eloszlást az egységkörön, hiszen a sugár növekedésével $2r\pi$, egyre nagyobb kerületű kört kell lefednünk. Tehát olyan véletlen számra van szükségünk, mely gyakorisága az origótól távolodva r-rel arányosan nő.

Ezt úgy tehetjük meg, ha felhasználjuk, hogy egy $Z = X + Y$ típusú véletlen változó eloszlásfüggvénye az őt előállító X és Y eloszlásfüggvényeknek a konvolúciója[232], azaz

$$f_Z(z) = \int_{-\infty}^{\infty} f_X(z-y) f_Y(y)\,dy\,. \tag{G.3}$$

Tehát, ha az X, Y változók is egyenletes eloszlást követnek, akkor az előző integrál egyszerűen kiszámítható és fellelhető az előző lináris skálázás (egyenlő szárú háromszög, melynek csúcsa az 1-ben van):

$$f_Z(z) = \begin{cases} z & \text{ha } 0 \le z \le 1 \\ 2 - z & \text{ha } 1 \le z \le 2 \\ 0 & \text{különben} \end{cases}\ . \tag{G.4}$$

Azonban a G.1 egyenlettel megadott választással félbehajtható a háromszög és megkapjuk az r-rel arányos függést.

H. A kezdőállapotba való visszatérés definíciója és teljesülése

A II.3 kvantum Kac-tétel bizonyításának egyik szerves része annak a megmutatása, hogy ha a II.1.74 feltétel teljesül, azaz ha a $|\Psi\rangle$ kezdőállapothoz, a II.1.64 módón, rendelt χ egyensúlyi eloszlásnak sajátállapota a $|\Psi\rangle$

kezdeti állapot ($\lambda \neq 0$ sajátértékkel), akkor a bolyongás visszatérő, azaz a bolyongó 1 valószínűséggel visszatér a folyamat végeztével. Tehát tömören megfogalmazva, a visszatérés II.1.8 definícióját figyelembe véve, a következőt kell bizonyítanunk:

$$\chi\,|\Psi\rangle = \lambda\,|\Psi\rangle \quad \lambda \neq 0 \quad \Rightarrow \quad \lim_{t\to\infty}(\mathcal{M}\mathcal{T})^t[|\Psi\rangle\langle\Psi|] = 0\,. \tag{H.1}$$

Vezessük be a $\mathcal{M}\mathcal{T}[\cdot]$ feltételes csatorna

$$\chi_{\mathcal{M}} = \lim_{T\to\infty}\frac{1}{T}\sum_{t=0}^{T-1}(\mathcal{M}\mathcal{T})^t[|\Psi\rangle\langle\Psi|] \tag{H.2}$$

egyensúlyi sűrűségoperátorát, melyről az $\mathcal{T}[\cdot]$ csatorna II.1.64 egyenlettelben megadott χ egyensúlyi sűrűségoperátoránál leírtakhoz hasonló módon megmutatható, hogy valóban fixpontja a kívánt csatornánk. A most bevezetettet $\chi_{\mathcal{M}}$ sűrűségoperátor csak akkor különbözik nullától, ha $\lim \mathrm{Tr}\{(\mathcal{M}\mathcal{T})^t[|\Psi\rangle\langle\Psi|]\} > 0$. A feltételes dinamika egyensúlyi állapotának H.2 konstrukciójából adódóan

$$\langle\Psi|\chi_{\mathcal{M}}|\Psi\rangle = 0\,, \tag{H.3}$$

továbbá a $\mathcal{T}[\cdot]$ trace-őrző tulajdonságából fakadóan $\langle\Psi|\mathcal{T}[\chi_{\mathcal{M}}]|\Psi\rangle = 0$, így $\chi_{\mathcal{M}}$ nem csak a feltételes dinamikának, de a dinamikának is sajátállapota, azaz

$$\mathcal{T}[\chi_{\mathcal{M}}] = \chi_{\mathcal{M}}\,. \tag{H.4}$$

A.7. *Lemma.* *A II.1.74 sajátértékegyenlet teljesülése a $|\Psi\rangle \in \mathcal{R}$ megszorítást eredményezi, ahol az $\mathcal{R}$ az I.1.71 egyenlettel definiált gyorsan visszatérő altér.*

Bizonyítás. Tegyük fel, hogy a kezdőállapotnak van nullától különböző komponense az I.1.70 bomló-altérben, azaz

$$|\Psi\rangle = c_{\mathcal{D}}\,|\Psi_{\mathcal{D}}\rangle + c_{\mathcal{R}}\,|\Psi_{\mathcal{R}}\rangle\,, \tag{H.5}$$

ahol $c_{\mathcal{D}}, c_{\mathcal{R}} \in \mathbb{C}$, $|\Psi_{\mathcal{D}}\rangle \in \mathcal{D}$ és $|\Psi_{\mathcal{R}}\rangle \in \mathcal{R}$. Annak belátásához, hogy ekkor nem teljesülhet az előírt feltétel szorozzuk meg (jobbról) $\langle\Psi_{\mathcal{D}}|$-vel a II.1.74 sajátérték egyenletet, mely eredményeképpen

$$\langle\Psi_{\mathcal{D}}|\chi\,|\Psi\rangle = c_{\mathcal{D}}\,\langle\Psi_{\mathcal{D}}|\chi\,|\Psi_{\mathcal{D}}\rangle + c_{\mathcal{R}}\,\langle\Psi_{\mathcal{D}}|\chi\,|\Psi_{\mathcal{R}}\rangle\,. \tag{H.6}$$

A H.6 egyenlet jobb oldalán szereplő $\langle\Psi_{\mathcal{D}}|\chi\,|\Psi_{\mathcal{D}}\rangle$ tag a bomló-altér I.1.70 definíciójából és a χ egyensúlyi sűrűségoperátor $\mathcal{T}[\chi] = \chi$ fixpont tulajdonságából következően nulla. Továbbá a H.6 egyenlet jobb oldalának második tagja felülről becsülhető a

$$|\langle\Psi_{\mathcal{D}}|\chi\,|\Psi_{\mathcal{R}}\rangle|^2 \leq |\langle\Psi_{\mathcal{D}}|\chi\,|\Psi_{\mathcal{D}}\rangle|\,\langle\Psi_{\mathcal{R}}|\chi\,|\Psi_{\mathcal{R}}\rangle = 0 \tag{H.7}$$

Schwarz-egyenlőtlenséggel, tehát a $\langle\Psi_{\mathcal{D}}|\chi\,|\Psi_{\mathcal{R}}\rangle$ mátrixelemnek is el kell tűnnie. Másrészről viszont a sajátértékegyenletből következően

$$\langle\Psi_{\mathcal{D}}|\chi\,|\Psi\rangle = \lambda c_{\mathcal{D}}\,\langle\Psi_{\mathcal{D}}|\Psi_{\mathcal{D}}\rangle + \lambda c_{\mathcal{R}}\,\langle\Psi_{\mathcal{D}}|\Psi_{\mathcal{R}}\rangle = \lambda c_{\mathcal{D}}\,, \tag{H.8}$$

ahol felhasználtuk a bevezetett altérek egymásra merőleges tulajdonságát és a $|\Psi_{\mathcal{D}}\rangle$ vektor egyre normáltságát. A H.8 egyenlet eltűnése a H.6 egyenlettel együtt a $c_{\mathcal{D}} = 0$ nulla feltételt adja, azaz $|\Psi\rangle \in \mathcal{R}$. □

A 48 és a 49 cikkek egyik fő eredményéből következően ha $|\Psi\rangle \in \mathcal{R}$, akkor a releváns Hilbert-tér (vagy a 49 cikk jelölését használva Enc(Ψ)) felírható a $|\Psi\rangle$-re nem merőleges $\{\mathcal{R}_i\}$ ortogonális minimális enclosure-ök direkt összegeként (lsd. I.1.72 egyenlet), melyek számosságát jelöljük M'-vel, ekkor

$$|\Psi\rangle = c_1 |\Psi_1\rangle + c_1 |\Psi_2\rangle + \cdots + c_{M'} |\Psi_{M'}\rangle \ , \tag{H.9}$$

ahol $\{c_i\}$ nem nulla komplex együtthatók és $|\Psi_i\rangle \in \mathcal{R}_i$ normált báziselem. Minden egyes $\mathcal{R}_i$-hez tartozik egy (egyértelmű) $\chi^{(i)} = (\chi^{(i)})^\dagger > 0$ egyensúlyi eloszlás. Ezen egyensúlyi állapotok kifeszítik a hozzájuk tartozó minimális enclosure-t, azaz supp$\chi^{(i)} = \mathcal{R}_i$, így $\langle\Psi|\chi^{(i)}|\Psi\rangle > 0$, valamint az altér tetszőleges $|\varphi_i\rangle \in \mathcal{R}_i$ állapotából konstruált $|\varphi_i\rangle\langle\varphi_i|$ sűrűségoperátorból a bolyongás során aszimptotikusan tart $\chi^{(i)}$-hez. Továbbá minden egyensúlyi eloszlás a releváns Hilbert-téren kifejezhető a $\{\chi^{(i)}\}$ egyensúlyi eloszlások konvex kombinációjaként[48].

A bizonyítás utolsó lépéseként az előbb bemutatott eredményeket összegezzük: Mivel $\chi_{\mathcal{M}}$ egy egyensúlyi eloszlás a releváns Hilbert-téren, így felírható a $\chi_{\mathcal{M}} = \sum p_i \chi^{(i)}$ konvex kombinációban, mely a kezdőállapottal vett várhatóértéke:

$$\langle\Psi|\chi_{\mathcal{M}}|\Psi\rangle = \sum_{i=1}^{M'} p_i \langle\Psi|\chi^{(i)}|\Psi\rangle \ . \tag{H.10}$$

A H.10 egyenlet a H.3 egyenlet következtében nulla, és a jobb oldalon szereplő $\{\chi^{(i)}\}$ egyensúlyi állapotok $\langle\Psi|\chi^{(i)}|\Psi\rangle > 0$ tulajdonságából adódóan $\forall p_i = 0$. Tehát a II.1.74 feltétel teljesülése esetén a bolyongás mindig visszatérő (A II.1.8 egyenlettel definiált $R_{\mathcal{T}}$ Pólya szám értéke 1).

A fent bemutatott bizonyítás általánosításából látható, hogy tetszőleges $|\Psi\rangle \in \mathcal{R}$ kezdőállapotból indított dinamika visszatérő és a hozzá tartozó, II.1.64 egyenlettel definiált, χ egyensúlyi állapot a kezdőállapot által érintet $\mathcal{R}_i$ minimális enclosure-et kifeszítő $\chi^{(i)}$ egyensúlyi eloszlásokkal a következőképpen írható fel:

$$\chi = \sum_{i=1}^{M'} \mathrm{Tr}\left[\varrho(0)\chi^{(i)}\right]\chi^{(i)} , \tag{H.11}$$

ahol $\varrho(0) = |\Psi\rangle\langle\Psi|$.

Summary

1. Antecedents and motivations of our work

1.1. Average recovery time in physical systems

The need for scientific theories was demanded by the observation of the surrounding macroscopic events happening from time to time. Such periodic events were for example the alternation of days and nights, or the passage and recurrence of the seasons. The observed regularities suggest the existence of underlying natural law or laws. Taking Earth's circulation and rotation into account is necessary for an explanation of the presented examples. These arguments were already known in ancient cultures as well, who further noticed that with the passing of a year the Earth does not return to its exact prior position but to one very close to it. Their notes however concluded that the Earth after all does return to its initial place and this time elapsed is called "Great Year" or "Platonic Year". The then most accurate calculations carried out by the Babylonians, who identified one year as 360 days(hence the partition of the total circle into 360 degrees) while the Great Year is 36,000 years [1–3].

Newton in his work [4] (published in 1687) seemingly gave a complete explanation of the movements of all the planets found in the solar system but the efforts to find a concrete solution for the systems consisting of two bodies remained unsuccessful. The simplest of the unresolved problems was the three bodies problem for which by the end of the 19th century there were some approximate solutions bound to initial conditions however the existence of an exact solution remained an open question. Upon the invitation of II. Oscar Swedish king in 1887 Poincaré started to work on this minimal problem however his efforts were unsuccessful. He concluded that the problem can not be solved in a close form. His win of the prize was further supported by the other two positive results he found, 1) He showed that a small change in the initial conditions, in an unpredicted manner, results in a fairly large change in the solution to which sensitivity we have to pay attention to in our calculations. (This remark lead to the birth of the chaos-theory.) 2) Beyond the specific problem he proved that when in a process the certainty equivalent of a state is a constant, a system returns to almost every previous state after a certain time (Poincare time) [7–9].

On the magnitude and average frequency of returns of the returning time introduced by him Poincaré made no estimates. For this we had to wait until 1947, when Kac also proved that if a state is recurrent then it is indeed infinitely recurring, whilst using the lemma named after him to determine the average return time of a state. According to Kac lemma the average return time of a state is equal to the reciprocal of its equilibrium distribution [10]. I have further discussed the strength of the lemma in the thesis hence now I will only demonstrate one of its unusual applications. Compare the frequency of occurrence of 7 and 8 (in the decimal numeral system) in the first digit of the 2^n ($n \in \mathbb{N}$) series, as well as the average number of steps until the first digit becomes 7 and then 8 again. All members of the series can be written in the form of $2^n = B \cdot 10^k$ where $1 \leq B < 10$

and $k \in \mathbb{N}$. Thus if $7 \leq B < 8$ the given member of the series starts with 7, when $8 \leq B < 9$ the first digit of the first element is 8. Taking the logarithm of the basis of 10 of the previous form we obtain the following: $n \log(2) = k + \log(B)$. Hence to get the first digit of every element take n times $\log(2)$ ignoring its integer parts, and see which two integers' logarithms it falls between (if the result falls in the interval of $[\log(7), \log(8))$ the first element of the series starts with 7. Considering that $0 \leq \log(B) \leq 1$, multiplying both sides with 2π the original problem can be replicated to a rotation on a unit circle, where the unit rotation is defined by the angle that has the size $2\pi \log(2)$. Thus the equilibrium distribution of the first digit of the elements is determined by the length of the arc, normalized with 2π, on the unit circle, assigned to them, from which the probability that the first digit of $2n$ be 7 is: $P_7 = \log(8) - \log(7) \simeq 0.058$, similarly $P_8 \simeq \log(9) - \log(8) = 0.051$. From the Kac lemma we know that in average every member with the first digit of 7 will be followed by another in $N_7 \simeq 1/0.058 \simeq 17.24$ steps, while in the case of 8 this number is $N_8 \simeq 1/0.051 \simeq 19.6$. Note that the prior result (apart from some specific power bases) is universal.

Moving away from the description of macroscopic systems the definition explaining the dynamics of the system has to be modified. Hence while in some classical systems the evolution of time can be described by the iterative use of given transfer matrices, in a closed system of the quantum world these dynamics are described by a unitary operator's iterated use. Furthermore whilst in the classical systems the definition of the average first return time did not pose any problems, in the quantum world this step can not be performed in a well defined way, since we have to ensure the avoidance of multiple returns, which requires some sort of interference. One way to interfere is to monitor continuously, so we modify the dynamics in the following way: We measure the system after every step, and if it returned to the ground state, we stop the process. The time necessary to stop the process is identified by the return time of the process, and the return times given by this method will unequivocally lead to the first average return time by making a statistical averaging over them Grünbaum et al. in 2013 found that the average return time of an arbitrarily chosen state of an arbitrary closed physical system is an integer or infinite[11].

1.2. Ground state of the SU(N) Heisenberg model

On an adequately low temperature certain degrees of freedom of condensate materials freeze out, thus they present distinct structure and collective properties. For instance until we examine these on a temperature lower than the energy of the U interaction between its particles and according to the $K_B T$ energy, they can be regarded as crystallized materials. The electricity flowing in these crystals, with spin- or orbital angular momentum a uniform magnetic behavior can develop, this certain solid-states (even without an external magnetic field) can have an induced magnetic field. These materials are referred to as ferrite magnets and their corresponding transformation temperature is called Curie-temperature[80]. The following graphic image can be associated with the ferromagnets: to every grid of the crystal an elementary magnet is assigned, that point in the same direction on every grid, while in the ferromagnets the elementary magnets point in different directions and the macroscopic magnetism of the crystal is given by the changing strength of the elementary magnets[81]. The other large group of magnetic materials is formed by diamagnets, paramagnets and anti-ferromagnets, since in these a spontaneous induced magnetic field does not occur. Diamagnetism create an induced magnetic field in a direction opposite to an externally applied magnetic field, whilst in paramagnets the induced field is created in the same direction as the externally applied field. In antiferromagnets the neighboring grids exhibit a magnetic ordering in opposing directions, however unlike in the ferromagnets here the elementary magnets have the same

strength[82–84].

The whole spin of elementary magnets formed on a grid point of a solid, can originate from the kernel or the magnetic or orbital angular momentum of the electrons, as well as due to the surrounding momentums' shading effect it may also shorten. To model the interaction of these momenta the isotropic Heisenberg-model is appropriate, which takes into account the Pauli-principle and the direct and kinetic exchange mechanisms. The Heisenberg-model describes the interaction of the spins of the solid-states as a sum of coupled interactions, between which the J connection is regarded as grid independent. Assuming these pair interactions are unable to induce the atom which carries the spin of the grid hence we focus on the spin rotating role of each interacting parts that are sufficient to describe the coupled interactions. According to the model's J parameter's sign, in the crystal a ferromagnetic ($J < 0$), or an antiferromagnetic ($J > 0$) ordering is preferred.

Despite its apparent simplicity, the Heisenberg-model describes the surrounding physical systems well, in addition apart from some special cases an exact solution does not exist. When examining the ground-state of the model we came across a variety of exotic phases, which is mainly influenced by the lattice that belongs to the model and the size of the spin of the grids. First, in 1944 L. Onsager proved with his exact calculations that the initial state of an SU(2) Heisenberg-model placed on a square lattice can also be an ordered phase[97,98]. Following this, the examination of the symmetry properties of the ground state of the SU(N) symmetric Heisenberg-model began[99–105]. The individual results have shown that in infinitely large systems the ground state can be arbitrarily close to the Néel-ordering, furthermore the deviation from these orderings increases with the decreasing of the grid size. Hence by the examination of a finite but sufficiently large system the initial state (in certain parameter ranges) can be approximated by a classical Néel-ordering. However when determining the ground state we have to take the Mermin-Wagner theorem into account, which states that at a finite temperature there has to be a minimum of two dimensions for an ordering to be formed in the ground state[106–108].

2. Summary of results

2.1. The average first return time of open quantum systems

We were inspired to work on open systems by an article published in 2013 where Grunbaum et al gives a quite technical, topological argument in this article, that in iterated unitary dynamics, the system returns to its initial state in integer or infinite steps (in average) . We interconnected this problem with a theorem known in classical dynamics, which states that in doubly stochastic iterated dynamics, the average return time is equal to the size of the irreducible graph associated with the initial state. We further generalized our theorem which was named as the quantum Kac lemma.

With the investigation of open systems, we had the chance to connect purely quantum and purely classical systems, with a continuous d decoherence parameter, where $d = 0$ corresponds to a purely quantum system, while $d = 1$ results in a purely classical system. The time development of a quantum system can generally be given by a quantum channel. The Kraus representation of this channel presumes a constant environment through time-development. With the introduction of this dynamics, we were able to link the two doubly stochastic limits, (i.e., the doubly stochastic classical dynamics and the unitary dynamics), and to show that if the dynamics is unital (in both limits), than the average return time stays quantized and is equal to the dimension of the Hilbert space explored by the system We investigated the applicability and the surprising behaviour of the theorem we

got[III]. We displayed the robustness of the problem by exploring the 'relevant Hilbert space' through several examples.

As I dug deeper in this field, I have realised that if a system's initial state is an eigenstate of the equilibrium density operator, then the average returning time can be calculated from the system's equilibrium distribution[I]. In the previous special cases this condition is automatically satisfied, since in those cases the equilibrium distribution is the multiple of the unit operator. According to the found theorem the reciprocal of the number we get by the normalization of the state gives exactly the average returning time (which is in accordance with the results we got using for unital dynamics). Our theorem given by these more general dynamics, at the classical extremes is the same as the classical Kac theorem. Finally, we showed through an example, that the found quantum Kac lemma is applicable to find the average hitting time between arbitrary states in every iterated dynamics driven system, where we use a classical tool to determine if the walker hits the target state or not[I].

2.2. SU(4) symmetric anti-ferromagnetic Heisenberg model on an fcc lattice

I have started to investigate the spin systems in my MSc thesis, and now I continue do so as a PhD student. In the course of investigating these systems, I have always aimed to understand the SU(N) spin operators' different representations and applications. We examined two physically different model: one being the SU(6) symmetric anti-ferromagnetic Heisenberg model on a hexagonal lattice[IV], and the other being the SU(4) symmetric antiferromagnetic Heisenberg-model on an fcc lattice[II]. We used different representations in the two mentioned models, because we expected different outcomes. We expected an SU(6) symmetric spin-liquid ground state in the first model, while an ordered phase in the second one. As the results of our research on the first model has already been presented in my MSc thesis, I concentrated on the second one in my doctoral thesis.

We chose the boson representations of the spin operators in the course of investigating the ordered phase, since in the ground state, they Bose-condensate, so they violate the SU(4) rotational symmetry. This representation of spins results in a four operator interaction term which in general cannot be treated in an exact way, so we used the 'spin wave approximation' to handle this term. In the first step of this approximation we determined all the possible classical configurations of the (degenerate) ground state. We found in the course of the calculations, that this ordering is not unique. For simplicity, we chose a one parameter ensemble (helical states) from these possible states, and tried to find the model's ground state on this subspace. To carry out this approximation, we need the boson operator's Holstein-Primakoff representation, where we used the semiclassical series expansion. With the help of the series expansion, the degeneracy of the classical states splits up, and only one state remained as the ground state of the system. This type of the selection is called as the "order-by-disorder" mechanism. We made a stability analysis of the obtained ground state by calculating the spin reduction, as a self-consistency condition being satisfied, i.e., in the semiclassical approximation we put forward as a hypothesis, that the magnetization on each lattice site has a well defined, classical direction which can only change a little due to perturbations. These quantitative checks showed, that at a finite temperature, the obtained phase becomes unstable, which can be explained graphically as the Mermin-Wagner theorem prevents the obtained phase behaving as a quasi 2 dimensional system. The higher orders of the approximation were taken into account as an effective ferromagnetic Heisenberg interaction between the next nearest neighbors, and so we calibrated the value of the coupling accordingly. In the extended model we found that the obtained ground state stabilized even on a finite temperature.

Finally, we determined the spin-spin correlation function for the helical states (characterized by the ϑ parameter) by this quantity the spin configurations of the state can be identified, with the help of the scattering experiments.

Új tudományos eredmények

Átlagos első visszatérési idő iterált dinamikákban

[1] Tetszőleges (tiszta) kezdőállapotból indított nyílt kvantumrendszer, iterált dinamika mellett definiált átlagos visszatérési idejére adtunk egy, a korábbi statisztikus átlagoláson alapuló definícióval ekvivalens, alternatív megfogalmazást. Ezen új konstrukció szerint a visszatérési idő a bolyongás teljes ideje alatt bejárt állapotoknak azon részének a trace-e, melyek az adott időpillanatig egyszer sem tértek vissza. A többszörös visszatérés elkerülését az eredeti dinamika helyett, egy úgynevezett feltételes dinamika használatával biztosítottuk, melyben minden időlépésben, az eredeti időlépést definiáló csatornát követően egy projektív mérést alkalmaztunk, mely a már visszatért állapotokat nem engedte tovább fejlődni. A feltételes dinamika tanulmányozása során megmutattuk, hogy egy tetszőleges (tiszta) kezdőállapotból indított rendszer a teljes fejlődése során ugyanazt a Hilbert-teret feszíti ki adott kvantumcsatorna, illetve a hozzá tartozó feltételes dinamika mellett. Továbbá ha a kezdőállapotból indított Cesàro átlagolással definiált egyensúlyi állapotnak sajátállapota a kezdőállapot (nem nulla sajátértékkel), akkor a bolyongás mindig visszatérő[I][III].

[2] Összekötöttük és általánosítottuk véges dimenziós rendszerek iterált unitális dinamikájára is a klasszikus bisztochasztikus Markov-láncokra, illetve az iterált unitér folyamatokra vonatkozó tételeket, melyek szerint ezekben az esetekben az átlagos első visszatérési idő értéke egész és megegyezik a bolyongás során bejárt rendszer méretével. Ezen tételünk érvényességét különböző analitikus és numerikus példákon szemléltettük, valamint kitekintésként, a tételen túlmutató analitikus példákat is adtunk[III].

[3] Megmutattuk, hogy a klasszikus folyamatokra vonatkozó Kac lemma a lehetséges csatornák egy tágabb osztályára is általánosítható, melynek az unitális egy speciális esete. A klasszikus Kac lemma kapcsolatot teremt a bolyongást szemléltető gráf egy tetszőleges rácspontjának átlagos első visszatérési ideje és a dinamikához rendelt egyensúlyi eloszlás között. Pontosabban, az átlagos visszatérési idő egy adott pontban megegyezik az egyensúlyi eloszlás adott komponensének a reciprokával. Ezt a lemmát általánosítottuk olyan véges dimenziójú rendszerek iterált folyamataira, ahol a (tiszta) kezdőállapotból indított Cesàro átlagolással definiált egyensúlyi állapotnak sajátállapota a kezdőállapot (nem nulla sajátértékkel)[I].

[4] Tetszőleges (véges dimenziójú) nyílt iterált dinamikákban definiálható átlagos elérési idő meghatározásával demonstráltuk az általunk talált kvantum Kac lemma általánosságát és erősségét. Ezen folyamatokra a kvantum Kac lemma alkalmazhatóságát az biztosítja, hogy az eredeti rendszer kiterjeszthető egy ancilla állapottal, mely egy klasszikus folyamattal be-, illetve kiszór a kezdeti, illetve a végállapotból, így elegendő az ancilla állapotba való visszatérési időt meghatároznunk, a klasszikus kommunikáció pedig automatikusan biztosítja a tételben megkövetelt feltételek teljesülését[I].

Oder-by-disorder mechanizmus során kialakuló alapállapot az su(4) Heisenberg-modellben

[5] Meghatároztuk az fcc rácson értelmezett SU(4) szimmetrikus antiferromágneses Heisenberg-modell lehetséges klasszikus rendeződéseit. Az alapállapotot megvalósító klasszikus konfiguráció globális mértékrögzítés után is végtelenül degenerált maradt. A mérték megválasztása rögzíti, hogy $(1, 0, 0)$ vagy $(0, 1, 0)$ vagy $(0, 0, 1)$ kristálytani irányok közül melyik mentén haladjunk az alapállapoti konfiguráció megkonstruálása során, valamint hogy az egyes szinteken melyik két spinállásból képzett szimmetrikus és antiszimmetrikus kombinációk alkossák az adott síkhoz tartozó (bipartit)rács alrácsmágnesezettségeit. Az egyes szinteken a keveredés mértéke azonban tetszőlegesnek adódott. A lehetséges alapállapoti konfigurációk közül kiválasztottuk a kitüntetett szerepet játszó egyparaméteres alosztályt, az úgynevezett helikális állapotokat, ahol a keveredés mértékét megadó szög az egyes szintek tavolságával arányos és kiszámoltuk a hozzájuk tartozó, kísérletileg is mérhető, klasszikus spin-spin korrelációs függvényeket[II].

[6] A kristály magas koordinációs száma lehetővé tetette, hogy lineáris spinhullám-számolással figyelembe vegyük a klasszikus rendeződés felett megjelenő kvantumfluktuációk hatását. A fluktuációk figyelembevételével (a két szélső esetben analitikus számolással) megmutattuk, hogy zérus hőmérsékleten a rendszer alapállapota már egyértelmű: a triviális helikális állapot. A rendszer véges hőmérsékletű analízise során azonban a triviális helikális állapot nem bizonyult stabilnak, de megmutattuk, hogy már egy tetszőlegesen kis ferromágneses másodszomszéd kölcsönhatással kiterjesztett modellben a triviális helikális állapot alacsony hőmérsékleten is stabilizálódik és a rendszer alapállapota marad véges hőméréskelen is[II].

Publikációs lista

A doktori dolgozat vázát alkotó cikkek

[I] Sinkovicz P., Kiss T., Asbóth J. K., *Generalized Kac's Lemma for Recurrence Time in Iterated Open Quantum Systems*, Phys. Rev. A (Rapid Communication), 93. 5. 050101(R) (2016) /impaktfaktor: 2.81/

[II] Sinkovicz P., Szirmai G., Penc K., *Order by disorder in a four flavor Mott-insulator on the fcc lattice*, Phys. Rev. B, 93. 7. 075137 (2016) /impaktfaktor: 3.74/

[III] Sinkovicz P., Kurucz Z., Kiss T., Asbóth J. K., *Quantized recurrence time in iterated open quantum dynamics*, Phys. Rev. A 91. 4., 042108 (2015) /impaktfaktor: 2.81/

Egyéb megjelent publikációk

[IV] Sinkovicz P., Zamora A., Szirmai E., Lewenstein M., Szirmai G., *Spin liquid phases of alkaline-earth-metal atoms at finite temperature*, Phys. Rev. A 88 4., 043619 (2013) /impaktfaktor: 2.99/

[V] Szoboszlai Z., Nagy Gy., Kertész Zs., Angyal A., Furu E., Török Zs., Ratter K., Sinkovicz P., Kiss A.Z., *Characterization of atmospheric aerosols in different indoor environments*, ATOMKI Annual Report, ISSN 0231-3596 (no.26) 43, 41., 43102323 (2011)

[VI] Mandula G., Kis Z., Sinkovicz P., Kovács L. , *Homogeneous linewidth of the* $I_{11/2}$–$I_{15/2}$ optical transition of erbium in $LiNbO_3$:Er^{3+}, IOP Conference Series: Materials Science and Engineering; Volume 15, Page, 012062 (2010)

PHYSICAL REVIEW A **93**, 050101(R) (2016)

Generalized Kac lemma for recurrence time in iterated open quantum systems

P. Sinkovicz, T. Kiss, and J. K. Asbóth
Institute for Solid State Physics and Optics, Wigner Research Centre, Hungarian Academy of Sciences, P.O. Box 49, H-1525 Budapest, Hungary

(Received 10 November 2015; revised manuscript received 23 March 2016; published 9 May 2016)

We consider recurrence to the initial state after repeated actions of a quantum channel. After each iteration a projective measurement is applied to check recurrence. The corresponding return time is known to be an integer for the special case of unital channels, including unitary channels. We prove that for a more general class of quantum channels the expected return time can be given as the inverse of the weight of the initial state in the steady state. This statement is a generalization of the Kac lemma for classical Markov chains.

DOI: 10.1103/PhysRevA.93.050101

I. INTRODUCTION

According to the Poincaré recurrence theorem [1,2], any closed classical physical system, when observed for a sufficiently long time, will return arbitrarily close to its initial state. The extension of this statement to open systems whose dynamics can be modeled as Markov chains [3,4] is given by the Kac lemma [5]. This connects the expected return time to the limit distribution, i.e., the probability distribution of the system in the infinite-time limit. The expected return time (Poincaré time) is the inverse of the weight of the initial state in the limit distribution. If the weight vanishes, the expected return time diverges, and the probability of return is less than 1.

A version of the Poincaré recurrence theorem also holds for closed quantum-mechanical systems, which are periodically measured to test whether recurrence has occurred. Here, the system is assumed to start from an initial state given by a wave function, which is evolved by the same unitary time-step operator between successive measurements. Every measurement influences the dynamics: It either signals a return, and projects the system to the initial state, or signals no return, and projects out the initial state from the wave function. Grünbaum *et al.* [6] have shown that in this case the expected return time (number of measurements) is either infinite, or it is an integer. We generalized [7] this result to open quantum-mechanical systems whose dynamics is given by a quantum channel [8–12]. We found that if the channel is unital, i.e., if the limit distribution is the completely mixed state in an effective Hilbert space that contains the initial state [13–15], then the expected return time is equal to the dimensionality of that effective Hilbert space.

One cannot help but notice the fact that the expected return time in open quantum systems with unital dynamics is an integer in accordance with the Kac lemma. Indeed, the dimensionality of the effective Hilbert space is the inverse of the weight of the initial state in the (appropriately defined) limit distribution of the dynamics. The question arises: Can we push this statement further, and ask if there is a broader class of open quantum dynamical systems for which a quantum Kac lemma would hold? In this Rapid Communication we answer this question positively. We show that for a rather general type of quantum channel the expected return time can be calculated from the related steady state of the system.

The structure of this Rapid Communication is as follows. Section II contains the definitions and ideas that we need to set up the problem. We state our result in Sec. III. In Sec. IV we give a possible application of our theorem. Section V concludes with a discussion of the results and some potentially interesting questions.

II. DEFINITIONS

We consider discrete-time dynamics of an open quantum system. The state of the system is described by a density operator $\hat{\varrho}(t)$, representing a mixture of pure states from an N-dimensional Hilbert space $\mathcal{H}$, with $t \in \mathbb{N}$ denoting the discrete time. Starting from a pure initial state $|\Psi\rangle \in \mathcal{H}$, we obtain the state by iterations of the fixed time-step superoperator $\mathcal{S}[\cdot]$,

$$\hat{\varrho}(t) = \mathcal{S}^t[|\Psi\rangle\langle\Psi|]. \tag{1}$$

As usual, we assume $\mathcal{S}[\cdot]$ to be a linear, trace-preserving, and completely positive map, i.e., a quantum channel. It can thus be written using Kraus operators [16–20] as

$$\mathcal{S}[\hat{\varrho}] = \sum_{\nu=0}^{r} \hat{A}_\nu \hat{\varrho} \hat{A}_\nu^\dagger, \tag{2}$$

where $r \leqslant N^2$ is the Kraus rank of $\mathcal{S}[\cdot]$, and $\hat{A}_\nu : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ are the Kraus operators, with the normalization

$$\sum_\nu \hat{A}_\nu^\dagger \hat{A}_\nu = \hat{\mathbb{I}}, \tag{3}$$

where $\hat{\mathbb{I}}$ represents the unit operator on $\mathcal{H}$.

We can construct a steady state of the dynamics from the initial state $|\Psi\rangle$ as

$$\hat{\chi} = \lim_{T\to\infty} \frac{1}{T} \sum_{t=0}^{T-1} \mathcal{S}^t[|\Psi\rangle\langle\Psi|]. \tag{4}$$

This limit is always well defined since we are in a finite-dimensional Hilbert space [20]. The operator $\hat{\chi}$ is a convex mixture of density operators, and is thus self-adjoint, positive, and fulfills $\mathrm{Tr}[\hat{\chi}] = 1$: It can be interpreted as a density operator of the system. It represents a steady state, since

$$\mathcal{S}[\hat{\chi}] = \hat{\chi} - \lim_{T\to\infty} \frac{1}{T} |\Psi\rangle\langle\Psi| = \hat{\chi}. \tag{5}$$

 ©2016 American Physical Society

First return time

To measure the first return time, we need to disturb the dynamics [21,22]. We follow each time step by a dichotomic measurement that checks whether the system has returned to the state $|\Psi\rangle\langle\Psi|$, or if it is in the orthogonal subspace $\mathcal{H}_\perp$, defined by

$$|\Phi\rangle \in \mathcal{H}_\perp \Leftrightarrow \langle\Phi|\Psi\rangle = 0. \tag{6}$$

The postmeasurement state corresponding to "no return" is obtained using the projector

$$\mathcal{M}[\hat{\varrho}] = (\hat{\mathbb{I}} - |\Psi\rangle\langle\Psi|)\hat{\varrho}(\hat{\mathbb{I}} - |\Psi\rangle\langle\Psi|). \tag{7}$$

Note that the projector $\mathcal{M}[\cdot]$ does not conserve the trace: Its outcome is a *conditional density operator*, whose trace represents the probability that the particle described by $\hat{\varrho}$ has not returned. The modified dynamics, including the dichotomic measurements, is defined by

$$\hat{\varrho}_{\text{cond}}(t) = (\mathcal{MS})^t[|\Psi\rangle\langle\Psi|]. \tag{8}$$

Here, the trace of the conditional density operator is a probability,

$$\operatorname{Tr}\hat{\varrho}_{\text{cond}}(t) = \text{P(no return up until time } t). \tag{9}$$

We call the iterated open quantum channel *recurrent* when started from $|\Psi\rangle$, if it returns with probability 1 in the sense defined above, i.e., if $\lim \operatorname{Tr}\hat{\varrho}_{\text{cond}}(t) = 0$. This is in line with Ref. [6]. In the rest of this Rapid Communication we will only concern ourselves with recurrent channels.

Let us remark that the states of a system evolving from the initial state $|\Psi\rangle$, either by the evolution operator $\mathcal{S}[\cdot]$ or by $\mathcal{MS}[\cdot]$, may explore only a subspace of $\mathcal{H}$, but they span the same subspace, i.e., the relevant Hilbert space $\mathcal{H}_{\text{rel}}$, as we have shown previously [7].

The expected return time $\overline{\mathrm{T}}_\Psi$ is the expectation value of the first return time, calculated using the probabilities in Eq. (9). Whenever the iterated open quantum channel is recurrent when started from $|\Psi\rangle$, the expected return time can be expressed using the sum of the conditional density operators [7], which we denote by

$$\hat{\varrho}_{\text{cond}} = \lim_{T\to\infty}\sum_{t=0}^{T}\hat{\varrho}_{\text{cond}}(t). \tag{10}$$

Note that, unlike in Eq. (4) for the steady state, there is no factor of $1/T$ here, and so this sum can diverge. If the sum is divergent, then the expected return time is also divergent, otherwise the trace of $\hat{\varrho}_{\text{cond}}$ gives the expected return time,

$$\overline{\mathrm{T}}_\Psi = \operatorname{Tr}\hat{\varrho}_{\text{cond}}. \tag{11}$$

In Ref. [7] we have shown that in the case of unital dynamics, where all eigenvalues of $\hat{\chi}$ are equal, the expected return time $\overline{\mathrm{T}}_\Psi$ can be obtained from the steady state $\hat{\chi}$. In that case, we found that the expected return time is an integer, equal to the dimensionality of $\hat{\chi}$. In the next section we generalize this result, and give a formula that connects the expected return time $\overline{\mathrm{T}}_\Psi$ to the steady state $\hat{\chi}$ for a broader class of dynamical systems.

III. QUANTUM KAC LEMMA

We now formulate the main result of this Rapid Communication. If the initial state $|\Psi\rangle$ is an eigenvector of the steady state $\hat{\chi}$, with nonzero eigenvalue $\lambda \in \mathbb{R}$, then the expected return time is $\overline{\mathrm{T}}_\Psi = 1/\lambda$. In formulas,

$$\hat{\chi}|\Psi\rangle = \lambda|\Psi\rangle, \quad \lambda \neq 0 \Longrightarrow \overline{\mathrm{T}}_\Psi = \frac{1}{\langle\Psi|\hat{\chi}|\Psi\rangle}. \tag{12}$$

This is a direct generalization of the classical Kac lemma [5], where the expected first return time to site n is the reciprocal of the corresponding component π_n of the equilibrium distribution vector π. We therefore refer to Eq. (12) as the quantum Kac lemma.

Note that $\lambda \neq 0$ ensures that $\lim \hat{\varrho}_{\text{cond}}(t) = 0$, proved in the Appendix.

Proof

The quantum Kac lemma is a direct consequence of the statement

$$\hat{\chi}|\Psi\rangle = \lambda|\Psi\rangle \Leftrightarrow \hat{\varrho}_{\text{cond}} = \frac{1}{\langle\Psi|\hat{\chi}|\Psi\rangle}\hat{\chi}. \tag{13}$$

This states that the sum $\hat{\varrho}_{\text{cond}}$ of the conditional density operators, Eq. (10), is proportional to the steady state $\hat{\chi}$ of Eq. (4), if and only if $|\Psi\rangle$ is an eigenstate of $\hat{\chi}$. The trace of the relation on the right-hand side of Eq. (13), using Eq. (11), gives directly the quantum Kac lemma, Eq. (12). It remains to show that Eq. (13) holds.

We now prove Eq. (13) in two steps.

First, we show that whenever $\hat{\varrho}_{\text{cond}}$ is proportional to $\hat{\chi}$, then the initial state is one of the eigenvectors of $\hat{\chi}$. This statement follows from the fact that we can express $\hat{\varrho}_{\text{cond}}$ as

$$\hat{\varrho}_{\text{cond}} = |\Psi\rangle\langle\Psi| + \lim_{T\to\infty}\sum_{t=1}^{T}(\mathcal{MS})^t[|\Psi\rangle\langle\Psi|]. \tag{14}$$

The conditional dynamics maps any density operator $\hat{\varrho}$ to the orthogonal subspace, that is, $\mathcal{MS}[\hat{\varrho}] : \mathcal{H} \to \mathcal{H}_\perp$. Furthermore, $\hat{\varrho}_{\text{cond}}$ is proportional to the steady state, hence by applying Eq. (14) to the initial state $|\Psi\rangle$, we can establish the following,

$$\lambda = \langle\Psi|\hat{\chi}|\Psi\rangle. \tag{15}$$

This concludes the first step of the proof.

The second step in the proof of Eq. (13) is to show that, whenever the initial state $|\Psi\rangle$ is an eigenstate of the density operator of the steady state $\hat{\chi}$, then $\hat{\varrho}_{\text{cond}}$ is proportional to the steady state. We notice that if $|\Psi\rangle$ is an eigenvector of $\hat{\chi} = \hat{\chi}^\dagger$, with eigenvalue $\lambda \neq 0$, then the steady state is given by

$$\hat{\chi} = \lambda|\Psi\rangle\langle\Psi| + \hat{\chi}_\perp, \tag{16}$$

where $\hat{\chi}_\perp = \mathcal{M}[\hat{\chi}]$. On the other hand, $\hat{\chi}$ is a steady state of the dynamics [see Eq. (5)], i.e., $\hat{\chi} = \mathcal{S}[\hat{\chi}]$. Projecting both sides of this latter equation using $\mathcal{M}[\cdot]$, inserting Eq. (16), and rearranging gives us

$$\mathcal{MS}[|\Psi\rangle\langle\Psi|] = \frac{1}{\lambda}(\hat{\chi}_\perp - \mathcal{MS}[\hat{\chi}_\perp]). \tag{17}$$

Finally, inserting Eq. (17) in Eq. (14) gives us

$$\hat{\varrho}_{\rm cond} = |\Psi\rangle\langle\Psi| + \frac{1}{\lambda}\lim_{T\to\infty}\sum_{t=0}^{T}(\mathcal{MS})^t[\hat{\chi}_\perp - \mathcal{MS}[\hat{\chi}_\perp]]$$
$$= \frac{1}{\lambda}\hat{\chi} - \frac{1}{\lambda}\lim_{T\to\infty}(\mathcal{MS})^T[\hat{\chi}_\perp]. \tag{18}$$

To finish the proof of the second step, we need to show that

$$\lim_{t\to\infty}(\mathcal{MS})^t[\hat{\chi}_\perp] = 0. \tag{19}$$

This will be enough because, by assumption, $\lambda \neq 0$. It is clear that $\hat{\chi}_\perp$ is an unnormalized density operator in the relevant Hilbert space. In fact, using the results of Ref. [23], it can be shown that the relevant Hilbert space is already spanned by the first N states in the orbit, i.e., by the states $\hat{\varrho}_{\rm cond}(n)$, with $n = 0,\ldots,N-1$, where N is the dimensionality of the relevant Hilbert space. In formulas,

$$\hat{\chi}_\perp = \sum_{n=0}^{N-1} c_n(\mathcal{MS})^n[|\Psi\rangle\langle\Psi|], \tag{20}$$

with some complex coefficients $c_n \in \mathbb{C}$. Now consider applying $(\mathcal{MS})^t[\cdot]$ to this equation, and take the limit $t\to\infty$. As we show in the Appendix, each term on the right-hand side vanishes. Therefore, the finite sum also vanishes, and so we have Eq. (19). This completes the proof of Eq. (13), and thus of the quantum Kac lemma.

IV. EXAMPLE: EVALUATING HITTING TIME VIA CLASSICAL MONITORING

Besides the class of unital dynamics, the quantum Kac lemma also applies to any system where during each time step the initial state $|\Psi\rangle$ is interfaced to the rest of the system only by incoherent processes. More specifically, it applies when the time-step operator $\mathcal{S}[\cdot]$ can be split into three parts,

$$\hat{\varrho}(t+1) = \mathcal{S}[\hat{\varrho}(t)] = \mathcal{D}_{\rm out}[\mathcal{T}_\perp[\mathcal{D}_{\rm in}[\hat{\varrho}(t)]]]. \tag{21}$$

Here, $\mathcal{T}_\perp[\cdot]$ is a superoperator that acts nontrivially only in $\mathcal{H}_\perp$, defined in Eq. (6), i.e.,

$$\mathcal{T}_\perp[\hat{\varrho}] = |\Psi\rangle\langle\Psi|\hat{\varrho}|\Psi\rangle\langle\Psi| + \sum_\nu \hat{K}_\nu\hat{\varrho}\hat{K}_\nu^\dagger, \tag{22}$$

with Kraus operators $\hat{K}_\nu : \mathcal{H}\to\mathcal{H}_\perp$. The superoperators $\mathcal{D}_{\rm in}[\cdot]$ and $\mathcal{D}_{\rm out}[\cdot]$ describe the incoherent particle transfer from $|\Psi\rangle$ to the rest of the system and vice versa,

$$\mathcal{D}_{\rm in}[\hat{\varrho}] = \sum_{\nu=1}^{N} p_\nu|\Phi_\nu\rangle\langle\Psi|\hat{\varrho}|\Psi\rangle\langle\Phi_\nu| + \hat{A}_{\rm in}\hat{\varrho}\hat{A}_{\rm in}, \tag{23}$$

$$\hat{A}_{\rm in} = \sqrt{\hat{\mathbb{I}} - \sum_{\nu=1}^{N} p_\nu|\Psi\rangle\langle\Psi|}, \tag{24}$$

$$\mathcal{D}_{\rm out}[\hat{\varrho}] = \sum_{\mu=1}^{M} q_\mu|\Psi\rangle\langle\alpha_\mu|\hat{\varrho}|\alpha_\mu\rangle\langle\Psi| + \hat{A}_{\rm out}\hat{\varrho}\hat{A}_{\rm out}, \tag{25}$$

$$\hat{A}_{\rm out} = \sqrt{\hat{\mathbb{I}} - \sum_{\mu=1}^{M} q_\mu|\alpha_\mu\rangle\langle\alpha_\mu|}. \tag{26}$$

Here, the rates p_ν, q_μ are assumed to be positive, and $\sum p_\nu \leqslant 1$, and $\sum q_\mu \leqslant 1$, and the states $|\Phi_\nu\rangle, |\alpha_\mu\rangle \in \mathcal{H}_\perp$. In this case, the condition in Eq. (12) is automatically satisfied, therefore we can apply the quantum Kac lemma and determine $\overline{\mathrm{T}}_\Psi$ as the inverse of the weight of the initial state $|\Psi\rangle$ in the steady state $\hat{\chi}$.

The example above can be used to express the *hitting time* for an iterated quantum dynamical system in terms of a stationary distribution. For this, we let $\mathcal{H}_\perp$ denote the Hilbert space where this quantum dynamics take place, and $|\Phi_1\rangle$ and $|\alpha_1\rangle$ denote the pure states from which and into which the hitting time is sought. We extend the Hilbert space by the extra ancilla state $|\Psi\rangle$, set $N = 1$, $p_1 = 1$, and $M = 1$, $q_1 = 1$. The hitting time from $|\Phi_1\rangle$ to $|\alpha_1\rangle$ is then given by the expected return time to $|\Psi\rangle$.

V. DISCUSSION

We found a relationship between the return time to an initial pure state and the steady state for an iterated quantum channel. If the initial state is an eigenvector of that steady state, then the reciprocal of the corresponding eigenvalue gives us the expected return time for that particular initial state. This is not only a generalization of the results of Ref. [7] for unital channels (which includes unitary dynamics), but also of the Kac lemma about Markov chains.

The condition $\hat{\chi}|\Psi\rangle = \lambda|\Psi\rangle$ is sufficient, but not necessary, for the form of the expected return time on the right-hand side of Eq. (12) to hold. An example is given by the so-called classical-quantum channels [24], defined by the evolution equation

$$\hat{\varrho}_{\rm cq}(t+1) = \mathcal{S}_{\rm cq}[\hat{\varrho}(t)] = \sum_{n=1}^{\dim\mathcal{H}} \langle\varphi_n|\hat{\varrho}(t)|\varphi_n\rangle\hat{\sigma}_n, \tag{27}$$

where the generators of the dynamics $\{\hat{\sigma}_n\}$ are positive and self-adjoint operators with unit trace, and the Hilbert-space vectors $\{|\varphi_n\rangle\}$ are an orthonormal set (we note that a similar, but not equivalent, notion of a classical-quantum channel was introduced in Ref. [25]). The speciality of this type of dynamics can be understood if we restrict our attention only to the dynamics of the diagonal elements. The matrix elements within the diagonal are transformed among themselves by a time-independent transition matrix $\hat{W}$, where $W_{m,n} = \langle\varphi_m|\hat{\sigma}_n|\varphi_m\rangle$ gives the probability that the system makes the $|\varphi_n\rangle \to |\varphi_m\rangle$ transition. Based on $\hat{W}$, one can naturally construct a classical homogeneous Markov chain for which the original Kac lemma is valid and has the same recurrence properties. One can generalize the previous example, and say that Eq. (12) holds for every random walk, where the evolution of the diagonal elements depends only on other diagonal elements. In these cases the dynamics of the diagonal elements can be separated from the dynamics of the off-diagonal elements, and their evolution can be described as a discrete-time classical random walk for which the classical Kac lemma can be applied.

In our generalization of the Kac lemma as well as in the example of the classical-quantum channel, the steady state corresponding to the given initial state fully determines the expected return time. It would be fascinating to know whether there are some even more general classes of quantum channels

for which the knowledge of the steady state is enough to calculate the first return time.

Let us note that there are alternative ways to define a return time. One can avoid the disturbance of the measurement, for example, by taking a new system from an ensemble after each measurement. The Pólya number for quantum walks characterizing recurrence has been defined in this way [26,27]. There are also alternative ways to define iterative open quantum dynamics, e.g., the "open quantum random walks" [28], for which there are known results on recurrence and return time [25].

Our theorem proved to be a useful tool to determine the hitting time for an arbitrary iterated quantum channel by applying an extra monitoring site coupled classically to the initial and final states of the system to be observed. Monitoring the hitting time in this way is a discrete-time analog for the hitting time defined for continuous-time quantum walks, which is defined through the survival time of an excitation in the system where the Hamiltonian includes a trapping site [29–31].

ACKNOWLEDGMENTS

We thank Gernot Alber, András Frigyik, and Melinda Herbáth for stimulating discussions. We acknowledge support by the Hungarian Scientific Research Fund (OTKA) under Contracts No. K83858 and No. NN109651, the Hungarian Academy of Sciences (Lendület Program, LP2011-016), and the Deutscher Akademischer Austauschdienst (Tempus-DAAD Project No. 65049). J.K.A. was supported by the Janos Bolyai Scholarship of the Hungarian Academy of Sciences.

APPENDIX: RECURRENCE OF THE INITIAL STATE

In this Appendix we prove that if the initial state $|\Psi\rangle$ is one of the eigenvectors of the steady state $\hat{\chi}$ of Eq. (4) with eigenvalue $\lambda \neq 0$, then $\lim \hat{\varrho}_{\rm cond}(t) = 0$, or in other words, the process is recurrent (returns with probability 1), i.e.,

$$\hat{\chi}|\Psi\rangle = \lambda|\Psi\rangle, \quad \lambda \neq 0 \Rightarrow \lim_{t\to\infty} (\mathcal{MS})^t[|\Psi\rangle\langle\Psi|] = 0. \tag{A1}$$

For the proof, we use a steady state of the operator $\mathcal{MS}[\cdot]$ defined as

$$\hat{\chi}_{\mathcal{M}} = \lim_{T\to\infty} \frac{1}{T} \sum_{t=0}^{T-1} (\mathcal{MS})^t[|\Psi\rangle\langle\Psi|]. \tag{A2}$$

The operator $\hat{\chi}_{\mathcal{M}}$ is a non-negative, Hermitian operator, and it is nonvanishing if $\lim \mathrm{Tr}\{(\mathcal{MS})^t[|\Psi\rangle\langle\Psi|]\} > C \in \mathbb{R}^+$. The operator $\hat{\chi}_{\mathcal{M}}$ is obviously an unnormalized steady state of $\mathcal{MS}[\cdot]$, i.e.,

$$\mathcal{MS}[\hat{\chi}_{\mathcal{M}}] = \hat{\chi}_{\mathcal{M}}. \tag{A3}$$

Taking the expectation value of the two sides of this relation in the state $|\Psi\rangle$ tells us

$$\langle\Psi|\hat{\chi}_{\mathcal{M}}|\Psi\rangle = 0. \tag{A4}$$

On the other hand, $\langle\Psi|\mathcal{S}[\hat{\chi}_{\mathcal{M}}]|\Psi\rangle = 0$ must hold as well, or else the trace of $\hat{\chi}_{\mathcal{M}}$ would decrease under the mapping $\mathcal{MS}[\cdot]$. Therefore, $\hat{\chi}_{\mathcal{M}}$ is not only a steady state of $\mathcal{MS}[\cdot]$, but also of $\mathcal{S}[\cdot]$, i.e.,

$$\mathcal{S}[\hat{\chi}_{\mathcal{M}}] = \hat{\chi}_{\mathcal{M}}. \tag{A5}$$

We remark that the operator $\mathcal{M}[\cdot]$ does not take us out of the relevant Hilbert space [7], and thus the operator $\hat{\chi}_{\mathcal{M}}$ has all its support in the relevant Hilbert space.

We will prove Eq. (A1) below, by showing that $\mathrm{Tr}\hat{\chi}_{\mathcal{M}} = 0$.

1. Theoretical tools: Decaying subspace, minimal enclosures

In the proof, we will use the concepts of minimal enclosures, and of the decaying subspace, as introduced in Ref. [32]. We recapitulate the definitions, and the basic properties, below.

The decaying subspace $\mathcal{D}$ is defined as

$$\mathcal{D} = \{|\varphi\rangle \in \mathcal{H} : \forall\, \hat{\varrho} \lim_{t\to\infty} \langle\varphi|\mathcal{S}^t[\hat{\varrho}]|\varphi\rangle = 0\}, \tag{A6}$$

i.e., it is spanned by the states which have a vanishing overlap in the long-time limit with any density operator $\hat{\varrho}$ which acts in $\mathcal{H}$. We will use $\mathcal{R}$ to denote its complement, i.e.,

$$\mathcal{R} = \{|\varphi\rangle \in \mathcal{H} : \forall\, |\varphi_{\mathcal{D}}\rangle \in \mathcal{D} : \langle\varphi|\varphi_{\mathcal{D}}\rangle = 0\}. \tag{A7}$$

Time evolution by $\mathcal{S}[\cdot]$ does not lead out of the set $\mathcal{R}$, i.e., $\forall t \in \mathbb{N}, |\varphi_{\mathcal{R}}\rangle \in \mathcal{R}, |\varphi_{\mathcal{D}}\rangle \in \mathcal{D}$:

$$\langle\varphi_{\mathcal{D}}|\mathcal{S}^t[|\varphi_{\mathcal{R}}\rangle\langle\varphi_{\mathcal{R}}|]|\varphi_{\mathcal{D}}\rangle = 0. \tag{A8}$$

This property of $\mathcal{R}$ defines it to be an enclosure [32]. As every enclosure, the space $\mathcal{R}$ can be written as the sum of orthogonal minimal enclosures [32],

$$\mathcal{R} = \mathcal{R}_1 \oplus \mathcal{R}_2 \oplus \cdots \oplus \mathcal{R}_M. \tag{A9}$$

2. Proof

We begin by showing that the initial state $|\Psi\rangle$ lies in the subspace $\mathcal{R}$, i.e.,

$$|\Psi\rangle \in \mathcal{R}. \tag{A10}$$

We show this by splitting the initial state into components from the two subspaces,

$$|\Psi\rangle = c_{\mathcal{D}}|\Psi_{\mathcal{D}}\rangle + c_{\mathcal{R}}|\Psi_{\mathcal{R}}\rangle, \tag{A11}$$

where $c_{\mathcal{D}}, c_{\mathcal{R}} \in \mathbb{C}$, $|\Psi_{\mathcal{D}}\rangle \in \mathcal{D}$, and $|\Psi_{\mathcal{R}}\rangle \in \mathcal{R}$. Using this decomposition, we have

$$\langle\Psi_{\mathcal{D}}|\hat{\chi}|\Psi\rangle = c_{\mathcal{D}}\langle\Psi_{\mathcal{D}}|\hat{\chi}|\Psi_{\mathcal{D}}\rangle + c_{\mathcal{R}}\langle\Psi_{\mathcal{D}}|\hat{\chi}|\Psi_{\mathcal{R}}\rangle, \tag{A12}$$

where $\hat{\chi}$ is the steady state of $\mathcal{S}[\cdot]$ defined by Eq. (4). The first term on the right-hand side vanishes, since $\hat{\chi}$ is a fixed point of $\mathcal{S}[\cdot]$, and so it can have no weight in the decaying subspace, We can bound the second term from above using the Schwarz inequality for the vectors $\hat{\chi}^{1/2}|\Psi_{\mathcal{D}}\rangle$ and $\hat{\chi}^{1/2}|\Psi_{\mathcal{R}}\rangle$, whereby

$$|\langle\Psi_{\mathcal{D}}|\hat{\chi}|\Psi_{\mathcal{R}}\rangle|^2 \leqslant \langle\Psi_{\mathcal{D}}|\hat{\chi}|\Psi_{\mathcal{D}}\rangle\langle\Psi_{\mathcal{R}}|\hat{\chi}|\Psi_{\mathcal{R}}\rangle = 0, \tag{A13}$$

where we used the positivity of $\hat{\chi}$ as well as the fact that $\langle\Psi_{\mathcal{D}}|\hat{\chi}|\Psi_{\mathcal{D}}\rangle = 0$. Thus, $\langle\Psi_{\mathcal{D}}|\hat{\chi}|\Psi\rangle = 0$. On the other hand, since $\hat{\chi}|\Psi\rangle = \lambda|\Psi\rangle$, we have

$$\langle\Psi_{\mathcal{D}}|\hat{\chi}|\Psi\rangle = \lambda c_{\mathcal{D}}\langle\Psi_{\mathcal{D}}|\Psi_{\mathcal{D}}\rangle + \lambda c_{\mathcal{R}}\langle\Psi_{\mathcal{D}}|\Psi_{\mathcal{R}}\rangle = \lambda c_{\mathcal{D}}, \tag{A14}$$

where we used the orthogonality of $\mathcal{D}$ and $\mathcal{R}$, as well as the normalization of the vectors $|\Psi_{\mathcal{D}}\rangle$ and $|\Psi_{\mathcal{R}}\rangle$. Comparing this last result with $\langle\Psi_{\mathcal{D}}|\hat{\chi}|\Psi\rangle = 0$ gives us $c_{\mathcal{D}} = 0$, or, equivalently, $|\Psi\rangle \in \mathcal{R}$, which is Eq. (A10), the first step.

Since $|\Psi\rangle \in \mathcal{R}$, the relevant Hilbert space is the sum of a subset of the minimal enclosures, those that are not orthogonal

to the initial state $|\Psi\rangle$. We let these be the first M' minimal orthogonal enclosures. We can then split the initial states into components from these enclosures,

$$|\Psi\rangle = c_1|\Psi_1\rangle + c_2|\Psi_2\rangle + \cdots + c_{M'}|\Psi_{M'}\rangle, \tag{A15}$$

with $c_j \in \mathbb{C}$, and $c_j \neq 0$ for all $j = 1, \ldots, M'$. The unique steady states of $\mathcal{S}[\cdot]$ in each of these minimal enclosures is $\hat{\chi}_j$. Note that $\langle\Psi|\hat{\chi}_j|\Psi\rangle > 0$ for all j. Any steady state of $\mathcal{S}[\cdot]$ in the relevant Hilbert space is a convex combination of the $\hat{\chi}_j$ [32]. Since $\hat{\chi}_{\mathcal{M}}$ is an unnormalized steady state of $\mathcal{S}[\cdot]$ in the relevant Hilbert space, it can be written as $\hat{\chi}_{\mathcal{M}} = \sum p_j \hat{\chi}_j$ with non-negative weights $p_j \geqslant 0$. Therefore,

$$\langle\Psi|\hat{\chi}_{\mathcal{M}}|\Psi\rangle = \sum_{j=1}^{M'} p_j \langle\Psi|\hat{\chi}_j|\Psi\rangle. \tag{A16}$$

Since $\langle\Psi|\hat{\chi}_j|\Psi\rangle > 0$ for all j, we must have $p_j = 0$ for all j, i.e., the operator $\hat{\chi}_{\mathcal{M}}$ of Eq. (A2) must vanish. This proves Eq. (A1).

[1] H. Poincaré, Acta Math. **13**, A271 (1890).
[2] L. Barreira, in *XIVth International Congress on Mathematical Physics* (World Scientific, Singapore, 2006), pp. 415–422.
[3] D. Aldous and J. A. Fill, *Reversible Markov Chains and Random Walks on Graphs* (2002).
[4] J. G. Kemeny and J. L. Snell, *Finite Markov Chains* (van Nostrand, Princeton, NJ, 1960), Vol. 356.
[5] M. Kac, Bull. Am. Math. Soc. **53**, 1002 (1947).
[6] F. A. Grünbaum, L. Velázquez, A. H. Werner, and R. F. Werner, Commun. Math. Phys. **320**, 543 (2013).
[7] P. Sinkovicz, Z. Kurucz, T. Kiss, and J. K. Asbóth, Phys. Rev. A **91**, 042108 (2015).
[8] H.-P. Breuer and F. Petruccione, *The Theory of Open Quantum Systems* (Oxford University Press, Oxford, UK, 2002).
[9] D. Chruściński, Open Syst. Inf. Dyn. **21**, 1440004 (2014).
[10] R. Alicki and M. Fannes, *Quantum Dynamical Systems* (Oxford University Press, Oxford, UK, 2001).
[11] F. Benatti and R. Floreanini, Int. J. Mod. Phys. B **19**, 3063 (2005).
[12] V. Paulsen, *Completely Bounded Maps and Operator Algebras* (Cambridge University Press, Cambridge, UK, 2002), Vol. 78.
[13] A. Arias, A. Gheondea, and S. Gudder, J. Math. Phys. (N.Y.) **43**, 5872 (2002).
[14] J. A. Holbrook, D. W. Kribs, and R. Laflamme, Quantum Inf. Process. **2**, 381 (2003).
[15] J. Novotný, G. Alber, and I. Jex, Cent. Eur. J. Phys. **8**, 1001 (2010).
[16] K. Kraus, A. Böhm, and J. Dollard, *States, Effects, and Operations Fundamental Notions of Quantum Theory*, Lecture Notes in Physics Vol. 190 (Springer, Berlin, 1983).
[17] E. Sudarshan, P. Mathews, and J. Rau, Phys. Rev. **121**, 920 (1961).
[18] M.-D. Choi, in *Quantum Computation and Quantum Information Theory: Reprint Volume with Introductory Notes for ISI TMR Network School, 12–23 July 1999, Villa Gualino, Torino, Italy*, edited by C. Machiavello, G. M. Palma, and A. Zeilinger (World Scientific, Singapore, 2000), p. 174.
[19] I. Bengtsson and K. Zyczkowski, *Geometry of Quantum States: An Introduction to Quantum Entanglement* (Cambridge University Press Cambridge, UK, 2006).
[20] M. M. Wolf, *Quantum Channels & Operations: Guided Tour*, 2012.
[21] J. Kempe, Contemp. Phys. **44**, 307 (2003).
[22] E. B. Davies, *Quantum Theory of Open Systems* (Academic Press, New York, 1976).
[23] J. Liesen and Z. Strakos, *Krylov Subspace Methods: Principles and Analysis* (Oxford University Press, Oxford, UK, 2012).
[24] M. E. Shirokov, Sb. Math. **204**, 1215 (2013).
[25] C. F. Lardizabal and R. R. Souza, J. Stat. Phys. **159**, 772 (2015).
[26] M. Štefaňák, I. Jex, and T. Kiss, Phys. Rev. Lett. **100**, 020501 (2008).
[27] M. Štefaňák, T. Kiss, and I. Jex, Phys. Rev. A **78**, 032306 (2008).
[28] S. Attal, F. Petruccione, and I. Sinayskiy, Phys. Lett. A **376**, 1545 (2012).
[29] O. Mülken, A. Blumen, T. Amthor, C. Giese, M. Reetz-Lamour, and M. Weidemüller, Phys. Rev. Lett. **99**, 090601 (2007).
[30] O. Mülken, V. Pernice, and A. Blumen, Phys. Rev. E **76**, 051125 (2007).
[31] M. Varbanov, H. Krovi, and T. A. Brun, Phys. Rev. A **78**, 022324 (2008).
[32] B. Baumgartner and H. Narnhofer, Rev. Math. Phys. **24**, 1250001 (2012).

Order by disorder in a four-flavor Mott insulator on the fcc lattice

Péter Sinkovicz,[1] Gergely Szirmai,[1] and Karlo Penc[1,2]
[1]*Institute for Solid State Physics and Optics, Wigner Research Centre for Physics, Hungarian Academy of Sciences, H-1525 Budapest, P.O.B. 49, Hungary*
[2]*MTA-BME Lendület Magneto-optical Spectroscopy Research Group, 1111 Budapest, Hungary*
(Received 18 November 2015; published 18 February 2016)

The classical ground states of the SU(4) Heisenberg model on the face-centered-cubic lattice constitute a highly degenerate manifold. We explicitly construct all the classical ground states of the model. To describe quantum fluctuations above these classical states, we apply linear flavor-wave theory. At zero temperature, the bosonic flavor waves select the simplest of these SU(4) symmetry-breaking states, the four-sublattice-ordered state defined by the cubic unit cell of the fcc lattice. Due to geometrical constraints, flavor waves interact along specific planes only, thus rendering the system effectively two dimensional and forbidding ordering at finite temperatures. We argue that longer-range interactions generated by quantum fluctuations can shift the transition to finite temperatures.

DOI: 10.1103/PhysRevB.93.075137

I. INTRODUCTION

The low-energy physics of the Mott-insulating state in transition-metal oxides with orbital degeneracy is generally described by a Kugel-Khomskii model [1,2], an extension of the Heisenberg model to include the coupling between the spin and orbital degrees of freedom between the ions. For electrons in the e_g orbitals, the local Hilbert space is four dimensional, as next to the twofold spin degeneracy a twofold orbital degeneracy appears. The highest allowed symmetry in the Kugel-Khomskii model is SU(4) [3–5], where all the spins and orbitals are treated equally, leading to the SU(4) Heisenberg model, with the Hamiltonian

$$\mathcal{H} = J \sum_{\langle \mathbf{r},\mathbf{r}' \rangle} \mathcal{P}_{\mathbf{r},\mathbf{r}'}, \tag{1}$$

where $\mathcal{P}_{\mathbf{r},\mathbf{r}'}$ is the permutation operator exchanging the SU(4) flavors between the neighboring sites $\mathbf{r}$ and $\mathbf{r}'$. More generally, if the local Hilbert space is N dimensional, the Hamiltonian (1) is SU(N) symmetric, which, as a special case, includes the standard spin-$\frac{1}{2}$ SU(2) Heisenberg model. The exchange interaction in some f-electron materials, like the CeB_6 [6], is also very close to the SU(4) symmetry.

A further, and quite promising, realization of SU(N) symmetric Mott insulators are ultracold atoms on optical lattices [7], where an elaborate control over almost every single parameter of the model system is routinely utilized. The atoms are trapped optically; both the potential height and the lattice periodicity can be adjusted by tuning the amplitude, phase, and wavelength of the lasers. Even the geometry of the lattice can be changed *in situ* [8]. Further advantage of such systems is that interaction between the atoms can be controlled in a wide range through the access of various scattering resonances [9–11]. In first experiments, the Mott insulator was realized with a dilute gas sample of alkaline atoms loaded to an optical lattice [12–14]. Later, by trapping higher spin alkalies [15] and by cooling alkaline-earth-metal atoms to quantum degeneracy [16,17] has opened the way to Mott insulators with higher spin atoms [18,19]. As a result, one can hope that many antiferromagnets, either encountered in real materials or proposed by theorists for academic interest can now be realized [20–26].

A large variety of ground states has been put forward for the SU(4) Heisenberg models. A quantum liquid with algebraically decaying spin-spin correlations is formed in the one-dimensional chain [4,27] (which is Bethe ansatz solvable [28]), and there is strong evidence for a similar critical state in the hexagonal lattice [29]. In ladder [30], checkerboard lattice [31], and honeycomb lattice with first- and second-neighbor exchange [32], the spins form SU(4) singlets or plaquettes, resulting in translational symmetry-breaking states. In the square lattice, the proposals range from plaquettes [21,33], via liquid [34], to a dimerized state [35]. The SU(4) Heisenberg model in three-dimensional lattices is largely unexplored, with the exception of the cubic lattice, where a resonating plaquette state is suggested in Refs. [36,37].

In this paper, we study the ground state of the SU(4) symmetric Heisenberg antiferromagnet on a face-centered-cubic (fcc) lattice. Assuming an ordered, SU(4) symmetry-breaking ground state, we first study the classical limit of the problem. We shall see that the classical ground state is macroscopically degenerate and that the inclusion of quantum fluctuations in linear flavor-wave theory [38,39] reduces the degeneracy to the order of unity. The flavor-wave excitations will have flat modes along one of the directions. In particular, the Goldstone mode [40] will have zero energy all along this line, which is the consequence of the classical degeneracy. According to the Mermin-Wagner-Hohenberg theorem, such a reduction of the effective dimension of the model, from 3 to 2, destroys long-range order at finite temperatures [41,42]. We show that the inclusion of the ubiquitous, but mostly negligible, next-nearest-neighbor interactions (originating either from exchange terms or generated by quantum fluctuations) couple the otherwise independent directions and stabilize a Néel-ordered phase at finite temperature.

The rest of the paper is organized as follows. In Sec. II, we introduce the model first in terms of the SU(4) spin operators and later in terms of bosonic fields by applying the Schwinger representation. In Sec. III, the classical ordering and, in particular, its degeneracy is discussed in terms of the Schwinger boson mean fields. Quantum fluctuations are

 ©2016 American Physical Society

treated using flavor waves in Sec. IV, where we also show the selection of the ground state. In Sec. V, we introduce an effective second-neighbor interaction to describe the quantum effects at classical level. In Sec. VI, we explore the reduction of the ordered moments due to the quantum fluctuations at zero and finite temperatures. We summarize our results in Sec. VII.

II. SU(4) HEISENBERG MODEL AND ITS BOSONIC REPRESENTATION

Here, we consider the SU(4) symmetric antiferromagnetic ($J > 0$) Heisenberg model on the fcc lattice defined by the Hamiltonian

$$\mathcal{H} = J \sum_{\langle \mathbf{r},\mathbf{r}'\rangle} \sum_{\alpha,\beta} S^{\alpha}_{\beta}(\mathbf{r}) S^{\beta}_{\alpha}(\mathbf{r}'). \tag{2}$$

The first summation is over the nearest neighbors, $S^{\beta}_{\alpha}(\mathbf{r})$ are the generators of the SU(4) Lie algebra at site $\mathbf{r}$, which follow the commutation relation [3]

$$\left[S^{\alpha}_{\beta}(\mathbf{r}), S^{\mu}_{\nu}(\mathbf{r})\right] = \delta_{\alpha,\nu} S^{\mu}_{\beta}(\mathbf{r}) - \delta_{\beta,\mu} S^{\alpha}_{\nu}(\mathbf{r}), \tag{3}$$

where $\alpha,\beta,\mu,\nu \in \{A,B,C,D\}$. Generators on different sites commute. These 16 generators are the spin operators, which can be represented as $d_{\mathrm{IR}} \times d_{\mathrm{IR}}$ matrices, where d_{IR} is the dimension of the irreducible representation of the SU(4) algebra which spans the local Hilbert space. More precisely, since the trace $\sum_{\alpha} S^{\alpha}_{\alpha}(\mathbf{r})$ is proportional to the identity operator, the number of nontrivial generators is only 15.

When the Heisenberg Hamiltonian (2) is realized as the low-energy effective Hamiltonian of a Mott insulator with a single particle per site [43], the local Hilbert space is spanned by the states $\{A,B,C,D\}$, so that $S^{\beta}_{\alpha}|\alpha\rangle = |\beta\rangle$ and zero otherwise. The Hamiltonian (2) then simplifies to Eq. (1), furthermore,

$$\sum_{\alpha} S^{\alpha}_{\alpha}(\mathbf{r}) = \mathbb{I}_{4\times 4}, \tag{4}$$

$\mathbb{I}_{4\times 4}$ being the four-dimensional unit matrix. The four states, we shall also refer to them as flavors or colors, are the four internal states of the particles and form the basis set of the four-dimensional fundamental representation. These four states are the SU(4) analogs of the $\{\uparrow, \downarrow\}$ basis states of spin-$\frac{1}{2}$ representation, which is the fundamental representation of the SU(2) algebra.

The SU(4) Lie algebra [Eq. (3)] can be satisfied with the spin operators of the following form [39,43,44]:

$$S^{\alpha}_{\beta}(\mathbf{r}) = b^{\dagger}_{\mathbf{r},\alpha} b_{\mathbf{r},\beta}, \tag{5}$$

where $b^{\dagger}_{\mathbf{r},\alpha}$ ($b_{\mathbf{r},\beta}$) create (annihilate) a Schwinger boson with color α (β) on site $\mathbf{r}$. In this case, we describe a Mott insulator with an integer number M of bosonic particles on a site, so that

$$\sum_{\alpha} b^{\dagger}_{\mathbf{r},\alpha} b_{\mathbf{r},\alpha} = M, \tag{6}$$

which is equivalent to [cf. Eq. (4)]

$$\sum_{\alpha} S^{\alpha}_{\alpha}(\mathbf{r}) = M \mathbb{I}_{d_{\mathrm{IR}}\times d_{\mathrm{IR}}}. \tag{7}$$

On each site the

$$d_{\mathrm{IR}} = \binom{M+3}{3} \tag{8}$$

dimensional fully symmetrical irreducible representation is realized, pictured by a Young tableau with a single row having M boxes [44]. For a single boson per site, when $M = 1$, we recover the $d_{\mathrm{IR}} = 4$ fundamental representation (its Young tableau is a single box). In the Schwinger boson representation, the exchange interaction on the bonds takes the following form:

$$\sum_{\alpha,\beta} S^{\alpha}_{\beta}(\mathbf{r}) S^{\beta}_{\alpha}(\mathbf{r}') = \sum_{\alpha,\beta} b^{\dagger}_{\mathbf{r},\alpha} b^{\dagger}_{\mathbf{r}',\beta} b_{\mathbf{r},\beta} b_{\mathbf{r}',\alpha}. \tag{9}$$

In the equations above, M is a parameter, allowing for a controlled treatment of fluctuations above the classical state, which is exact for $M \to \infty$. The role of fluctuations will be analyzed in flavor-wave theory as an expansion in $1/M$, just like the spin-wave theory is a $1/S$ expansion around the classical $S \to \infty$ limit. We will keep the parameter M explicit in the following to keep track of the order of the expansion. Our goal is to describe an ordered Mott insulator with a single particle (boson or fermion) per site, which corresponds to $M = 1$.

III. CLASSICAL GROUND STATES

A. Classical states

When thermal and quantum fluctuations are negligible, i.e., in the classical limit, boson operators are characterized by their mean values

$$\langle b_{\mathbf{r},\alpha}\rangle = \sqrt{M}\xi_{\mathbf{r},\alpha}, \tag{10a}$$

$$\langle b^{\dagger}_{\mathbf{r},\alpha}\rangle = \sqrt{M}\xi^{*}_{\mathbf{r},\alpha}, \tag{10b}$$

where the classical field $\boldsymbol{\xi}_{\mathbf{r}}$ is a complex four-dimensional unit vector at site $\mathbf{r}$ with components $\xi_{\mathbf{r},\alpha}$. The classical value of the spin operators (5) are therefore represented by $S^{\alpha}_{\beta}(\mathbf{r}) = \xi^{*}_{\mathbf{r},\alpha}\xi_{\mathbf{r},\beta}$. In this limit, they are no longer operators, instead they are 4×4 Hermitian matrices; furthermore, they are rank-1 projectors. In comparison to the SU(2) case, there, a classical state is described, on similar grounds, by two-component bosons, and therefore, the classical field is a two-component, complex, unit vector. The spin matrix at each site is a 2×2 Hermitian matrix, which is a rank-1 projector too. Such a projector is described by two real numbers, which we can identify as a unit vector in the 3D world, pointing to the direction of local magnetization. In the SU(4) case, the spin operators are characterized by six independent real numbers.

Starting from Eq. (2), the classical energy is obtained by replacing the bosonic operators in Eq. (9) with their mean values given by Eq. (10):

$$E^{(0)} = JM^2 \sum_{\langle \mathbf{r},\mathbf{r}'\rangle} \left| \sum_{\alpha} \xi^{*}_{\mathbf{r},\alpha}\xi_{\mathbf{r}',\alpha} \right|^2. \tag{11}$$

The classical ground-state configuration is determined by minimizing $E^{(0)}$ with respect to the classical fields. Since it is a sum of squares, the energy of the classical ground state

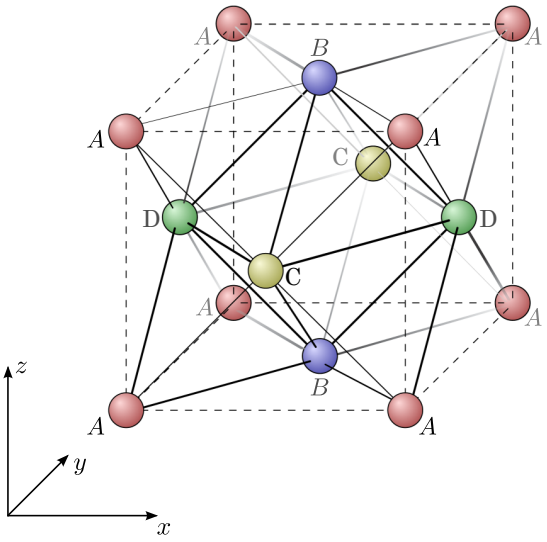


FIG. 1. The cubic unit cell of the four-sublattice-ordered state. The coloring of the sites on the figure corresponds to the $\vartheta_z = 0$ case in Eq. (12).

is bounded from below by zero. Zero energy is realized for configurations with orthogonal $\boldsymbol{\xi}$ vectors on neighboring sites. The simplest classical ground state can be found naturally in the cubic unit cell of the fcc lattice: we can choose four orthogonal colors on the four sublattices, as shown in Fig. 1. However, this is not the only choice. In the following, we are going to show that the classical ground state for the fcc lattice is highly degenerate, and the problem is in fact underconstrained.

B. Degeneracy of the classical ground states

The most general classical configurations consist of two-sublattice-ordered {100} layers as follows: let us consider a single plane of the lattice, for example, the $z = 0$ (001) plane (the normal vector of this plane points to the z direction, e.g., the lowest horizontal plane in Fig. 1). The sites in this plane form a bipartite square lattice and can be colored with two colors, i.e., we can choose two orthogonal $\boldsymbol{\xi}$ vectors as $(\cos\vartheta_0, \sin\vartheta_0, 0, 0)$ and $(-\sin\vartheta_0, \cos\vartheta_0, 0, 0)$. On the following $z = \frac{1}{2}$ plane (we set the lengths of the sides of the cubic unit cell to 1), which is also a square lattice, we can select the two $\boldsymbol{\xi}$ vectors as $(0, 0, \cos\vartheta_{1/2}, \sin\vartheta_{1/2})$ and $(0, 0, -\sin\vartheta_{1/2}, \cos\vartheta_{1/2})$ on the two sublattices, respectively. On the $z = 1$ layer, the allowed $\boldsymbol{\xi}$ vectors are $(\cos\vartheta_1, \sin\vartheta_1, 0, 0)$ and $(-\sin\vartheta_1, \cos\vartheta_1, 0, 0)$; this is the same as on the plane $z = 0$, except for the choice of ϑ. The rule is actually simple: By defining $\boldsymbol{\xi}_A = (1,0,0,0)$, $\boldsymbol{\xi}_B = (0,1,0,0)$, $\boldsymbol{\xi}_C = (0,0,1,0)$, and $\boldsymbol{\xi}_D = (0,0,0,1)$, we may choose two arbitrary, orthogonal linear combinations of $\boldsymbol{\xi}_A$ and $\boldsymbol{\xi}_B$ on layers with integer z, while on layers with half-integer z we choose orthogonal combinations of $\boldsymbol{\xi}_C$ and $\boldsymbol{\xi}_D$. This state can be characterized by the direction of the plane, in this case (001), and by the ordered set of the

$$\{\vartheta_z\} = (\ldots, \vartheta_{-1}, \vartheta_{-1/2}, \vartheta_0, \vartheta_{1/2}, \vartheta_1, \vartheta_{3/2}, \ldots) \qquad (12)$$

values. Clearly, we may have chosen a different plane: the (100), the (010), and the (001) are crystallographically equivalent. The particular choice of the classical fields on the first two, $z = 0$ and $\frac{1}{2}$, planes is without loss of generality since there is always a suitable global SU(4) transformation which can rotate a state into the above form. Setting all the ϑ_z in Eq. (12) to 0 corresponds to the four-sublattice-ordered state shown in Fig. 1: all the three {100} planes are two-sublattice ordered.

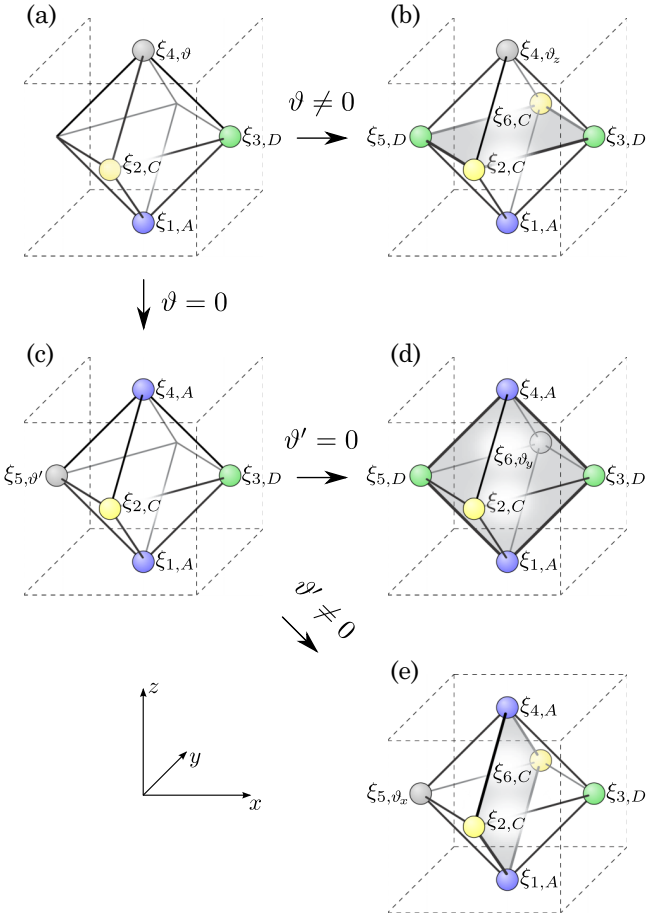


FIG. 2. A selection tree illustrating the degeneracy of the classical configurations on an octahedron. The figure shows how the classical fields on the sites of an octahedron formed by the face centers of the unit cell can be chosen one by one, in a way to minimize $E^{(0)}$ (see the text for details). The gray planes denote the planes colored by two flavors only.

Now, let us show in the following that these are the only possible classical ground-state configurations. For that purpose, let us consider the octahedron shown in Fig. 2, constructed from the face centers of the cubic unit cell. On sites 1, 2, and 3 (a triangle), the global SU(4) rotation allows us to select the classical fields to point to the directions $\boldsymbol{\xi}_A = (1,0,0,0)$, $\boldsymbol{\xi}_C = (0,0,1,0)$, and $\boldsymbol{\xi}_D = (0,0,0,1)$, respectively. On site 4, which is not connected to site 1, we can choose the classical field as a linear combination of $\boldsymbol{\xi}_A$ and $\boldsymbol{\xi}_B$, namely, $\boldsymbol{\xi}_{4,\vartheta} = (\cos\vartheta, \sin\vartheta, 0, 0)$ [see Fig. 2(a)]. On one hand, we may select $\vartheta \neq 0$, then the classical fields on sites 5 and 6 are fully determined, as shown in Fig. 2(b). On the other hand, if $\vartheta = 0$, then the classical field on site 5 can be chosen as $\boldsymbol{\xi}_{5,\vartheta'} = (0, \cos\vartheta', 0, \sin\vartheta')$, orthogonal to the vectors on the neighboring sites [see Fig. 2(c)]. Now, depending on whether

we choose $\vartheta' = 0$ or not, we end up with the two possible configurations shown in Figs. 2(d) and 2(e). To summarize, starting from a given configuration on sites 1, 2, and 3, we find three classes of solutions, where the $\boldsymbol{\xi}$ on one of the sites 4, 5, or 6 is not fully determined. Once the colors on the octahedron are decided, the classical fields on the corners of the cube in Fig. 2(b) are determined too (the corner of the cube and the three nearest-neighbor face centers form a tetrahedron, and there is no coloring freedom for the complete graph of four sites). Similar considerations hold for Figs. 2(d) and 2(e). All possible outcomes 2(b), 2(d) and 2(e) have one thing in common: In each of them we can find four sites on a square which are colored by two colors only, and which define a plane. In Fig. 2(b), this plane is defined by the sites 2,3,6,5, while on outcome 2(d), the plane is defined by sites 1,3,4,5, and finally, on outcome 2(e), the plane is defined by sites 1,6,4,2. These four sites form the basis of the two-sublattice-ordered planes of the previous paragraph, when the fcc lattice is gradually built from the cubic cells, each containing an octahedron and the corner points surrounding it.

C. Helical state

A particularly simple choice of the parameter set $\{\vartheta_z\}$ corresponds to the helical states, defined by a ϑ_z varying linearly with the position of the plane along the z axis, $\vartheta_z = z\,\vartheta$ in Eq. (12). The classical field of the helical state can be expressed in the following recursive form:

$$\boldsymbol{\xi}_{\mathbf{r}+\boldsymbol{\delta}} = \mathbf{R}(-\vartheta/2)\,\boldsymbol{\xi}_{\mathbf{r}}, \tag{13}$$

where the matrix

$$\mathbf{R}(\vartheta) = \begin{bmatrix} 0 & 0 & \cos\vartheta & -\sin\vartheta \\ 0 & 0 & \sin\vartheta & \cos\vartheta \\ \cos\vartheta & -\sin\vartheta & 0 & 0 \\ \sin\vartheta & \cos\vartheta & 0 & 0 \end{bmatrix} \tag{14}$$

transforms the fields from one layer to the following one translated by the vector $\boldsymbol{\delta} = (\frac{1}{2},0,\frac{1}{2})$. Furthermore, we set the classical fields on a specific, reference plane, say the $z = 0$ layer. On this layer, we use a two-sublattice ansatz, where the two sublattices Λ_A and Λ_B alternate in a checkerboard manner. In this plane, we choose $\boldsymbol{\xi}_{\mathbf{r}} = \boldsymbol{\xi}_A$, if $\mathbf{r} \in \Lambda_A$, and $\boldsymbol{\xi}_{\mathbf{r}} = \boldsymbol{\xi}_B$, if $\mathbf{r} \in \Lambda_B$. The classical fields on the other planes can be calculated from this reference plane with the help of the recursion (13).

Now, it is convenient to extend the sublattices Λ_A and Λ_B to the whole fcc lattice: the sites that can be reached from Λ_A in the $z = 0$ plane by translations with $\boldsymbol{\delta}$ belong to sublattice Λ_A. Sublattice Λ_B can be defined similarly. This way, Λ_A consists of the lattice points $\mathbf{r}_i = (m_x,m_y,m_z)$ and $(m_x + \frac{1}{2},m_y,m_z + \frac{1}{2})$, while sites with coordinates $(m_x + \frac{1}{2},m_y + \frac{1}{2},m_z)$ and $(m_x,m_y + \frac{1}{2},m_z + \frac{1}{2})$ belong to Λ_B, where m_x, m_y, and m_z are integers.

Our simple recursion for the helical state (13) allows us to express the classical field explicitly at every site by raising the recursion matrix to the power corresponding to the distance of the site from the $z = 0$ layer. That is,

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\xi}_{(x,y,n/2)} &= \mathbf{R}^n(-\vartheta/2)\cdot\boldsymbol{\xi}_{(x-n/2,y-n/2,0)} \\ &= \mathbf{R}^n(-\vartheta/2)\cdot\tilde{\boldsymbol{\xi}}_{(x,y,n/2)},\end{aligned} \tag{15}$$

where $\tilde{\boldsymbol{\xi}}_{\mathbf{r}} = \boldsymbol{\xi}_A$ for $\mathbf{r} \in \Lambda_A$ and $\tilde{\boldsymbol{\xi}}_{\mathbf{r}} = \boldsymbol{\xi}_B$ for the sites belonging to sublattice Λ_B.

In general, the structure is incommensurate with the lattice spacing, except for special values of ϑ. These include the $\vartheta = 0$ case, where $\mathbf{R}^2(\vartheta)$ is the identity matrix, and we recover the four-sublattice state shown in Fig. 1. The other special case is for $\vartheta = \pi/2$, with a periodicity $\Delta z = 2$: two-sublattice-ordered square lattice planes of pure $\boldsymbol{\xi}_A$ and $\boldsymbol{\xi}_B$ alternate with layers of pure $\boldsymbol{\xi}_C$ and $\boldsymbol{\xi}_D$ such that every fourth layer is identical. Two layers above $\boldsymbol{\xi}_A$ we find a $\boldsymbol{\xi}_B$; consequently, two layers above a $\boldsymbol{\xi}_C$ there is a $\boldsymbol{\xi}_D$ and vice versa. This state is discussed in more detail in the Appendix.

D. Classical spin-spin correlation function in the helical state

The order of the helical state can be characterized with the help of the so-called *ordering wave vectors* [43], which are the positions of the peaks of the static structure factor $S(\mathbf{q})$ [43,45]. The static structure factor is the Fourier transform of the equal-time spin-spin correlation function between spins on sites $\mathbf{0} = (0,0,0)$ and $\mathbf{r}$:

$$S(\mathbf{r}) = \sum_{\alpha,\beta}\left\langle\left[S^{\beta}_{\alpha}(\mathbf{0}) - \frac{M}{4}\delta_{\alpha,\beta}\right]\left[S^{\alpha}_{\beta}(\mathbf{r}) - \frac{M}{4}\delta_{\alpha,\beta}\right]\right\rangle, \tag{16}$$

where the trace of the SU(4) generators is subtracted. Using Eqs. (5) and (10), we take the expectation value in the classical ground state by completely neglecting fluctuations, arriving to

$$S_{\mathrm{cl}}(\mathbf{r}) = M^2\left(\left|\sum_{\alpha}\xi^*_{\mathbf{0},\alpha}\xi_{\mathbf{r},\alpha}\right|^2 - \frac{1}{4}\right). \tag{17}$$

For the helical state, given by Eq. (15), it evaluates to

$$S_{\mathrm{cl}}(\mathbf{r}) = \begin{cases} (1+2\cos 2n_z\vartheta)\frac{M^2}{4} & \text{if } \mathbf{r} = (n_x,n_y,n_z); \\ (1-2\cos 2n_z\vartheta)\frac{M^2}{4} & \text{if } \mathbf{r} = \left(n_x+\frac{1}{2},n_y+\frac{1}{2},n_z\right); \\ -\frac{M^2}{4} & \text{if } \mathbf{r} = \left(n_x+\frac{1}{2},n_y,n_z+\frac{1}{2}\right); \\ -\frac{M^2}{4} & \text{if } \mathbf{r} = \left(n_x,n_y+\frac{1}{2},n_z+\frac{1}{2}\right). \end{cases} \tag{18}$$

For the simple four-sublattice state, i.e., the helical state with $\vartheta = 0$, the correlation function simplifies to

$$S^{(\vartheta=0)}_{\mathrm{cl}}(\mathbf{r}) = \begin{cases} \frac{3}{4}M^2 & \text{if } \mathbf{r} = (n_x,n_y,n_z)\,; \\ -\frac{1}{4}M^2 & \text{otherwise.} \end{cases} \tag{19}$$

The Fourier transform of the correlation function of the helical state, $S_{\mathrm{cl}}(\mathbf{q}) = \sum_{\mathbf{r}} e^{-i\mathbf{r}\cdot\mathbf{q}}S_{\mathrm{cl}}(\mathbf{r})$, consists of delta functions at the ordering wave vectors in the Brillouin zone [Fig. 3(a)]

$$\mathbf{Q}^{\pm}_1 = 2\pi(1,0,\pm\vartheta/\pi), \tag{20a}$$

$$\mathbf{Q}^{\pm}_2 = 2\pi(0,1,\pm\vartheta/\pi), \tag{20b}$$

$$\mathbf{Q}_3 = 2\pi(0,0,1) \tag{20c}$$

and at the equivalent points in the bcc reciprocal lattice spanned by the reciprocal primitive vectors $2\pi(1,1,1)$, $2\pi(1,1,-1)$, and $2\pi(1,-1,1)$. For the four-sublattice case, the three $\mathbf{Q}$ vectors are located at the three distinct high-symmetry points X. As ϑ becomes nonzero, both $\mathbf{Q}_1$ and $\mathbf{Q}_2$ split into two branches. These new points move towards the distinct W points, reaching them at $\vartheta = \pi/2$. The W_1

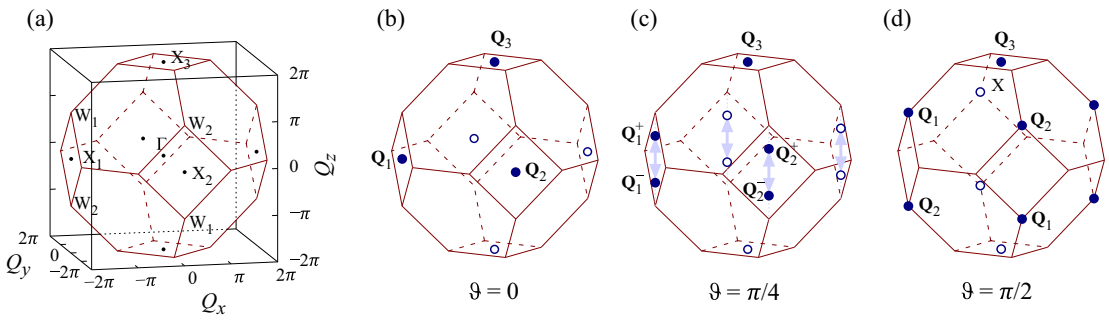


FIG. 3. Ordering vectors of the helical state in the Brillouin zone for three different values of ϑ. (a) The Brillouin zone and high-symmetry points of the fcc lattice. (b) The $\vartheta = 0$ (the four-sublattice-ordered) case: the ordering vectors $\mathbf{Q}_j$ ($j = 1,2,3$) are located at the three distinct X high-symmetry points. (c) The $\vartheta = \pi/4$ case: two of the ordering vectors $\mathbf{Q}_i$ split into $\mathbf{Q}_i^+$ and $\mathbf{Q}_i^-$ ($i = 1,2$). These roots move towards the closest W points as ϑ increases. (d) At $\vartheta = \pi/2$, the ordering wave vectors merge again at the W_1 and W_2 points, but now $\mathbf{Q}_1 := \mathbf{Q}_1^+ = \mathbf{Q}_2^-$ and $\mathbf{Q}_2 := \mathbf{Q}_1^- = \mathbf{Q}_2^+$.

points (and similarly W_2) are equivalent, differing only by a reciprocal primitive vector, therefore, the two branches merge again at $\vartheta = \pi/2$, but now $\mathbf{Q}_1 \equiv \mathbf{Q}_1^+ = \mathbf{Q}_2^-$ (W_1 point) and $\mathbf{Q}_2 \equiv \mathbf{Q}_2^+ = \mathbf{Q}_1^-$ (W_2 point). See Fig. 3 for illustration.

The nonvanishing Fourier components of the correlation function are all equal for the $\vartheta = 0$ and $\pi/2$ cases, with

$$S(\mathbf{Q}_1) = S(\mathbf{Q}_2) = S(\mathbf{Q}_3) = \frac{M}{4}, \tag{21}$$

while for an arbitrary helical state

$$S(\mathbf{Q}_1^\pm) = S(\mathbf{Q}_2^\pm) = \frac{M}{8}, \quad S(\mathbf{Q}_3) = \frac{M}{4}. \tag{22}$$

These can be identified as Bragg peaks in a corresponding scattering experiment [43,45].

IV. QUANTUM CORRECTIONS FROM LINEAR FLAVOR-WAVE THEORY

We have seen in the previous section that the classical energy [Eq. (11)] takes its minimum value on a highly degenerate set of configurations. In this section, we show that the inclusion of quantum fluctuations lifts the degeneracy and selects a specific long-range-ordered state through the *order-by-disorder* mechanism [46,47].

For simplicity, we construct the linear flavor-wave theory over the helical state of Sec. III C. That is, we look for quantum fluctuations over the classical configurations given by Eq. (15). Our calculation is in the spirit of Ref. [48], where the degeneracy of the SU(3) Heisenberg model on the square lattice was treated.

Using Eq. (14) as a canonical transformation, we introduce new boson operators as

$$\tilde{b}_{(x,y,n/2),\alpha} = \sum_\beta [\mathbf{R}^n(\vartheta/2)]_{\alpha\beta} b_{(x,y,n/2),\beta}. \tag{23}$$

Since the mean value $\langle \tilde{b}_{\mathbf{r},\alpha} \rangle = \sqrt{M}\tilde{\xi}_{\mathbf{r},\alpha}$, the definition (23) reduces to Eq. (15) in the classical limit. The classical field $\tilde{\xi}_{\mathbf{r},\alpha}$ has a single nonzero component, which is equal to $\boldsymbol{\xi}_A, \boldsymbol{\xi}_B$ for $\mathbf{r} \in \Lambda_A, \Lambda_B$, respectively. This canonical transformation allows us to replace the transformed Schwinger bosons $\tilde{\mathbf{b}}$ with Holstein-Primakoff bosons $\mathbf{c}$ [38]:

$$\tilde{b}_{\mathbf{r},\alpha} = \begin{cases} c_{\mathbf{r},\alpha} & \text{if } \mathbf{r} \notin \Lambda_\alpha, \\ \sqrt{M - \mu_{\mathbf{r},\alpha}} & \text{if } \mathbf{r} \in \Lambda_\alpha, \end{cases} \tag{24a}$$

where

$$\mu_{\mathbf{r},\alpha} = \sum_{\beta \neq \alpha} c^\dagger_{\mathbf{r},\beta} c_{\mathbf{r},\beta}. \tag{24b}$$

The Holstein-Primakoff bosons describe transverse fluctuations around the classical ordering. The amount of these fluctuation is measured by the occupation number $\mu_{\mathbf{r},\alpha}$. This quantity is also referred to as the spin reduction.

A. Calculation of the zero-point energy

We calculate the ϑ dependence of the quantum correction to the classical energy first by expanding Eq. (24a) in powers of $1/M$, then through Eqs. (23) and (9) we also expand the Hamiltonian (2). The first term in the Hamiltonian is the classical energy $E^{(0)}$, proportional to M^2 [see Eq. (11)]. It vanishes because the classical ground-state energy is zero. The second term $\propto M^{3/2}$ vanishes since the state is a local minimum of the classical energy. Therefore, the leading term is proportional to M, which is quadratic in the boson operators. The diagonalization of this quadratic term with a Bogoliubov transformation allows us to calculate the ground-state energy resulting from fluctuations.

To progress further, we introduce a unit cell containing two sites, one from each of the sublattices Λ_A and Λ_B. The position of the unit cell is given by $\mathbf{r} = (m_x, m_y, m_z)$ in the planes with integer z coordinate and $\mathbf{r} = (m_x + \frac{1}{2}, m_y, m_z + \frac{1}{2})$ in the planes with half-integer z coordinate. The unit cell contains one site from sublattice Λ_A (with coordinate $\mathbf{r}$), and another one from sublattice Λ_B with coordinate $\mathbf{r} + \boldsymbol{\delta}'$, where $\boldsymbol{\delta}' = (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0)$. A relatively simple notation can be obtained by grouping the six Holstein-Primakoff bosons of the unit cell (three for each site) into the formal vector

$$\Phi_{\mathbf{r}} = (c_{\mathbf{r},B}, c_{\mathbf{r},C}, c_{\mathbf{r},D}, c_{\mathbf{r}+\boldsymbol{\delta}',A}, c_{\mathbf{r}+\boldsymbol{\delta}',C}, c_{\mathbf{r}+\boldsymbol{\delta}',D})^T \tag{25}$$

and its Fourier transform

$$\Phi_q = \sqrt{\frac{2}{N_s}} \sum_{\mathbf{r}} \Phi_{\mathbf{r}}\, e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}, \tag{26}$$

where N_s denotes the number of lattice sites.

In the semiclassical expansion we use the approximate form (up to the order of $M^{-3/2}$)

$$\sqrt{M-\mu_{\mathbf{r},\alpha}} \approx \sqrt{M}\Big(1-\frac{\mu_{\mathbf{r},\alpha}}{2M}\Big), \tag{27}$$

and we substitute it into the Hamiltonian (1), which to leading order in M gives

$$\mathcal{H}^{(2)} = JM \sum_{\mathbf{q}\in\mathrm{BZ}} \big[4\,\Phi_{\mathbf{q}}^{\dagger}\Phi_{\mathbf{q}} + 2\big(\Phi_{\mathbf{q}}^{T}\mathbf{B}^{*}(\mathbf{q})\Phi_{-\mathbf{q}} + \mathrm{H.c.}\big)\big], \tag{28}$$

where the matrix $\mathbf{B}(\mathbf{q})$ is

$$\mathbf{B}(\mathbf{q}) = \begin{bmatrix} -c_xc_y & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & c_yc_zc_\vartheta^2 & -ic_ys_zc_\vartheta s_\vartheta & 0 & -ic_xs_zc_\vartheta s_\vartheta & c_xc_zs_\vartheta^2 \\ 0 & ic_ys_zc_\vartheta s_\vartheta & -c_yc_zs_\vartheta^2 & 0 & -c_xc_zc_\vartheta^2 & -ic_xs_zc_\vartheta s_\vartheta \\ 0 & 0 & 0 & -c_xc_y & 0 & 0 \\ 0 & ic_xs_zc_\vartheta s_\vartheta & -c_xc_zc_\vartheta^2 & 0 & -c_yc_zs_\vartheta^2 & ic_ys_zc_\vartheta s_\vartheta \\ 0 & c_xc_zs_\vartheta^2 & ic_xs_zc_\vartheta s_\vartheta & 0 & -ic_ys_zc_\vartheta s_\vartheta & c_yc_zc_\vartheta^2 \end{bmatrix}. \tag{29}$$

Above, we introduced the following shorthand notations: $c_\nu = \cos(q_\nu/2)$ and $s_\nu = \sin(q_\nu/2)$ for $\nu = x,y,z$; furthermore, $c_\vartheta = \cos(\vartheta/2)$ and $s_\vartheta = \sin(\vartheta/2)$.

The Hamiltonian (28) is quadratic in the boson operators, so it can be diagonalized by choosing a new set of operators with a Bogoliubov transformation

$$\tilde{\Phi}_{\mathbf{q}} = \mathbf{U}(\mathbf{q})^{\dagger}\Phi_{\mathbf{q}} + \mathbf{V}^{\dagger}(\mathbf{q})\Phi_{-\mathbf{q}}^{\dagger}, \tag{30a}$$

$$\tilde{\Phi}_{-\mathbf{q}}^{\dagger} = \mathbf{U}^{T}(\mathbf{q})\Phi_{-\mathbf{q}}^{\dagger} + \mathbf{V}^{T}(\mathbf{q})\Phi_{\mathbf{q}}. \tag{30b}$$

The transformation matrices are composed of the eigenvectors of the Bogoliubov matrix

$$\mathbf{M}(\mathbf{q}) = 4JM\begin{bmatrix} \mathbb{I}_{6\times6} & \mathbf{B}(\mathbf{q}) \\ -\mathbf{B}^{*}(\mathbf{q}) & -\mathbb{I}_{6\times6} \end{bmatrix}, \tag{31}$$

where $\mathbb{I}_{6\times6}$ is the six-dimensional identity matrix. The Bogoliubov matrix $\mathbf{M}$ defines the dynamics of the boson vector $(\Phi_{\mathbf{q}}, \Phi_{-\mathbf{q}}^{\dagger})$:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix}\Phi_{\mathbf{q}} \\ \Phi_{-\mathbf{q}}^{\dagger}\end{pmatrix} = \mathbf{M}(\mathbf{q})\begin{pmatrix}\Phi_{\mathbf{q}} \\ \Phi_{-\mathbf{q}}^{\dagger}\end{pmatrix}. \tag{32}$$

The characteristic equation for the eigenvalues and transformation matrices $\mathbf{U}$ and $\mathbf{V}$ is given by

$$\sum_k M_{j,k}(\mathbf{q})T_{k,i}(\mathbf{q}) = \omega_i T_{j,i}(\mathbf{q}), \tag{33}$$

where the transformation matrices are arranged in a block matrix form

$$\mathbf{T}(\mathbf{q}) = \begin{pmatrix} \mathbf{U}(\mathbf{q}) & -\mathbf{V}(\mathbf{q}) \\ -\mathbf{V}(\mathbf{q}) & \mathbf{U}(\mathbf{q}) \end{pmatrix}, \tag{34}$$

and $i,j,k \in \{1,2,\ldots,12\}$. The eigenvalues are real and come in $\pm$ pairs. We order these eigenvalues, so that $\omega_1 > \omega_2 > \ldots > \omega_6 > 0$ and $\omega_i = -\omega_{6+i}$. The eigenvectors are normalized with the requirement that the new operators $\tilde{\Phi}$ fulfill boson commutation relations

$$\mathbf{U}(\mathbf{q})\mathbf{U}^{\dagger}(\mathbf{q}) - \mathbf{V}(\mathbf{q})\mathbf{V}^{\dagger}(\mathbf{q}) = \mathbb{I}_{6\times6}, \tag{35a}$$

$$\mathbf{V}^{\dagger}(\mathbf{q})\mathbf{U}^{*}(\mathbf{q}) - \mathbf{U}^{\dagger}(\mathbf{q})\mathbf{V}^{*}(\mathbf{q}) = \mathbb{O}_{6\times6}, \tag{35b}$$

where $\mathbb{O}_{6\times6}$ is the six-dimensional zero matrix.

After diagonalization, the correction to the ground-state energy per site evaluates to

$$\frac{E^{(2)}(\vartheta)}{N_s} = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{6}\left[\int_{\mathrm{BZ}}\frac{d^3\mathbf{q}}{32\pi^3}\,\frac{\omega_i(\mathbf{q})}{2} - 4JM\right], \tag{36}$$

where $32\pi^3$ is the volume of the Brillouin zone shown in Fig. 3(a) and the factor $\frac{1}{2}$ in front of the integral takes into account that our unit cell has two sites. The correction is an even function of ϑ, $E^{(2)}(\vartheta) = E^{(2)}(-\vartheta)$ and is periodic with period π, $E^{(2)}(\vartheta) = E^{(2)}(\pi+\vartheta)$ [while the $\vartheta \to \vartheta + 2\pi$ leaves the configurations in the helical state unaltered, the periodicity in π is less obvious: $\vartheta \to \vartheta + \pi$ exchanges the C and D basis states, see Eqs. (13) and (14), which can be undone by a global SU(4) rotation]. The ground-state energy (36) is plotted for $0 \leqslant \vartheta \leqslant \pi$ in Fig. 4. The lowest-energy configuration is realized for $\vartheta = 0$. Thus, this analysis shows that among the helical states, the ground state is the one with $\vartheta = 0$, which is a nonhelical, simple, four-sublattice state.

B. $\vartheta = 0$ ground state

For a general ϑ, the characteristic equation of the Bogoliubov matrix (33) can be evaluated only numerically. However, in the $\vartheta = 0$ and $\pi/2$ cases, it becomes analytically solvable. Here, we illustrate this property for $\vartheta = 0$ (the $\vartheta = \pi/2$ case is treated in the Appendix).

In this case, the Bogoliubov matrix (31) can be transformed into a block-diagonal matrix, where the blocks are all of dimension 2×2, and are all of the same general form

$$\mathbf{M}_{\nu}^{\mathrm{sq}} = 4JM\begin{bmatrix} 1 & \gamma_{\nu}^{\mathrm{sq}}(\mathbf{q}) \\ -\gamma_{\nu}^{\mathrm{sq}}(\mathbf{q}) & -1 \end{bmatrix}, \quad \nu \in \{x,y,z\} \tag{37}$$

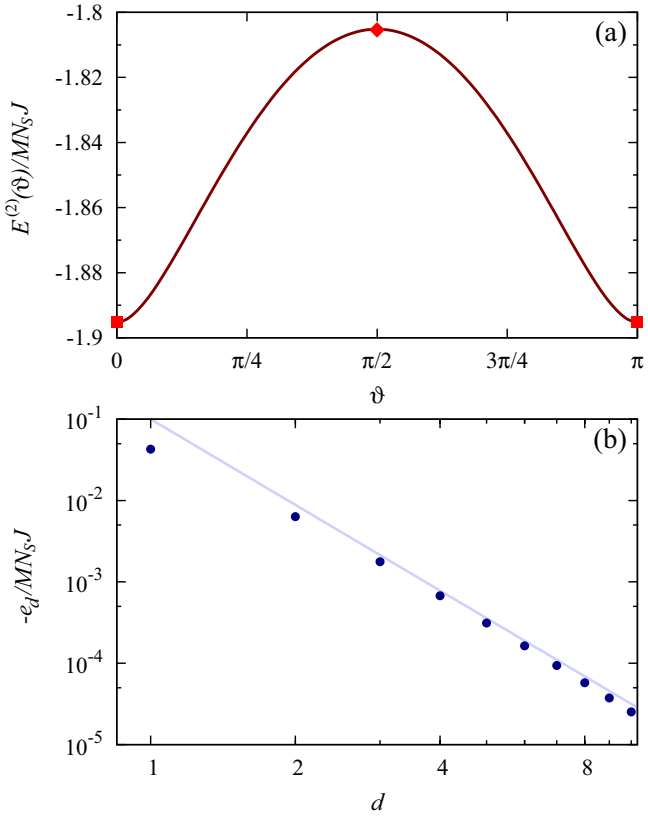


FIG. 4. (a) Quantum correction to the energy of the helical state as a function of ϑ. The energy takes its minimum value for $\vartheta = 0$ and π, which correspond to the four-sublattice state shown in Fig. 1. The red squares and the diamond correspond to the values given in Eqs. (41) and (A4), respectively. (b) The coefficients e_d of the Fourier series of the energy, defined as $E^{(2)}(\vartheta)/N_s = e_0 + \sum_{d=1}^{\infty} e_d \cos 2d\vartheta$, plotted on a log-log scale. The first two coefficients are $e_0 = -1.843MJ$ and $e_1 = -0.043MJ$. Further coefficients scale with the index d as $\propto d^{-3.5}$ (straight line) showing a nonanalytical behavior at $\vartheta = 0$.

where

$$\gamma_x^{\mathrm{sq}}(\mathbf{q}) = \cos\frac{q_y}{2}\cos\frac{q_z}{2}, \tag{38a}$$

$$\gamma_y^{\mathrm{sq}}(\mathbf{q}) = \cos\frac{q_x}{2}\cos\frac{q_z}{2}, \tag{38b}$$

$$\gamma_z^{\mathrm{sq}}(\mathbf{q}) = \cos\frac{q_x}{2}\cos\frac{q_y}{2}. \tag{38c}$$

The only difference between the blocks is in $\gamma_\nu^{\mathrm{sq}}(\mathbf{q})$. All three different blocks, with different ν, participate twice in the matrix (31).

This simplification is the consequence of the highly symmetric, four-sublattice structure of this phase. To be more specific, there is a single flavor on each site, i.e., the mean value of the Schwinger boson operators is one of the basis vectors: $\boldsymbol{\xi}_A$, $\boldsymbol{\xi}_B$, $\boldsymbol{\xi}_C$, or $\boldsymbol{\xi}_D$. There is a one-to-one correspondence between a pair of colors: AB, AC, AD, BC, BD, CD, and a specific plane characterized by its normal vector [one of (1,0,0), (0,1,0), or (0,0,1)] and its parity (whether it has integer or half-integer coordinates along the direction of the normal vector). Inside each plane, the corresponding specific two colors alternate in a checkerboard manner. The interaction term in the Hamiltonian between a pair of neighboring sites involves the product of two Holstein-Primakoff bosons. One of them is from the first and the other one is from the other site. The Holstein-Primakoff boson on the first site has to be from the same flavor as the classical ordering of the other site, and vice versa in order to survive the contraction of the indices in Eq. (9) (see also Appendix A1 in Ref. [29]). Therefore, for a given flavor pair, there is a specific plane out of the $6 = 3 \times 2$ different ones (3 for the directions and 2 for the parity) within which the given type of boson flavors can interact. Such an interaction is described by one of the $\mathbf{M}_\nu^{\mathrm{sq}}$ matrices. In fact, for the state depicted in Fig. 1, the A and B bosons interact only within the planes characterized by integer z values, the C and D bosons interact within planes with half-odd integer z values, the A and D bosons within the plane with integer x values, and so on.

Since these parts of the Hamiltonian are independent, they can be diagonalized separately. The excitation energies of the above $\mathbf{M}_\nu^{\mathrm{sq}}$ matrices are

$$\omega_\nu^{\mathrm{sq}}(\mathbf{q}) = 4JM\sqrt{1 - \left|\gamma_\nu^{\mathrm{sq}}(\mathbf{q})\right|^2}. \tag{39}$$

The dispersion $\omega_\nu(\mathbf{q})$ is flat along the ν direction, as q_ν is missing from the corresponding $\gamma_\nu^{\mathrm{sq}}(\mathbf{q})$ in Eqs. (38). The dispersions are shown in Fig. 5(a).

The contribution to the single-site energy from the different $\mathbf{M}_\nu^{\mathrm{sq}}$ blocks give the same value:

$$\frac{E_{\mathrm{sq}}^{(2)}}{N_s} = -0.316JM. \tag{40}$$

Adding all these contributions, the total quantum correction to the energy, Eq. (36), evaluates to

$$\frac{E_{\vartheta=0}^{(2)}}{N_s} = 6\frac{E_{\mathrm{sq}}^{(2)}}{N_s} = -1.896\,JM \tag{41}$$

We draw the attention to the flat, zero-energy mode between the Γ and X points in the Brillouin zone. It is the Goldstone mode associated with the continuous classical degeneracy of the ground state [40], namely, that each plane can be independently rotated in the SU(4) space, while keeping the two-sublattice structure within the plane, as expressed by the freedom of choosing the ϑ's in Eq. (12).

V. HAMILTONIAN EXTENDED WITH SECOND-NEIGHBOR EXCHANGE

In the case of the SU(2) spin systems, quantum fluctuations prefer collinear structures, thus it is customary to approximate the effect of quantum and thermal excitations by adding a *biquadratic* term with a negative coefficient of the order of $1/S$ to the classical energy, S being the length of the SU(2) spin [47,49]. The classical solution of such an effective model reproduces the phenomena attributed to quantum fluctuations, among others, the magnetization plateaus on frustrated lattices (see Ref. [50] for a more detailed discussion). In the case of SU(4) spins, however, the notion of the collinearity is not so obvious [for example, adding naïvely a $|\sum_\alpha \xi_{\mathbf{r},\alpha}^* \xi_{\mathbf{r}',\alpha}|^4$ term to the expression of classical energy, Eq. (11), does not help in

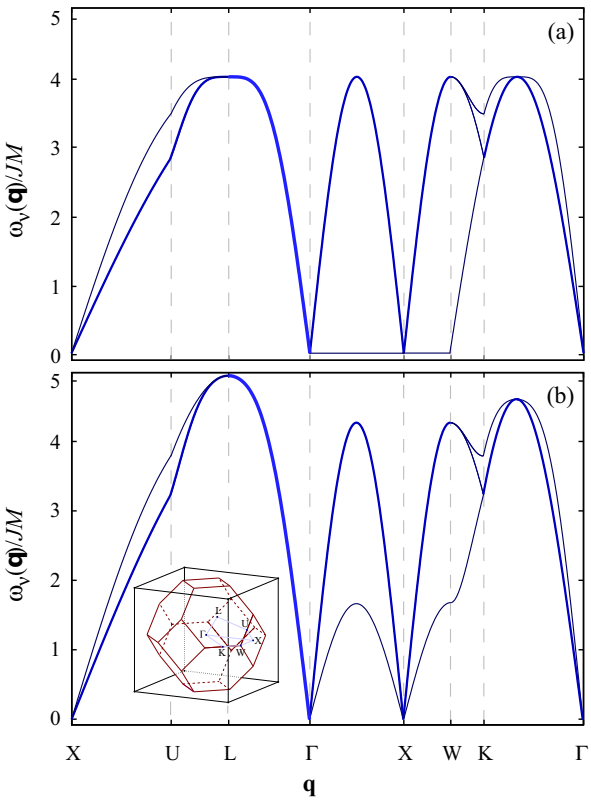


FIG. 5. Dispersion relation of the flavor waves for the Heisenberg model with nearest-neighbor interactions only (a), and with a finite second-neighbor ferromagnetic exchange $J_2/J = -0.086$ (b), along the path in the Brillouin zone shown in the inset. The degeneracy ($\times 1$, $\times 2$, and $\times 3$) of each mode is proportional to the width of the lines and the color becomes lighter with increasing degeneracy.

the selection of the ground state]. Furthermore, the nature and origin of the degeneracy we need to reduce is different in the SU(2) and SU(4) case: while in the frustrated SU(2) models the ground states do not optimize the bond energies, in the SU(4) case each bond is fully satisfied at the classical level.

A hint is given by the observation that the second- (i.e., next-nearest-) neighbor ferromagnetic interaction is compatible with $\vartheta = 0$ four-sublattice order selected by the fluctuations. For this reason, we extend the Hamiltonian with the exchanges over the $\langle\langle \mathbf{r},\mathbf{r}'\rangle\rangle$ next-nearest-neighbor pairs

$$\mathcal{H}^{\text{ext}} = \mathcal{H} + J_2 \sum_{\langle\langle \mathbf{r},\mathbf{r}'\rangle\rangle} \sum_{\alpha,\beta} S^\alpha_\beta(\mathbf{r}) S^\beta_\alpha(\mathbf{r}'). \tag{42}$$

Each site has 12 nearest-neighbor and 6 second-neighbor sites. We note in passing that antiferromagnetic $J_2 > 0$ interactions lead to frustration in the usual sense: we are not able to satisfy all the bonds at the same time. Following, we restrict the discussion of the spectrum to the antiferromagnetic J and ferromagnetic J_2, in order to be compatible with the $\vartheta = 0$ ordering, which is realized for any $J > 0$ and $J_2 < 0$ values. The classical energy of the ground state is then

$$\frac{E^{(0)}}{N_s} = 3J_2M^2, \tag{43}$$

while the expectation value of the Hamiltonian (42) in the helical state is

$$\frac{E^{(0)}(\vartheta)}{N_s} = (3 - \sin^2\vartheta)J_2M^2. \tag{44}$$

Comparing this with the energy of the quantum fluctuations, in particular with Fig. 4(b), we get that the fluctuations can be described by choosing

$$J_2^{\text{eff}} = \frac{2e_1}{M^2} = -0.086\frac{J}{M} \tag{45}$$

at the classical level. In analogy to the SU(2) case [51,52], we anticipate that the addition of this effective coupling will provide a finite, $\propto 1/M^2$, dispersion to the zero mode between Γ and X.

To get the dispersion with finite J_2, we repeat below the calculation presented in Sec. IV, now with the inclusion of the J_2 coupling. The J_2 does not bring in any further complication, as it simply couples the Holstein-Primakoff bosons in different layers, so that the Bogoliubov matrix (37) is replaced by

$$\mathbf{M}^{\text{ext}}_\nu = \mathbf{M}^{\text{sq}}_\nu + \mathbf{M}^{\text{NNN}}, \tag{46}$$

where $\mathbf{M}^{\text{sq}}_\nu$ is still given by Eq. (37), and

$$\mathbf{M}^{\text{NNN}} = -6J_2M\begin{bmatrix}\bar{\gamma}^{\text{NNN}}(\mathbf{q}) & 0\\ 0 & -\bar{\gamma}^{\text{NNN}}(\mathbf{q})\end{bmatrix}, \tag{47}$$

with

$$\bar{\gamma}^{\text{NNN}}(\mathbf{q}) = 1 - \frac{\cos q_x + \cos q_y + \cos q_z}{3}. \tag{48}$$

This modified Bogoliubov matrix has the following spectrum:

$$\omega^{\text{ext}}_\nu(\mathbf{q}) = M\sqrt{[4J - 6J_2\bar{\gamma}^{\text{NNN}}(\mathbf{q})]^2 - \left[4J\gamma^{\text{sq}}_\nu(\mathbf{q})\right]^2}. \tag{49}$$

The spectrum, depicted in Fig. 5(b) for the above-mentioned effective value $J_2/J = -0.086$, is modified from that of the $J_2 = 0$ case of Fig. 5(a), most noticeable along the path connecting the Γ and X points, where the spectrum obtains a dispersion now. It is interesting to observe, and also useful for testing the consistency of our calculation, that the ferromagnetic nature of the next-nearest-neighbor coupling is manifested in the diagonal part of the Bogoliubov matrix (47). Thus, in the case of $J \ll |J_2|$ the dispersion $\omega_\nu \propto |\mathbf{q}|^2$, as it is expected for a ferromagnetic system, except in the close vicinity of the Γ point, where the dispersion remains linear with $|\mathbf{q}|$ for $|\mathbf{q}| \lesssim \sqrt{J/J_2}$.

VI. SPIN REDUCTION AND ORDERING AT ZERO AND FINITE TEMPERATURES

The reduction of the magnetization, $\mu_{\mathbf{r},\alpha}$ defined by Eq. (24b), is a measure of how good our approximation is. In the semiclassical expansion, Eq. (27) in particular, we assume that $\mu_{\mathbf{r},\alpha} \ll M$. Therefore, for $M = 1$ one needs the reduction to be much smaller than unity. More permissively, e.g., for allowing higher values of M, one can require $\mu_{\mathbf{r},\alpha}$ to be at least finite. In this section, we calculate the reduction for zero and finite temperatures for the four-sublattice state.

The mean value of the spin on sublattice Λ_A reads as

$$\left\langle S^A_A(\mathbf{r})\right\rangle = M - \langle\mu_{\mathbf{r},A}\rangle, \quad \mathbf{r} \in \Lambda_A \tag{50}$$

and an equivalent expression holds for $\langle S_B^B(\mathbf{r})\rangle$ on the Λ_B sublattice. The reduction can be expressed with the Fourier-transformed boson vector

$$\langle \mu_{\mathbf{r},A}\rangle = \sum_{\alpha\in\{B,C,D\}}\sum_{m=1}^{12}\int_{\mathrm{BZ}}\frac{d\mathbf{q}}{32\pi^3}T^*_{\alpha,m}(\mathbf{q})T_{\alpha,m}(\mathbf{q})\,C_m(\mathbf{q})\,, \quad (51)$$

where

$$C_m(\mathbf{q}) = \begin{cases}\langle\tilde{\Phi}^\dagger_m(\mathbf{q})\tilde{\Phi}_m(\mathbf{q})\rangle & \text{for } m = 1,\ldots,6,\\ 1+\langle\tilde{\Phi}^\dagger_m(\mathbf{q})\tilde{\Phi}_m(\mathbf{q})\rangle & \text{for } m = 7,\ldots,12.\end{cases} \quad (52)$$

A. Spin reduction at zero temperature

At zero temperature, the quasiparticle occupation is zero, therefore, we have $C_m(\mathbf{q}) = 1$ only for $m = 7,\ldots,12$. For the four-sublattice state and for $J_2 = 0$, Eq. (51) can be evaluated to

$$\langle \mu_{\mathbf{r},A}\rangle = \frac{1}{2}\sum_\nu\int_{\mathrm{BZ}}\frac{d^3\mathbf{q}}{32\pi^3}\left[\frac{1}{\sqrt{1-|\gamma^{\mathrm{sq}}_\nu(\mathbf{q})|^2}}-1\right] \approx 0.590. \quad (53)$$

It is noteworthy to compare the result of the spin reduction with that of a single square lattice. In our case, the spin reduction is three times the value of that of the square lattice case, which was found to be approximately 0.197 [53]. The factor 3 can be understood as the contribution of the three Holstein-Primakoff bosons describing fluctuations in one of the three orthogonal square lattice crystallographic planes. The small finite spin reduction gives a consistent result with our initial assumption of the ground state being ordered. At the same time, this value is quite large for a three-dimensional magnet, and the reason is the flat dispersion between the Γ and X points in the Brillouin zone [Fig. 5(a)] and thus the reduction of the dimensionality from 3 to 2.

For a finite $J_2 < 0$, fluctuations are interacting along all three directions, and the number of average bosons decreases rapidly with the increase of the ferromagnetic J_2, as seen in Fig. 6 at the $T = 0$ point. For example, a small $J_2/J = -0.01$ reduces the fluctuations to 0.42, and for the $J_2^{\mathrm{eff}} = 0.086J$ [taking $M = 1$ in Eq. (45)] the $\langle\mu_{\mathbf{r},A}\rangle \lesssim 0.1$.

B. Spin reduction at finite temperatures

At low but finite temperature, the Holstein-Primakoff bosons obtain thermal occupation. The spin reduction now contains contributions both from quantum and thermal fluctuations

$$\langle \mu_{\mathbf{r},A}\rangle = \sum_{\nu=x,y,z}\int_{\mathrm{BZ}}\frac{d^3\mathbf{q}}{32\pi^3}\left\{\frac{4JM}{\omega^{\mathrm{ext}}_\nu(\mathbf{q})}\left[n_\nu(\mathbf{q})+\frac{1}{2}\right]-\frac{1}{2}\right\}, \quad (54)$$

where

$$n_\nu(\mathbf{q}) = \frac{1}{\exp\left[\omega^{\mathrm{ext}}_\nu(\mathbf{q})/T\right]-1} \quad (55)$$

is the occupation number of the bosonic excitations.

For $J_2 = 0$, the integral evaluates to finite value only at the $T = 0$ point, its value given in Eq. (53). At finite temperature, thermal occupation of the Goldstone mode diverges along the line where the spectrum [Eq. (39)] is constant zero. As a consequence, the integral becomes divergent for $T > 0$. This is in accordance with the Mermin-Wagner-Hohenberg theorem [41,42], as the effective dimensionality of the problem in the linear flavor wave approximation is 2 when $J_2 = 0$.

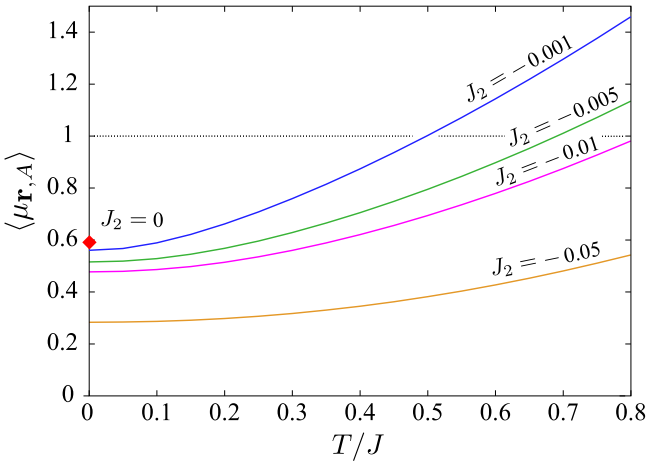


FIG. 6. The spin reduction vs temperature for different values of the ferromagnetic, next-to-nearest-neighbor coupling J_2. For $J_2 = 0$, the spin reduction is finite only at zero temperature, otherwise it diverges. For nonzero J_2, the spin reduction is finite also at nonzero temperatures. The horizontal gray line at $\mu_{\mathbf{r},A} = 1$ indicates an upper limit of the model's applicability.

For finite J_2, the integral (54) with the dispersion (48) yields a finite spin reduction even at finite temperatures. We plot the value $\langle\mu_{\mathbf{r},A}\rangle$ for different values of J_2 in Fig. 6. For a smaller value of $|J_2|$, the value of the integral is larger, and is more sensitive to the temperature. Thus, the small but always present longer-range interactions stabilize the four-sublattice-ordered state at finite temperature. In the case of the quantum model, the effective J_2^{eff} generated by quantum fluctuation plausibly stabilizes the long-range-ordered state, with a transition temperature that might substantially deviate from a mean-field-like estimate.

VII. DISCUSSION

We investigated spin ordering in the case of an SU(4) symmetric Heisenberg model on an fcc lattice. For this purpose, we used the Schwinger boson representation of the SU(4) spin operators, which allows a controlled approximation of the quantum effects in an SU(4) symmetry-broken state with long-range order.

At the classical level, where all Schwinger bosons are replaced by their expectation values, the ordered state was found to be highly degenerate, consisting of layers of two-sublattice-ordered square lattice planes, however, the states on the neighboring planes are determined up to SU(2) rotations.

Considering a subset of these degenerate states using the flavor-wave theory, we found that quantum fluctuations select a four-sublattice-ordered state, with a magnetic unit cell being identical to the cubic unit cell of the fcc lattice. The linear flavor-wave Hamiltonian of the four-sublattice-ordered state

block diagonalizes into a set of two-flavor bosons interacting on decoupled planes, so that fluctuations couple strongly only along two directions. This effect renders the ordering fragile at finite temperatures, as the number of bosons diverge at any $T > 0$. Coupling between the planes is established by a ferromagnetic second-neighbor spin interaction, which stabilizes the four-sublattice classical ordering up to some finite ordering temperature. This second-neighbor spin interaction can be provided by the quantum fluctuations themselves since they also favor the four-sublattice state. It would be interesting to see how does the Néel temperature in this case relate to the mean-field result (i.e., to the Curie-Weiss temperature).

It is noteworthy to compare these results with the usual, SU(2) symmetric Heisenberg model on the same fcc lattice. In both cases, the classical ground state is highly degenerate, however, the nature and origin of the degeneracy are different. Since the fcc lattice is composed of edge-sharing tetrahedra, the SU(2) classical spins, represented by three-dimensional vectors, are frustrated and cannot satisfy all the bonds optimally [unlike to the SU(4) case]. The lowest-energy state on a single tetrahedron is achieved when the sum of the four spins on the four corners adds up to 0, which can be realized in continuously many ways, leading to a high degeneracy also on the fcc lattice. The idea of the selection of the ordered state from the degenerate classical manifold by minimizing the energy of the quantum fluctuation was pioneered for this lattice: Quantum fluctuations were shown to reduce the continuous degeneracy to discrete ones, as they generally favor collinear configuration, in which case the $O(3)$ spins can be treated as Ising spins [46,47]. The effect of quantum fluctuations for SU(2) Heisenberg models including longer-range interactions or anisotropies has been extensively studied in case of type I [49,51,54,55] or type II [56] orderings. However, even after many efforts, the true nature of the ground state of the SU(2) Heisenberg model with nearest-neighbor exchanges is still unknown.

We note that there is a fundamental difference between the SU(4) and SU(2) spins on the fcc lattice: for the SU(2) case, the number of constraints is larger than the spin degrees of freedom, thus, the bond energies cannot be all satisfied. In contrast, for the SU(4) spins there are more degrees of freedom as constraints, and the ground state is degenerate with all the bond energies fully satisfied.

ACKNOWLEDGMENTS

This work was supported by the Hungarian OTKA Grants No. K106047 and No. PD104652, and the Hungarian Academy of Sciences (Lendület Program, Grant No. LP2011-016). G.Sz. also acknowledges financial support from the Bolyai János Fellowship.

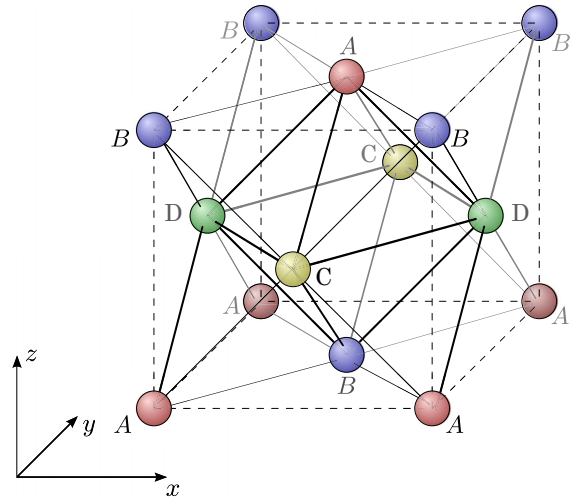


FIG. 7. The twisted four-sublattice state. The coloring of the sites on the figure corresponds to $\vartheta = \pi/2$ in Eq. (15).

APPENDIX: ZERO-POINT ENERGY FOR $\vartheta = \pi/2$

Here, we calculate the quantum correction to the energy for $\vartheta = \pi/2$. This ansatz is shown in Fig. 7. Two of the Holstein-Primakoff boson pairs now make square lattices (the red-blue and green-yellow planes), while the remaining pairs of colors make a lattice isomorphic to the diamond lattice (for example, the red-yellow). The Bogoliubov matrix (31) can be transformed to a block-diagonal form by making a symmetric and antisymmetric combination of certain bosons in Φ. Each block is a 2×2 matrix and two of them have the same form as in the $\vartheta = 0$ case with γ_z^{sq}, and the other four have the following form:

$$\mathbf{M}^{\mathrm{diam}}(\mathbf{q}) = 4JM\begin{bmatrix} 1 & \gamma^{\mathrm{diam}}(\mathbf{q}) \\ -\gamma^{\mathrm{diam}}(\mathbf{q}) & -1 \end{bmatrix}, \tag{A1}$$

where

$$\gamma^{\mathrm{diam}}(\mathbf{q}) = \frac{1}{4}\big(e^{i\frac{1}{4}(q_x+q_y+q_z)} + e^{i\frac{1}{4}(q_x-q_y-q_z)} + e^{i\frac{1}{4}(q_y-q_x-q_z)} + e^{i\frac{1}{4}(q_z-q_x-q_y)}\big). \tag{A2}$$

This Bogoliubov matrix yields

$$E^{(2)}_{\mathrm{diam}} = -0.293JM, \tag{A3}$$

which modifies the total energy correction to

$$E^{(2)}_{\vartheta=\pi/4} = 2E^{(2)}_{\mathrm{sq}} + 4E^{(2)}_{\mathrm{diam}} = -1.804\,JM. \tag{A4}$$

This energy is higher than that of the $\vartheta = 0$ case [Eq. (41)]. Actually, this configuration has the highest energy of all the helical states. Its value is illustrated with the green diamond in Fig. 4(a).

[1] K. I. Kugel' and D. I. Khomski, Sov. Phys.–Usp. **25**, 231 (1982).

[2] J. van den Brink, Z. Nussinov, and A. M. Oleś, in *Introduction to Frustrated Magnetism*, Springer Series in Solid-State Sciences, Vol. 164, edited by C. Lacroix, P. Mendels, and F. Mila (Springer, Berlin, 2011), pp. 629–670.

[3] Y. Q. Li, M. Ma, D. N. Shi, and F. C. Zhang, Phys. Rev. Lett. **81**, 3527 (1998).

[4] Y. Yamashita, N. Shibata, and K. Ueda, Phys. Rev. B **58**, 9114 (1998).
[5] K. I. Kugel, D. I. Khomskii, A. O. Sboychakov, and S. V. Streltsov, Phys. Rev. B **91**, 155125 (2015).
[6] R. Shiina, H. Shiba, and P. Thalmeier, J. Phys. Soc. Jpn. **66**, 1741 (1997).
[7] M. Lewenstein, A. Sanpera, and V. Ahufinger, *Ultracold Atoms in Optical Lattices: Simulating Quantum Many-Body Systems* (Oxford University Press, Oxford, 2012).
[8] L. Tarruell, D. Greif, T. Uehlinger, G. Jotzu, and T. Esslinger, Nature (London) **483**, 302 (2012).
[9] S. Inouye, M. Andrews, J. Stenger, H.-J. Miesner, D. Stamper-Kurn, and W. Ketterle, Nature (London) **392**, 151 (1998).
[10] P. O. Fedichev, Y. Kagan, G. V. Shlyapnikov, and J. T. M. Walraven, Phys. Rev. Lett. **77**, 2913 (1996).
[11] D. S. Petrov and G. V. Shlyapnikov, Phys. Rev. A **64**, 012706 (2001).
[12] M. Greiner, O. Mandel, T. Esslinger, T. W. Hänsch, and I. Bloch, Nature (London) **415**, 39 (2002).
[13] R. Jördens, N. Strohmaier, K. Günter, H. Moritz, and T. Esslinger, Nature (London) **455**, 204 (2008).
[14] D. Greif, T. Uehlinger, G. Jotzu, L. Tarruell, and T. Esslinger, Science **340**, 1307 (2013).
[15] J. S. Krauser, J. Heinze, N. Fläschner, S. Götze, O. Jürgensen, D.-S. Lühmann, C. Becker, and K. Sengstock, Nat. Phys. **8**, 813 (2012).
[16] S. Taie, Y. Takasu, S. Sugawa, R. Yamazaki, T. Tsujimoto, R. Murakami, and Y. Takahashi, Phys. Rev. Lett. **105**, 190401 (2010).
[17] B. J. DeSalvo, M. Yan, P. G. Mickelson, Y. N. Martinez de Escobar, and T. C. Killian, Phys. Rev. Lett. **105**, 030402 (2010).
[18] S. Taie, R. Yamazaki, S. Sugawa, and Y. Takahashi, Nat. Phys. **8**, 825 (2012).
[19] F. Scazza, C. Hofrichter, M. Höfer, P. De Groot, I. Bloch, and S. Fölling, Nat. Phys. **10**, 779 (2014).
[20] A. Gorshkov, M. Hermele, V. Gurarie, C. Xu, P. Julienne, J. Ye, P. Zoller, E. Demler, M. Lukin, and A. Rey, Nat. Phys. **6**, 289 (2010).
[21] E. Szirmai and M. Lewenstein, Europhys. Lett. **93**, 66005 (2011).
[22] G. Szirmai, E. Szirmai, A. Zamora, and M. Lewenstein, Phys. Rev. A **84**, 011611 (2011); P. Sinkovicz, A. Zamora, E. Szirmai, M. Lewenstein, and G. Szirmai, *ibid.* **88**, 043619 (2013).
[23] F. Pinheiro, G. M. Bruun, J.-P. Martikainen, and J. Larson, Phys. Rev. Lett. **111**, 205302 (2013).
[24] Z. Cai, H.-h. Hung, L. Wang, D. Zheng, and C. Wu, Phys. Rev. Lett. **110**, 220401 (2013).
[25] Z. Cai, H.-H. Hung, L. Wang, and C. Wu, Phys. Rev. B **88**, 125108 (2013).
[26] M. A. Cazalilla and A. M. Rey, Rep. Prog. Phys. **77**, 124401 (2014).
[27] B. Frischmuth, F. Mila, and M. Troyer, Phys. Rev. Lett. **82**, 835 (1999).
[28] B. Sutherland, Phys. Rev. B **12**, 3795 (1975).
[29] P. Corboz, M. Lajkó, A. M. Läuchli, K. Penc, and F. Mila, Phys. Rev. X **2**, 041013 (2012).
[30] M. van den Bossche, P. Azaria, P. Lecheminant, and F. Mila, Phys. Rev. Lett. **86**, 4124 (2001).
[31] P. Corboz, K. Penc, F. Mila, and A. M. Läuchli, Phys. Rev. B **86**, 041106 (2012).
[32] M. Lajkó and K. Penc, Phys. Rev. B **87**, 224428 (2013).
[33] M. van den Bossche, F.-C. Zhang, and F. Mila, Eur. Phys. J. B **17**, 367 (2000).
[34] F. Wang and A. Vishwanath, Phys. Rev. B **80**, 064413 (2009).
[35] P. Corboz, A. M. Läuchli, K. Penc, M. Troyer, and F. Mila, Phys. Rev. Lett. **107**, 215301 (2011).
[36] S. Pankov, R. Moessner, and S. L. Sondhi, Phys. Rev. B **76**, 104436 (2007).
[37] C. Xu and C. Wu, Phys. Rev. B **77**, 134449 (2008).
[38] A. Joshi, M. Ma, F. Mila, D. N. Shi, and F. C. Zhang, Phys. Rev. B **60**, 6584 (1999).
[39] V. Zapf, M. Jaime, and C. D. Batista, Rev. Mod. Phys. **86**, 563 (2014).
[40] J. Goldstone, A. Salam, and S. Weinberg, Phys. Rev. **127**, 965 (1962).
[41] N. D. Mermin and H. Wagner, Phys. Rev. Lett. **17**, 1133 (1966).
[42] P. C. Hohenberg, Phys. Rev. **158**, 383 (1967).
[43] A. Auerbach, *Interacting Electrons and Quantum Magnetism* (Springer, New York, 1994).
[44] D. P. Arovas and A. Auerbach, Phys. Rev. B **38**, 316 (1988).
[45] A. Altland and B. Simons, *Condensed Matter Field Theory* (Cambridge University Press, Cambridge, 2010).
[46] E. F. Shender, Zh. Eksp. Teor. Fiz. **83**, 326 (1982) [Sov. Phys.–JETP **56**, 178 (1982)].
[47] C. L. Henley, Phys. Rev. Lett. **62**, 2056 (1989).
[48] T. A. Tóth, A. M. Läuchli, F. Mila, and K. Penc, Phys. Rev. Lett. **105**, 265301 (2010).
[49] C. L. Henley, J. Appl. Phys. **61**, 3962 (1987).
[50] M. E. Zhitomirsky, J. Phys.: Conf. Ser. **592**, 012110 (2015).
[51] T. Yildirim, A. B. Harris, and E. F. Shender, Phys. Rev. B **58**, 3144 (1998).
[52] T. Yildirim, Turk. J. Phys. **23**, 47 (1999).
[53] P. Fazekas, *Lecture Notes on Electron Correlation and Magnetism*, Series in Modern Condensed Matter Physics (World Scientific, Singapore, 1999), p. 292.
[54] T. Oguchi, H. Nishimori, and Y. Taguchi, J. Phys. Soc. Jpn. **54**, 4494 (1985).
[55] J.-P. Ader, Phys. Rev. B **65**, 014411 (2001).
[56] T. Datta and D.-X. Yao, Phys. Rev. B **85**, 054409 (2012).

Quantized recurrence time in unital iterated open quantum dynamics

P. Sinkovicz, Z. Kurucz, T. Kiss, and J. K. Asbóth
Institute for Solid State Physics and Optics, Wigner Research Centre, Hungarian Academy of Sciences, P.O. Box 49, H-1525 Budapest, Hungary
(Received 7 November 2014; published 9 April 2015)

The expected return time to the original state is a key concept characterizing systems obeying both classical or quantum dynamics. We consider iterated open quantum dynamical systems in finite-dimensional Hilbert spaces, a broad class of systems that includes classical Markov chains and unitary discrete-time quantum walks on networks. Starting from a pure state, the time evolution is induced by repeated applications of a superoperator (quantum channel) in each time step followed by a measurement to detect whether the system has returned to the original state. We prove that if the superoperator is unital in the part of the Hilbert space explored by the system, then the expectation value of the return time is an integer, equal to the dimension of this relevant Hilbert space. We illustrate our results on partially coherent quantum walks on finite graphs. Our work shows that the expected return time is a quantitative measure of the size of the part of the Hilbert space available to the system when the dynamics is started from a certain state.

DOI: 10.1103/PhysRevA.91.042108 PACS number(s): 03.65.Yz, 03.67.−a

I. INTRODUCTION

An important task in physics is to observe the dynamics of systems and predict their future behavior. For a classical system, monitoring its evolution does not alter its dynamics in the ideal case; in quantum mechanics, however, frequent measurements may have dramatic effects due to the measurement back-action, e.g., freezing the dynamics, as in the quantum Zeno effect [1,2], or losing coherence and thereby arriving at classical-like behavior [3]. The problem becomes even more complicated under realistic conditions, where the effects of the environment cannot be neglected and the introduced noise affects the fine quantum features needed for applications, e.g., in quantum information [4].

Discretization, both in time and space, is inherent in the definition of many physical systems (e.g., networks) but can also occur as a result of an approximation to make a system numerically tractable. Iterations of a given generic time-evolution step and assuming a countable number of different states of the system thus represent a large class of physical situations, including classical and quantum networks [5]. A generic way to represent a discretized iterative dynamical process is a discrete-time random walk on a graph in both the classical and quantum cases.

Discrete-time quantum walks (or quantum walks for short) [6], quantum-mechanical generalizations of random walks, have in the recent years enjoyed increasing attention from both theoretical and experimental [7–13] physicists. The hallmark property of quantum walks is that they spread faster than classical random walks: on a regular graph, the variance of the position of the walker scales as $O(t^2)$ with the number t of time steps, rather than $O(t)$ as in the classical case. This gives quantum search algorithms using quantum walks [14] the same quadratic speedup as possessed by the celebrated Grover algorithm [15], which is all the more important since quantum walks can be used to implement universal quantum computation [16]. Characterization of quantum walks using fundamental concepts not only might further our understanding of when and how the quantum speedup arises but can also lead to new types of algorithms based on quantum walks.

One of the important concepts used to characterize iterative dynamical processes, such as random walks on graphs, is recurrence: whether a system returns to its initial state and, if so, how long this return takes. For finite, closed systems, where the dynamics conserves the phase-space volume, the Poincaré theorem guarantees that recurrence does take place, although the required time can be beyond the range of any conceivable experiment. The problem of this return time in classical [17] and quantum systems [18] is an important question for many areas of physics, from chaos theory to the microscopic foundations of thermodynamics.

There is a broad class of classical iterative dynamical processes for which the recurrence time, i.e., the expected return time to an initial state j, turns out to be quantized, i.e., an integer T_j. This is the class of bistochastic processes, for which the completely mixed state is a stationary state [19]. In this case, for each initial state j the set G_j of sites that are reachable from j by iterations of the time step forms an irreducible component (all states in G_j and only states in G_j are reachable from each other). Since the process is bistochastic, in this irreducible component the uniform distribution is a stationary state. Consider now a trajectory of N steps, started from state j, with $N \to \infty$; the number of times site j is visited tends to $N/|G_j|$, where $|G_j|$ denotes the number of states in G_j. The average return time to state j is the average time delay between such visits, which is $T_j = |G_j|$.

Generalizing the concept of the first return time to iterative quantum dynamical processes, Grünbaum *et al.* [20] have found a striking fact: its expectation value is quantized. To define a first return time, they suggested that every time step, given by a unitary operator U, be followed by a measurement to detect whether the walker has returned to the initial state or not. Starting the system from a state $|\Psi\rangle$, they have found that the expected return time T_Ψ is the dimension of the smallest eigenspace of U that includes $|\Psi\rangle$, which is always an integer number, or infinity. Thus, the integer T_Ψ is a measure of the size of the system accessible from the initial state, reminiscent of the classical case. This similarity is all the more surprising given that the proof of Grünbaum *et al.* is an intricate application of topological concepts to quantum physics.

 ©2015 American Physical Society

In the present work, we address the problem of the recurrence time for unital iterative *open* quantum dynamical systems (IOQDS, also called quantum dynamical semigroups [21]). This is a broad class of processes that includes as special cases both the unitary case of Ref. [20] and classical Markov chains. The time step of one period thus can include interaction with an environment, which can be beneficial for transport [22,23]. The time step is defined by a quantum channel (trace-preserving completely positive map), represented by a superoperator $\mathcal{S}$, which is followed by a measurement to decide whether the system has returned or not. This iterated evolution can also be viewed as a generalized, open discrete-time quantum walk [24,25]. We prove that whenever the time-step superoperator is *unital*, i.e., whenever the completely mixed state is a stationary state, $\mathcal{S}[\mathbb{I}] = \mathbb{I}$, the expected return time T_Ψ to a pure state $|\Psi\rangle$ is an integer, equal to the dimension of the part of the Hilbert space that the system explores when started from $|\Psi\rangle$ (the relevant Hilbert space; more precisely, we need only $\mathcal{S}$ to be unital in this relevant Hilbert space).

This paper is structured as follows. In the next section we fix the notation for iterated open quantum dynamical systems, i.e., generalized quantum walks, and also introduce the concepts of the conditional density operators and of the relevant Hilbert space. In Sec. III we prove the main statement of our paper, that the expected return time for unital generalized quantum walks is equal to the dimension of the relevant Hilbert space. In Sec. IV we illustrate our results on quantum walks on finite graphs. Finally, we provide a short outlook on the consequences of our results in Sec. V.

II. FIRST RETURN TIME

We consider an iterated open quantum dynamical system, with dynamics that can be fully or partially coherent. The state is given by a time-dependent density operator $\rho : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ in a finite-dimensional Hilbert space $\mathcal{H}$. The dynamics takes place in discrete time, $t \in \mathbb{N}$, starting from an initial pure state $|\Psi\rangle$,

$$\rho(0) = |\Psi\rangle\langle\Psi|, \tag{1}$$

and is generated by a fixed superoperator $\mathcal{S}$. To describe a real physical process, $\mathcal{S}$ has to be trace preserving and completely positive, i.e., a quantum channel. This is equivalent, in the Stinespring-Kraus representation theorem [26], to the requirement that $\mathcal{S}$ can be written in terms of a discrete set of D Kraus operators $A_j : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ as

$$\rho(t+1) = \mathcal{S}[\rho(t)] = \sum_{j=0}^{D-1} A_j \rho(t) A_j^\dagger. \tag{2}$$

The only restriction on the Kraus operators A_j is the normalization condition

$$\sum_{j=0}^{D-1} A_j^\dagger A_j = \mathbb{I}, \tag{3}$$

where $\mathbb{I}$ represents the unit operator on the whole Hilbert space $\mathcal{H}$.

A. Relevant Hilbert space

We can safely restrict our attention to the part of the Hilbert space that the system explores, starting from $|\Psi\rangle$ and undergoing the iterations of $\mathcal{S}$. This is the *relevant Hilbert space* $\mathcal{H}_\Psi$, which we define as the limit of the series of projectors

$$\mathbb{I}_\Psi = \lim_{n\to\infty} \operatorname{supp}\left(\sum_{t=0}^{n} \rho(t)\right), \tag{4}$$

where $\operatorname{supp}(\sigma)$ denotes the projector to the nonzero subspace (support) of a Hermitian operator σ. The relevant Hilbert space $\mathcal{H}_\Psi$ is the image of the operator $\mathbb{I}_\Psi$ acting on $\mathcal{H}$.

The relevant Hilbert space $\mathcal{H}_\Psi$ is the smallest subspace of $\mathcal{H}$ that contains the state $|\Psi\rangle$ and fulfils the following property: for any positive semidefinite operator $\sigma : \mathcal{H}_\Psi \to \mathcal{H}_\Psi$, we have $\operatorname{supp}(\mathcal{S}[\sigma]) \subseteq \mathcal{H}_\Psi$. In the language of the Kraus operators of $\mathcal{S}$, as per Eq. (2), this reads that for all j and any $|\Phi\rangle \in \mathcal{H}_\Psi$, we have $A_j|\Phi\rangle \in \mathcal{H}_\Psi$. These statements, proved in Appendix B, ensure that the restriction of the time-step operator $\mathcal{S}$ to the relevant Hilbert space, defined as

$$\mathcal{S}_\Psi[\rho] = \mathcal{S}[\mathbb{I}_\Psi \rho \mathbb{I}_\Psi] = \sum_{j=0}^{D-1} A_j \mathbb{I}_\Psi \rho \mathbb{I}_\Psi A_j^\dagger \tag{5}$$

for $\rho : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$, can be used in place of $\mathcal{S}$ as long as we consider only iterative quantum dynamics starting from $|\Psi\rangle$. Since each of the Kraus operators maps states from $\mathcal{H}_\Psi$ into states in $\mathcal{H}_\Psi$, the Kraus operators of $\mathcal{S}_\Psi$ are $A_j \mathbb{I}_\Psi = \mathbb{I}_\Psi A_j \mathbb{I}_\Psi$. Defining $\mathcal{S}_\Psi$ this way ensures that it is an irreducible channel [27].

The dimension of the relevant Hilbert space is equal to the trace of the projector $\mathbb{I}_\Psi$,

$$\dim(\mathcal{H}_\Psi) = \operatorname{Tr}(\mathbb{I}_\Psi). \tag{6}$$

The relevant Hilbert space is guaranteed to be finite-dimensional if the full Hilbert space is finite-dimensional.

B. Conditional dynamics

To define a first return time, we need to modify the dynamics and monitor whether the system returns to the initial state or not. At the end of every time step, we perform a dichotomic measurement, with the projector corresponding to "return" given by $|\Psi\rangle\langle\Psi|$ and the projector of "no return" given by its complement, which acts on a general density operator σ as

$$\mathcal{M}[\sigma] = (\mathbb{I} - |\Psi\rangle\langle\Psi|)\sigma(\mathbb{I} - |\Psi\rangle\langle\Psi|). \tag{7}$$

The first return time is the number of steps we need until we obtain return. The expected return time is the expectation value of this number.

A simple way to calculate the first return time in this monitored system is to use a *conditional density operator* $\rho_{\text{cond}}(t)$. This represents the state of the system under the condition that it has never returned to the origin. Using the superoperator $\mathcal{M}$ corresponding to no return, this conditional density operator reads

$$\rho_{\text{cond}}(t) = (\mathcal{M}\mathcal{S})^t[|\Psi\rangle\langle\Psi|] = (\mathcal{M}\mathcal{S}_\Psi)^t[|\Psi\rangle\langle\Psi|] \tag{8}$$

for $t \in \mathbb{N}$, including $\rho_{\text{cond}}(0) = |\Psi\rangle\langle\Psi|$. The second equality above holds since the projector $\mathcal{M}$ does not lead outside the relevant Hilbert space: for any positive semidefinite operator $\sigma: \mathcal{H}_\Psi \to \mathcal{H}_\Psi$, we have $\text{supp}(\mathcal{M}[\sigma]) \subseteq \mathcal{H}_\Psi$, with $\mathcal{M}[\sigma]$ also being positive semidefinite [but possibly $\text{Tr}(\mathcal{M}[\sigma]) < \text{Tr}\sigma$].

The trace of the conditional density operator $\rho_{\text{cond}}(t)$ is the probability q_t that there was no return to the initial state up until time t,

$$q_t = \text{Tr}\rho_{\text{cond}}(t). \tag{9}$$

We say that the dynamics is *recurrent* if this quantity converges to zero.

C. Expected return time

In this paper we are interested in the expected return time T_Ψ, i.e., the expectation value of the first return time,

$$T_\Psi = \sum_{t=1}^{\infty} t p_t, \tag{10}$$

where p_t denotes the probability that the first return to $|\Psi\rangle$ happens at time t. We explicitly included the subscript Ψ in the expected first return time T_Ψ, but we dropped it from other quantities, e.g., the return probabilities p_t, and the conditional probability density $\rho_{\text{cond}}(t)$ for notational simplicity. The return probabilities p_t can be expressed in terms of the probabilities q_t of "no return up until time t" as

$$p_t = q_{t-1} - q_t \tag{11}$$

since the operator $\mathcal{S}$ preserves the trace. Using this for recurrent walks, the expected return time reads

$$T_\Psi = 1 + \sum_{t=1}^{\infty} q_t - \lim_{N\to\infty} N q_N = 1 + \sum_{t=1}^{\infty} q_t. \tag{12}$$

We relegate the proof of the above equation, including that $\lim_{N\to\infty} N q_N$ can be omitted from the right-hand side (rhs), to Appendix A.

We can put Eq. (12) into a very suggestive form using the conditional density operators, Eq. (14). To do this, we define $\tilde{\rho}_{\text{cond}}(t)$ as

$$\tilde{\rho}_{\text{cond}}(t) = \sum_{t'=0}^{t} \rho_{\text{cond}}(t'). \tag{13}$$

If the expected return time T_Ψ is finite, the series of operators $\tilde{\rho}_{\text{cond}}(t)$ has to converge, and we can define its limit as

$$\tilde{\rho}_{\text{cond}} = \lim_{t\to\infty} \tilde{\rho}_{\text{cond}}(t) = \sum_{t=0}^{\infty} \rho_{\text{cond}}(t) < \infty. \tag{14}$$

The expected return time T_Ψ is simply the trace of the above-defined operator,

$$T_\Psi = \text{Tr}\,\tilde{\rho}_{\text{cond}}. \tag{15}$$

We remark that the conditional density operators $\rho_{\text{cond}}(t)$ span the same subspace as the operators $\rho(t)$,

$$\mathbb{I}_\Psi = \text{supp}(\tilde{\rho}_{\text{cond}}). \tag{16}$$

We relegate the proof of this statement to Appendix B.

III. FIRST RETURN TIME FOR UNITAL ITERATED OPEN QUANTUM DYNAMICAL SYSTEMS

We now come to the central result of this work, which can be written succinctly as

$$T_\Psi = \text{Tr}\,\mathbb{I}_\Psi \quad \text{if} \quad \mathcal{S}[\mathbb{I}_\Psi] = \mathbb{I}_\Psi; \tag{17}$$

that is, whenever the superoperator $\mathcal{S}$ defining a time step is unital on the relevant Hilbert space, the expected return time T_Ψ is an integer, equal to the dimension of the relevant Hilbert space. In this section we prove this statement by showing that the operator $\tilde{\rho}_{\text{cond}}$, defined in Eq. (14), is a projector, i.e.,

$$\tilde{\rho}_{\text{cond}} = \mathbb{I}_\Psi. \tag{18}$$

Equation (17) is a direct consequence of Eqs. (18) and (15).

The proof of Eq. (18) will be based on the properties of the steady states of the conditional dynamics (generated by iterations of $\mathcal{MS}$) in the relevant Hilbert space. If a positive semidefinite operator $\sigma : \mathcal{H}_\Psi \to \mathcal{H}_\Psi$ represents a steady state of the conditional dynamics, it is necessarily $\sigma = 0$. We will first show that $\mathbb{I}_\Psi - \tilde{\rho}_{\text{cond}} \geqslant 0$, and then we prove that it is a steady state of the conditional dynamics.

A. Unital iterated dynamics

We say that an IOQDS, with time-step superoperator $\mathcal{S}$, started from a pure state $|\Psi\rangle$ is Ψ-unital if the restriction $\mathcal{S}_\Psi$ of the operator $\mathcal{S}$ to the effective Hilbert space is unital, i.e., if

$$\mathcal{S}_\Psi[\mathbb{I}_\Psi] = \mathcal{S}[\mathbb{I}_\Psi] = \mathbb{I}_\Psi. \tag{19}$$

Thus, the defining property of Ψ-unital IOQDSs is that the completely mixed state in the relevant Hilbert space $\mathcal{H}_\Psi$ is a steady state of $\mathcal{S}$. In terms of the Kraus operators A_j of $\mathcal{S}$, Ψ-unitality is defined as the property

$$\sum_j A_j \mathbb{I}_\Psi A_j^\dagger = \mathbb{I}_\Psi. \tag{20}$$

For an IOQDS, Ψ-unitality implies that the dual $\mathcal{S}_\Psi^*$ of the unital superoperator $\mathcal{S}_\Psi$, defined via its Kraus decomposition as

$$\mathcal{S}_\Psi^*[\rho] = \sum_{j=0}^{D-1} \mathbb{I}_\Psi A_j^\dagger \rho A_j \mathbb{I}_\Psi \tag{21}$$

[see Eq. (5)], not only is positive but also preserves the trace and thus represents a valid physical operation. We note that since $\mathbb{I}_\Psi$ is the projector to an invariant subspace, a sufficient but not necessary requirement for an IOQDS to be Ψ-unital is that the superoperator $\mathcal{S}$ be unital, i.e., $\mathcal{S}[\mathbb{I}] = \mathbb{I}$.

A useful property of unital trace-preserving and completely positive (TPCP) superoperators $\mathcal{S}$ is that any steady state of $\mathcal{S}$ is also a steady state of its dual,

$$\mathcal{S}[\chi] = \chi \Leftrightarrow \mathcal{S}^*[\chi] = \chi. \tag{22}$$

This is a consequence of the nontrivial fact [28] that for any unital TPCP superoperator $\mathcal{S}$, all of its steady states χ commute with all of its Kraus operators A_j,

$$\mathcal{S}[\chi] = \chi \Leftrightarrow \forall j : [A_j, \chi] = 0. \tag{23}$$

B. First part of the proof: $\mathbb{I}_\Psi - \tilde{\rho}_{\rm cond}$ is positive semidefinite

We now prove that $\mathbb{I}_\Psi - \tilde{\rho}_{\rm cond}$ is a positive semidefinite operator. Since the support of $\tilde{\rho}_{\rm cond}$ is in the relevant Hilbert space (as shown in Appendix B), this is equivalent to the statement that all eigenvalues of $\tilde{\rho}_{\rm cond}$ are less than or equal to 1. This, on the other hand, follows from the statement, which will be proved below, that for any time $t \in \mathbb{N}$ and any normalized density operator σ in the relevant Hilbert space $\mathcal{H}_\Psi$,

$$\mathrm{Tr}[\sigma\,\tilde{\rho}_{\rm cond}(t)] \leqslant 1. \tag{24}$$

A corollary of this inequality is that for Ψ-unital IOQDSs with a finite-dimensional relevant Hilbert space, the series defining $\tilde{\rho}_{\rm cond}$ converges, so these dynamical processes are recurrent.

In order to prove Eq. (24), we rewrite the overlap of σ and $\tilde{\rho}_{\rm cond}(t)$ as

$$\mathrm{Tr}[\sigma\,\tilde{\rho}_{\rm cond}(t)] = \sum_{n=0}^{t} \mathrm{Tr}\,\{\sigma(\mathcal{M}\mathcal{S}_\Psi)^n[|\Psi\rangle\langle\Psi|]\}, \tag{25}$$

where we used $\mathcal{S}_\Psi$ instead of $\mathcal{S}$ by virtue of Eq. (8). Now for any two density operators σ and ρ, we have

$$\begin{aligned}\mathrm{Tr}(\sigma\mathcal{M}[\mathcal{S}_\Psi[\rho]]) &= \mathrm{Tr}\{\sigma(\mathbb{I} - |\Psi\rangle\langle\Psi|)\mathcal{S}_\Psi[\rho](\mathbb{I} - |\Psi\rangle\langle\Psi|)\}\\ &= \mathrm{Tr}(\mathcal{S}_\Psi^*[\mathcal{M}[\sigma]]\rho).\end{aligned} \tag{26}$$

Applying this relation n times to the nth term in the sum in Eq. (25), we obtain

$$\mathrm{Tr}[\sigma\,\tilde{\rho}_{\rm cond}(t)] = \sum_{n=0}^{t} \langle\Psi|(\mathcal{S}_\Psi^*\mathcal{M})^n[\sigma]|\Psi\rangle. \tag{27}$$

This sum has a direct physical interpretation. Consider the filtered dynamics defined by $\sigma(0) = \sigma$ and $\sigma(n+1) = \mathcal{S}_\Psi^*\mathcal{M}[\sigma(n)]$ for $n \in \mathbb{N}$. Each term on the rhs of Eq. (27) is the number by which the trace of the conditional density operator $\sigma(n)$ decreases in each time step due to the projection applied at the beginning of the time step. Thus, this sum cannot exceed 1: at most, it is equal to 1, in the case state $\sigma(n)$ decays to zero under the iterations of $\mathcal{S}_\Psi^*\mathcal{M}$. This proves Eq. (24) and, as a consequence, recurrence of Ψ-unital IOQDSs, as well as the relation $\tilde{\rho}_{\rm cond} \leqslant \mathbb{I}_\Psi$.

C. Second part of the proof: $\mathbb{I}_\Psi - \tilde{\rho}_{\rm cond}$ is a steady state of $\mathcal{M}\mathcal{S}$ and thus vanishes

Let us now prove that the positive operator $\mathbb{I}_\Psi - \tilde{\rho}_{\rm cond}$ is proportional to a steady state of the conditional time-step operator $\mathcal{M}\mathcal{S}$,

$$\mathcal{M}\mathcal{S}[\mathbb{I}_\Psi - \tilde{\rho}_{\rm cond}] = \mathbb{I}_\Psi - \tilde{\rho}_{\rm cond}. \tag{28}$$

We prove this equation by writing it as the difference of two equations. First, because of the unitality of $\mathcal{S}$ in the relevant Hilbert space, we have

$$\mathcal{M}\mathcal{S}[\mathbb{I}_\Psi] = \mathcal{M}[\mathbb{I}_\Psi] = \mathbb{I}_\Psi - |\Psi\rangle\langle\Psi|. \tag{29}$$

Second, because of the definition of $\tilde{\rho}_{\rm cond}$, Eq. (14), we have

$$\mathcal{M}\mathcal{S}[\tilde{\rho}_{\rm cond}] = \tilde{\rho}_{\rm cond} - |\Psi\rangle\langle\Psi|. \tag{30}$$

Subtracting Eq. (30) from Eq. (29) gives Eq. (28).

We now show that the conditional time-step operator $\mathcal{M}\mathcal{S}$ can have no steady states in the relevant Hilbert space: For all positive semidefinite Hermitian operators $\chi : \mathcal{H}_\Psi \to \mathcal{H}_\Psi$,

$$\mathcal{M}\mathcal{S}[\chi] = \chi \Longrightarrow \chi = 0. \tag{31}$$

To see this, consider a density operator χ that is a steady state of $\mathcal{M}\mathcal{S}$. For such a state, we must have $\mathrm{Tr}(\mathcal{M}\mathcal{S}[\chi]) = \mathrm{Tr}\,\chi$, which is only possible if the projector $(\mathbb{I} - |\Psi\rangle\langle\Psi|)$ does nothing to $\mathcal{S}[\chi]$. Thus, χ is a steady state of not only $\mathcal{M}\mathcal{S}$ but $\mathcal{S}$ as well,

$$\chi = \mathcal{M}\mathcal{S}[\chi] = \mathcal{S}[\chi]. \tag{32}$$

As a consequence, $\mathcal{M}[\chi] = \chi$, and this can hold only if

$$\langle\Psi|\chi|\Psi\rangle = 0. \tag{33}$$

Now consider the overlap of χ with the density operators $\rho(t) = \mathcal{S}^t[|\Psi\rangle\langle\Psi|]$. For all $t \in \mathbb{N}$, we obtain

$$\mathrm{Tr}(\chi\mathcal{S}^t[|\Psi\rangle\langle\Psi|]) = \langle\Psi|(\mathcal{S}^*)^t[\chi]|\Psi\rangle = \langle\Psi|\chi|\Psi\rangle = 0, \tag{34}$$

where we used Eq. (22). Since the eigenvectors of $\rho(t)$ span the relevant Hilbert space, this proves that $\chi = 0$.

Combining Eq. (28) with the statement (31), we have $\mathbb{I}_\Psi - \tilde{\rho}_{\rm cond} = 0$, which amounts to the theorem we set out to prove, Eq. (18).

IV. EXAMPLES

Having proved that for Ψ-unital IOQDSs, the expected return time is equal to the dimension of the relevant Hilbert space, Eq. (17), we next illustrate the statement with a few examples. In all of these, the time-step superoperator $\mathcal{S}$ is obtained by concatenating two quantum channels: a fully coherent channel, defined via a unitary time-step operator U, followed by an incoherent quantum channel, whose Kraus operators we will denote by B_j. This construction allows us to controllably break unitarity, symmetry, and Ψ-unitality of the IOQDS. The details of the numerical methods applied in this section can be found in Appendix C.

A. Uniform decoherence on star graphs

Our first example is a quantum walk on a star graph of M nodes (or sites), as shown in Fig. 1. The unitary part of the time step is defined via a Hamiltonian as

$$U = e^{-iH}, \quad H = \sum_{j=1}^{M-1} v_j|j\rangle\langle 0| + \mathrm{H.c.}, \tag{35}$$

where $v_j \neq 0$ are arbitrary nonzero complex hopping amplitudes. During each time step, a unitary operation by U is followed by a decoherence process $\mathcal{D}$ of rate d, i.e., a suppression of the off-diagonal elements of the density matrix in the preferred basis given by the nodes of the graphs,

$$(\mathcal{D}[\rho])_{m,n} = \begin{cases}\rho_{m,n}, & \text{if} \quad m = n,\\ (1-d)\rho_{m,n}, & \text{otherwise.}\end{cases} \tag{36}$$

The superoperator $\mathcal{S}$ for one complete time step reads

$$\mathcal{S}[\rho] = \mathcal{D}[U\rho U^\dagger]. \tag{37}$$

Tuning d allows us to control the degree of decoherence, from fully coherent time evolution ($d = 0$) to full decoherence

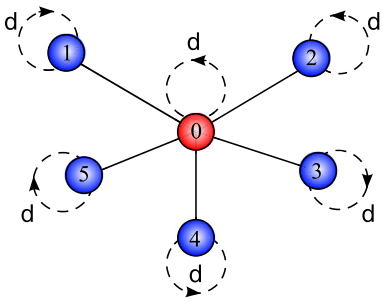


FIG. 1. (Color online) A star graph of $M = 6$ nodes, on which a quantum walk is started from the central node, 0. Each time step consists of a coherent part via a Hamiltonian, Eq. (35), with hopping along the solid lines, followed by uniform decoherence with rate d, per Eq. (36). Although the full Hilbert space is six-dimensional, in the absence of decoherence, the relevant Hilbert space is spanned by just two states, as explained in the text.

($d = 1$). In the latter case the dynamics can be given as a classical Markov process.

The decoherence channel $\mathcal{D}$ also has a representation in terms of M Kraus operators B_j, which read

$$B_j = \sqrt{d}|j\rangle\langle j| \quad \text{for} \quad j = 0,\ldots,M-1; \tag{38a}$$

$$B_M = \sqrt{1-d}\,\mathbb{I}. \tag{38b}$$

To gain a more intuitive understanding of the dynamics, we can rewrite the Hamiltonian as

$$H = \bar{v}|v\rangle\langle 0| + \text{H.c.}, \tag{39}$$

with

$$\bar{v} = \left(\sum_{j=1}^{M-1}|v_j|^2\right)^{1/2}, \quad |v\rangle = \bar{v}^{-1}\sum_{j=1}^{M-1} v_j|j\rangle. \tag{40}$$

Thus, it has only two eigenstates with support on $|0\rangle$, namely,

$$|\pm\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle \pm |v\rangle). \tag{41}$$

That all other eigenstates have no overlap with $|0\rangle$ is clear because $|\langle 0|+\rangle|^2 + |\langle 0|-\rangle|^2 = 1$. The other eigenstates form a subspace of zero energy, spanned by the unnormalized and nonorthogonal, but linearly independent, set of vectors $|\Psi_j\rangle$, with $j = 1,\ldots,M-2$, defined as

$$|\Psi_j\rangle = \sum_{l=1}^{M-1}\frac{e^{ijl2\pi/M}}{v_l^*}|l\rangle. \tag{42}$$

States $|\Psi_j\rangle$ are dark states: from these states, destructive interference between the hopping processes in the Hamiltonian prevents the system from getting to $|0\rangle$ during the unitary part of the time step.

In the fully coherent case, defined as $d = 0$, the eigenstates of the Hamiltonian H are also steady states of the quantum walk. Since only two of these eigenstates have overlap with the initial state of the walk, $|0\rangle$, the relevant Hilbert space, spanned by $|+\rangle$ and $|-\rangle$, has dimension 2. Thus, in this fully coherent, unitary quantum walk, the expected return time to the central node is $T_0 = \sum_{t=0}^{\infty} tp_t = 2$.

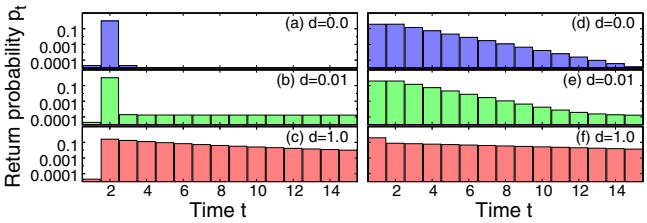


FIG. 2. (Color online) Probability distributions of the first return time on a star graph of degree 6 for two different sets of random hopping amplitudes (left column with $\bar{v} \approx \pi/2$, right column with $\bar{v} \approx 1$) and increasing decoherence rates (from top to bottom). The expected return time with no decoherence (top row) is $T_0 = 2$; with decoherence (middle and bottom rows) it is $T_0 = 6$.

If the decoherence rate d is nonzero, the states $|\Psi_j\rangle$ of Eq. (42) are no longer dark states, as the destructive interference isolating them from $|0\rangle$ is no longer complete. Thus, the relevant Hilbert space becomes the whole Hilbert space (no transition amplitude is zero), and the expected return time to the central node is equal to the number of nodes on the graph, $T_0 = M$.

Unlike the expected return time T_0, the probability distribution of the return times p_t depends quite sensitively on the hopping amplitudes v_j. To illustrate this, we consider a star graph consisting of $M = 6$ nodes, with two different sets of hopping amplitudes and varying degrees of decoherence, shown in Fig. 2. In the case where $\bar{v} \approx \pi/2$ [Figs. 2(a)–2(c), hopping amplitudes $\{v_j\} = \{0.90,0.84,0.75,0.46,0.43\}$], we have $U \approx -i(|v\rangle\langle 0| + |0\rangle\langle v|)$. Without decoherence, the walker almost certainly returns at time $t = 2$; switching on the decoherence induces a slowly decaying tail to the distribution of return times, corresponding to the walker getting stuck in the dark states. If there is no such fine-tuning of $\bar{v}$ [Figs. 2(d)–2(f), hopping amplitudes $\{v_j\} = \{0.72,0.49,0.47,0.41,0.16\}$], the distribution p_t has an exponential tail in the fully coherent case as well as with decoherence. In both cases, the expected return time was found to be $T_0 = 2$ without and $T_0 = 6$ with decoherence.

To understand how even an infinitesimal amount of decoherence can change the expected return time to $T_0 = 6$ from $T_0 = 2$, we explore the partial expected return time $T_0^{(L)}$, i.e., the expected return time after a finite number L of time steps. This quantity is defined by

$$T_0^{(L)} = \sum_{t=1}^{L} tp_t + (L+1)\left(1 - \sum_{t=1}^{L} p_t\right), \tag{43}$$

where the quantum walk is done for only $L \in \mathbb{N}$ time steps, and if the walker does not return, it is assumed to return in time step $L+1$. Although the expected return time T_0 does not depend on the hopping amplitudes v_j, the quantities $T_0^{(L)}$ do. To show the extent of this dependence, we sample the hopping amplitudes v_j uniformly on the complex disk of unit radius and plot the median, the upper decile, and the lower decile of the distribution of the return times after L time steps $T_0^{(L)}$ in Fig. 3. As the number L of observed time steps increases, the range of the expected return times goes down, and the expected return times approach the asymptotic value.

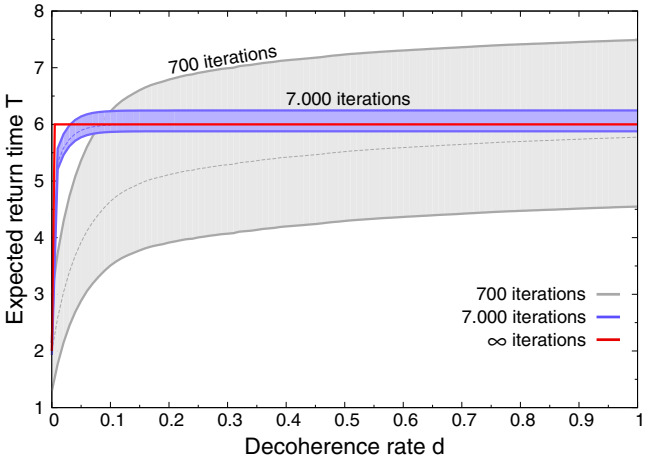


FIG. 3. (Color online) First return times after L time steps on a star graph of degree 6 as functions of decoherence rates d. The shaded areas are between the lower and upper deciles for $L = 700$, $L = 7000$, and $L = \infty$; the medians are shown with dashed lines.

B. Breaking unitality: Population transfer processes on complete graphs

In the next set of examples we break unitality of a quantum walk on a fully connected graph of M nodes in a controlled way. This is achieved using an asymmetric partial population transfer process that follows the coherent part of the time step. If this population transfer is from a fixed "source" site to a fixed "target" site, it creates an accumulation of probability at the target site and thus is not unital. As a consequence, the expected return time will not be an integer and will depend on the system parameters in a continuous way.

The incoherent partial population transfer from one fixed source site (j) to another fixed target site $(j-1)$, with rate d_j, is defined via its Kraus operators $B_0^{(j)}$ and $B_1^{(j)}$ as

$$B_0^{(j)} = \sqrt{d_j}\,|\,(j-1) \bmod M\,\rangle\langle\, j\,|, \tag{44a}$$

$$B_1^{(j)} = \mathbb{I} + (\sqrt{1-d_j} - 1)|j\rangle\langle j|. \tag{44b}$$

The full time-step operator $\mathcal{S}$ of the quantum walk in this section consists of a unitary part, followed by partial population transfer,

$$\rho(t+1) = \mathcal{S}^{(j)}[\rho(t)] = \sum_{l=0,1} B_l^{(j)} U \rho(t) U^\dagger B_l^{(j)\dagger}. \tag{45}$$

To study the effect of the asymmetric population transfer numerically, we used a fully connected graph of $M = 6$ nodes, as shown in Fig. 4. There are three inequivalent ways of choosing the source and target nodes for the extra incoherent population transfer process, indicated by Figs. 4(a)–4(c). In all of these cases, the population transfer breaks unitality, and the expected return time T_0 can deviate from the number of nodes M and depends on the unitary operator U. To characterize this dependence, in each case we numerically determined the distribution of the expected return time T_0. We generated 2000 random instances of the operator U, picked uniformly from the set of unitary operators on the M-dimensional Hilbert space, using the circular unitary ensemble [29]. For each value of the population transfer rate d, we calculated the median and

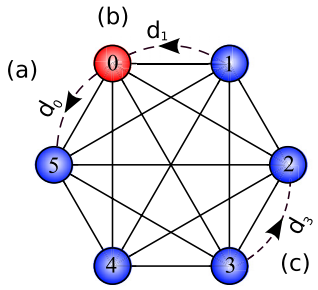


FIG. 4. (Color online) A fully connected graph of $M = 6$ nodes, on which a quantum walk is started from node 0. Each time step consists of a coherent part, defined via a fixed random unitary operator (chosen uniformly from a circular unitary ensemble), followed by an incoherent process that transfers population between two fixed sites, along a dashed line, as in Eq. (44). We consider three examples: (a) where this population transfer delays the return, (b) where it speeds up the return, and (c) where it is neutral.

the upper and lower deciles of the distribution of the expected return time T_0.

Our numerical results, shown in Fig. 5, confirm that the asymmetric population transfer induces a spread of the expected return times. Moreover, depending on its direction, the population transfer can also change the average (median) of the return time. When the transfer is directed away from

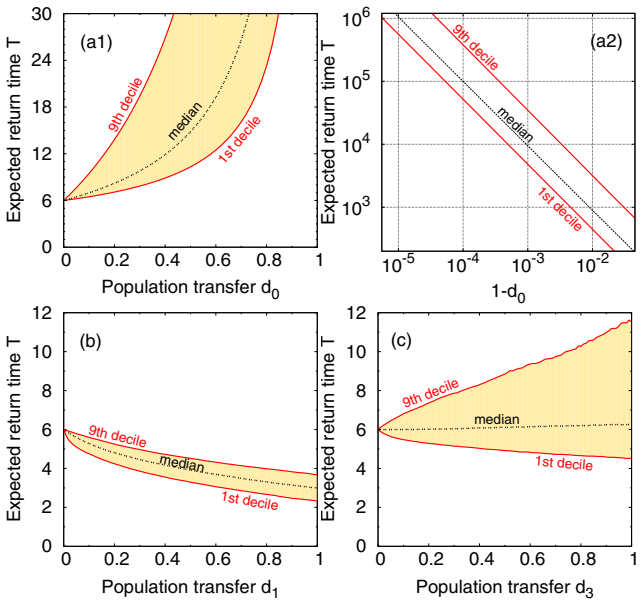


FIG. 5. (Color online) The expected return time T_0 for a quantum walk on a graph of six nodes, where a unitary operation is followed by asymmetric partial population transfer towards the initial state. The unitary operator is picked at random from the circular unitary ensemble; thus, T_0 lies in the typical range shown by the shaded area, between the upper and lower deciles (solid lines), with the median also shown (dashed lines). (a1) and (a2) If the population transfer is away from the origin, the expected return times increase as a function of the population transfer rate. (b) If it drives the walker back to the origin, the expected return times decrease. (c) For extra population transfer between two of the unobserved sites, the expected return time depends on the transfer rate.

the initial state [i.e., the target site is $j-1=5$, Fig. 4(a)], the expected return times increase, as shown in Fig. 5(a). In the limit $d \to 1$, the expected return time diverges as $T_0 \propto 1/(1-d)$, as it would in a classical walk. When the incoherent process drives the walker back towards the initial site [$j=0$, Fig. 4(b)], the average of the expected return time decreases as a function of the transfer rate, as shown in Fig. 5(b). In the limit $d \approx 1$, we find that the median is approximately half the number of sites, $M/2$, which matches the intuition that in this case, two out of M sites correspond to successful return. Finally, for neutral population transfer [$j=3$, Fig. 4(c)], as shown in Fig. 5(c), the expected return time T_0 acquires a spread due to the population transfer, but the median stays approximately independent of the population transfer rate.

C. Breaking detailed balance but not unitality: Population transfer in a loop

Our final numerical example shows that asymmetric population transfer does not necessarily break unitality. We consider the population transfer to take place along a closed directed loop with uniform transfer rate d, as shown in Fig. 6, such that it induces a probability current. In that case, there is no detailed balance in the system, but the population transfer channel is unital, so the expected return time does not deviate from the quantized value.

Each time step consists of a unitary operation followed by the incoherent transfer,

$$\mathcal{S}[\rho] = \sum_{j=0}^{M} B_j U \rho U^\dagger B_j^\dagger. \tag{46}$$

The Kraus operators B_j are defined as

$$B_j = \sqrt{d}|j\rangle\langle j+1| \quad \text{for} \quad j=0,\ldots,M-2, \tag{47a}$$

$$B_{M-1} = \sqrt{d}|M-1\rangle\langle 0|, \tag{47b}$$

$$B_M = \sqrt{1-d}\,\mathbb{I}. \tag{47c}$$

Since $\sum_{j=0}^{M} B_j B_j^\dagger = \mathbb{I}$, the whole time-step operator $\mathcal{S}$ is unital, so the expected return time will be M, as confirmed by our numerics.

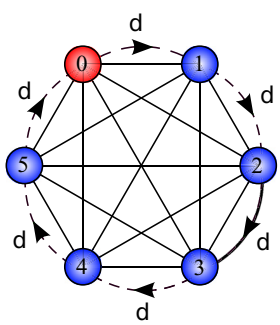


FIG. 6. (Color online) A fully connected graph of six nodes, on which a quantum walk is started from node 0. Each time step consists of a coherent part, defined via a Hamiltonian with random hopping amplitudes, followed by an incoherent process that transfers population in a loop along the dashed lines, as in Eqs. (46) and (47).

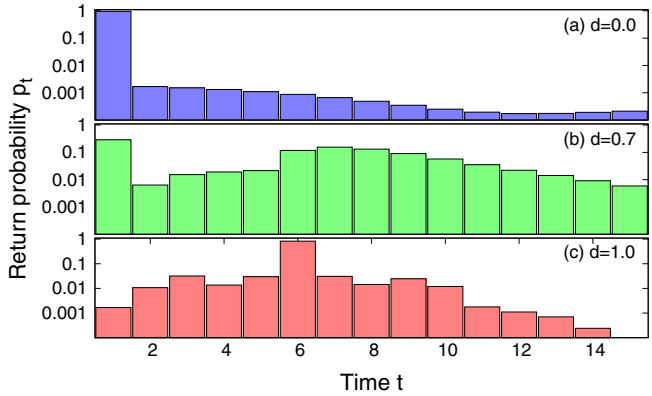


FIG. 7. (Color online) Probability distributions of the first return time of a quantum walk on a graph of degree 6, where a unitary operation is followed by an incoherent population transfer in a loop that includes all the sites. For the unitary part of the walk, we use $U = e^{-iH}$, where H is a random Hermitian matrix with all matrix elements $|H_{lm}| < 0.1$. Although the distributions are qualitatively different, their expectation values are all equal, $T_0 = \sum_t t p_t = 6$, because the walks are unital.

If the unitary operator U is close to unity, it is worthwhile to look at the probability distribution of the return time p_t since there is an interesting effect, shown in Fig. 7. Here we set $U = e^{-iH}$, where H is a Hamiltonian on the fully connected graph with random hopping amplitudes uniformly distributed on the disk of radius 0.1. In this case, almost no transitions happen during the coherent part of the time step. Thus, for $d \approx 0$, we have $p_1 \approx 1$, and the expected return time is $T_0 = M$ only because of the exponential tail of the distribution. If the rate is $d \approx 1$, however, the walker is most likely taken on a round trip by the population transfer process, so we obtain a peak in the distribution at $p_M \approx 1$.

V. DISCUSSION

We proved that in iterated open quantum dynamical systems, unitality of the time-evolution superoperator warrants that the expected return time is quantized. We introduced the concept of the relevant Hilbert space, which is spanned by the states of the system that can be reached from a given initial state, and proved that its dimension gives the expectation value of the first return time. Our work treats a broad class of physical systems on the same footing, including, as limiting cases, fully coherent iterated quantum dynamical systems (quantum walks), as well as classical Markov chains.

An immediate question raised by our work is, What about the expected return time in iterated quantum dynamical systems where the time-step superoperator is not unital? In the fully coherent case, this question does not arise, as the time-step superoperator can be constructed from a single unitary Kraus operator and is thus always unital. In the fully classical limit, there is a well-known answer to this question, given by the Kac lemma [30]: the expected return time T_j is the inverse of the maximum of the weight of the initial state j in an equilibrium distribution (the maximum taken over all possible equilibria). A detailed analysis of our numerics, e.g., the data processed for Sec. IV B, suggests that a statement analogous

to the Kac lemma might hold for iterated open quantum dynamical systems. For an analytical treatment, however, more theoretical tools are needed, just as for the treatment of the recurrence to a more general initial condition, e.g., a subspace spanned by a set of initial states [31].

As is often the case with classical concepts, the generalization of the notions of recurrence and of the expected return time from random walks to quantum walks is not unique. Besides the approach we take in this paper, there is an alternative route, an "ensemble approach," which is useful to obtain estimations for efficiency of quantum protocols. This consists of letting the quantum walk run undisturbed and after a fixed time measuring the position distribution of the walker [32] or its full quantum state [33]. The expected return time, defined in this way, does not necessarily take on an integer value even in the fully coherent case: it can exceed or stay below the dimension of the Hilbert space [20].

Recurrence is interesting not only for iterated open quantum dynamical systems but for continuous-time processes as well, whose time evolution is prescribed by a quantum master equation. Here, to define a first return time, the time evolution is considered punctuated by measurements to detect the return of the walker. If these measurements are randomly timed, according to a Poisson process, the hitting times can become infinite even in the unitary case [34]; no simple picture for the value of the return time has yet been found. The measurements can also be regularly timed: in this case, we obtain a continuous-time realization of the iterated open quantum dynamics, and our results considering the return time apply. In this latter case, it should be possible to cast the requirement of unitality, as well as the dimension of the relevant Hilbert space, in a simple formula for the Lindblad operators of the master equation. As an aside, there is a continuous-time generalization of the ensemble approach, with measurements that are either randomly distributed or regularly timed [35].

Our results give a concrete quantitative measure of the size of the part of the Hilbert space accessible from $|\Psi\rangle$. This could be a useful tool in the analysis of complex quantum networks [36,37]. The expected return time T_Ψ, or, for a more detailed picture, the partial expected return times defined in Eq. (43), can be locally measured even with limited access to the full quantum network.

ACKNOWLEDGMENTS

We thank A. Gábris and J. Novotny for useful discussions. We acknowledge support from the Hungarian Scientific Research Fund (OTKA) under Contracts No. K83858 and No. NN109651 and the Hungarian Academy of Sciences (Lendület Program, LP2011-016).

APPENDIX A: SIMPLIFYING THE EXPECTED RETURN TIME

The probability q_t that the walker has not returned after $t \in \mathbb{N}$ time steps is a monotonously decreasing real function of t, with

$$q_0 = 1. \tag{A1}$$

We assume that the walker eventually returns to the origin, i.e.,

$$\lim_{t\to\infty} q_t = 0. \tag{A2}$$

The probability that the return happens at time t is p_t, with

$$p_1 = 1 - q_1, \tag{A3a}$$

$$p_2 = q_1 - q_2, \tag{A3b}$$

$$\vdots$$

$$p_t = q_{t-1} - q_t. \tag{A3c}$$

Summing the above equations, we find

$$\sum_{t=1}^{N} p_t = 1 - q_N. \tag{A4}$$

From Eq. (A2), we have $\sum_{t=1}^{\infty} p_t = 1$, whereby

$$q_N = \sum_{t=N+1}^{\infty} p_t. \tag{A5}$$

The expected return time T_Ψ is defined via the series

$$T_N = \sum_{t=1}^{N} t p_t = 1 + \sum_{t=1}^{N-1} q_t - N q_N \tag{A6}$$

[see Eq. (10)], with the second equality obtained using Eq. (A3). This is much like partial integration, where the last term is analogous to a boundary term. The limit of the nondecreasing series T_N, if this limit exists, is the expected return time $T_\Psi \in \mathbb{R}$,

$$T_\Psi = \lim_{N\to\infty} T_N. \tag{A7}$$

Below we will show that the boundary term in Eq. (A6) can be neglected, i.e., using Eq. (A1),

$$T_\Psi = \sum_{t=0}^{\infty} q_t. \tag{A8}$$

We prove this separately for the cases when T_N converges and when it diverges.

If the series T_N converges, then

$$\lim_{N\to\infty} \sum_{t=N}^{\infty} t p_t = 0. \tag{A9}$$

In that case, using Eq. (A5), we have

$$\lim_{N\to\infty} N q_N = \lim_{N\to\infty} N \sum_{t=N+1}^{\infty} p_t \leqslant \lim_{N\to\infty} \sum_{t=N+1}^{\infty} t p_t = 0. \tag{A10}$$

Thus, if the expected return time is finite, the "boundary term" $\lim_{N\to\infty} N q_N$ disappears, and Eq. (A8) holds.

If the expected return time is infinite, the sum of the first two terms on the rhs of Eq. (A6), i.e., the sum $\sum_{t=0}^{\infty} q_t$, has to diverge. To see this, consider that if this sum was converging, there would be no way for T_N to diverge since it is obtained from this sum by subtracting the positive boundary term $\lim_{N\to\infty} N q_N$. Thus, in that case both $T_\Psi = \infty$ and $\sum_{t=0}^{\infty} q_t = \infty$ hold, so Eq. (A8) is correct.

APPENDIX B: RELEVANT HILBERT SPACE

In this section we prove some of the properties of the relevant Hilbert space used in the paper.

Take a Hilbert space $\mathcal{H}$, and take any superoperator $\mathcal{S}$, defined by its effect on density operators $\rho : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$ via the Kraus operators A_j as

$$\mathcal{S}[\rho] = \sum_{j=1}^{D} A_j \rho A_j^\dagger. \tag{B1}$$

Take a pure state in the Hilbert space $|\Psi\rangle$. We denote by $\mathcal{M}$ the superoperator corresponding to filtering out the state $|\Psi\rangle$, i.e.,

$$\mathcal{M}[\rho] = (\mathbb{I} - |\Psi\rangle\langle\Psi|)\rho(\mathbb{I} - |\Psi\rangle\langle\Psi|). \tag{B2}$$

We introduce a shorthand for (unnormalized) pure states obtainable from $|\Psi\rangle$ via the operators A_j. For each sequence $\underline{j} = (j_1, \ldots, j_t)$ of integers $j_n \in [1, D]$, we define

$$|\underline{j}\rangle = A_{j_t} \cdots A_{j_2} A_{j_1} |\Psi\rangle, \tag{B3}$$

$$p_{\underline{j}} = \langle \underline{j} | \underline{j} \rangle. \tag{B4}$$

The tth iterate of $|\Psi\rangle\langle\Psi|$ under $\mathcal{S}$ can be written with these states as

$$\mathcal{S}^t[|\Psi\rangle\langle\Psi|] = \sum_{j_1=1}^{D} \sum_{j_2=1}^{D} \cdots \sum_{j_t=1}^{D} |\underline{j}\rangle\langle\underline{j}|. \tag{B5}$$

This is a probabilistic mixture of the pure states $|\underline{j}\rangle$ with weights $p_{\underline{j}}$.

Similarly, we use $|\underline{j}\rangle_{\text{cond}}$ to denote (unnormalized) pure states obtainable from $|\Psi\rangle$ via the operators $(\mathbb{I} - |\Psi\rangle\langle\Psi|)A_j$,

$$\begin{aligned} |\underline{j}\rangle_{\text{cond}} &= (\mathbb{I} - |\Psi\rangle\langle\Psi|)A_{j_t} \cdots (\mathbb{I} - |\Psi\rangle\langle\Psi|)A_{j_1}|\Psi\rangle \\ &= |\underline{j}\rangle + \sum_{n=2}^{t+1} c_{(j_n,\ldots,j_t)}(\underline{j})|j_n, \ldots, j_t\rangle, \end{aligned} \tag{B6}$$

where the sequences $(j_n, \ldots, j_t)$ are obtained from the sequence $\underline{j} = (j_1, \ldots, j_t)$ by omitting the first $t-1$ elements [including the case $n = t+1$, where we obtain the empty sequence, for which, according to Eq. (16), $|\emptyset\rangle = |\Psi\rangle$]. The coefficients $c_{(j_n,\ldots,j_t)}(\underline{j}) \in \mathbb{C}$ are complex numbers. The tth iterate of $|\Psi\rangle\langle\Psi|$ under $\mathcal{MS}$ can be written using these states as

$$(\mathcal{MS})^t[|\Psi\rangle\langle\Psi|] = \sum_{j_1=1}^{D} \sum_{j_2=1}^{D} \cdots \sum_{j_t=1}^{D} |\underline{j}\rangle_{\text{cond}}\langle\underline{j}|_{\text{cond}}. \tag{B7}$$

The *relevant Hilbert space* $\mathcal{H}_\Psi(\mathcal{S}, |\Psi\rangle)$ is the space spanned by the vectors $|\underline{j}\rangle$ for all admissible sequences $\underline{j}$ of any length $t \in \mathbb{N}$. The projector to this subspace of $\mathcal{H}$ is the limit

$$\mathbb{I}_\Psi(\mathcal{S}, |\Psi\rangle) = \lim_{n\to\infty} \operatorname{supp}\left(\sum_{t=0}^{n} \mathcal{S}^n[|\Psi\rangle\langle\Psi|]\right), \tag{B8}$$

where $\operatorname{supp}(\sigma)$ denotes the projector to the nonzero subspace (support) of a Hermitian operator σ.

It is clear by the construction of the set $\{|\underline{j}\rangle\}$ that the relevant Hilbert space is the smallest invariant subspace of $\mathcal{S}$ that contains $|\Psi\rangle$. It is an invariant subspace since, if σ is a density operator in $\mathcal{H}_\Psi(\mathcal{S}, |\Psi\rangle)$, then it can be decomposed as $\sigma = \sum_{\underline{j}} r_{\underline{j}} |\underline{j}\rangle\langle\underline{j}|$, and then $\mathcal{S}^n[\sigma]$ is also in $\mathcal{H}_\Psi(\mathcal{S}, |\Psi\rangle)$ for any $n \in \mathbb{N}$. On the other hand, it contains $|\Psi\rangle$ and is the smallest such subspace since it does not contain any state $|\Phi\rangle$ that is not reachable from $|\Psi\rangle$ by iterations of $\mathcal{S}$. Indeed, for such states $|\Phi\rangle$, we would have $\langle\Phi|\mathcal{S}^t[|\Psi\rangle\langle\Psi|]|\Phi\rangle = 0$ for all $t \in \mathbb{N}$, and thus, they would be outside of $\mathcal{H}_\Psi(\mathcal{S}, |\Psi\rangle)$.

We now show that the relevant Hilbert space is also spanned by the vectors $|\underline{j}\rangle_{\text{cond}}$, i.e., that

$$\mathbb{I}_\Psi(\mathcal{S}, |\Psi\rangle) = \mathbb{I}_\Psi(\mathcal{MS}, |\Psi\rangle). \tag{B9}$$

First, from the second line of Eq. (B6), every vector $|\underline{j}\rangle_{\text{cond}}$ is expressed as a linear combination of vectors $|\underline{j}\rangle$, so $\mathbb{I}_\Psi(\mathcal{MS}, |\Psi\rangle) \leqslant \mathbb{I}_\Psi(\mathcal{S}, |\Psi\rangle)$. On the other hand, every vector $|\underline{j}\rangle$ can be expressed as linear combination of $|\underline{j}\rangle_{\text{cond}}$ and of vectors $|\underline{j}'\rangle_{\text{cond}}$, where $\underline{j}'$ are sequences shorter than $\underline{j}$. This can be shown using mathematical induction, starting from sequences of length $t = 1$, for which

$$|(j_1)\rangle = |(j_1)\rangle_{\text{cond}} + |\Psi\rangle\langle\Psi|(j_1)\rangle, \tag{B10}$$

and using Eq. (B6) for the inductive step. Thus, $\mathbb{I}_\Psi(\mathcal{S}, |\Psi\rangle) \leqslant \mathbb{I}_\Psi(\mathcal{MS}, |\Psi\rangle)$, and this, together with $\mathbb{I}_\Psi(\mathcal{MS}, |\Psi\rangle) \leqslant \mathbb{I}_\Psi(\mathcal{S}, |\Psi\rangle)$ shown above, proves Eq. (B9).

The results of this Appendix translate to quantum walks considered in the paper and prove Eq. (16).

APPENDIX C: NUMERICAL METHODS FOR THE EXPECTED RETURN TIME

To study the expected return time numerically in more detail, we use the spectral decomposition of the conditional time-step operator $\mathcal{MS}$. This method is applicable only if the matrix of $\mathcal{MS}$ is diagonalizable, which is the generic case.

We first find all eigenstates χ_n of $\mathcal{MS}$ for $n = 1, \ldots, M^2$, with eigenvalues $\alpha_n \in \mathbb{C}$,

$$\forall n: \quad \mathcal{MS}[\chi_n] = \alpha_n \chi_n. \tag{C1}$$

The next step is to provide a decomposition of the initial state $|\Psi\rangle\langle\Psi|$ in terms of the eigenstates χ_n,

$$|\Psi\rangle\langle\Psi| = \sum_n c_n \chi_n. \tag{C2}$$

The coefficients $c_n \in \mathbb{C}$ in the decomposition can be found using the right eigenvectors of the matrix of $\mathcal{MS}$. Using the above, we can write the expected return time as a geometric series and obtain

$$T_\Psi = \operatorname{Tr}\tilde{\rho}_{\text{cond}} = \sum_n \frac{c_n}{1 - \alpha_n} \operatorname{Tr}\chi_n. \tag{C3}$$

To study convergence of the expected return time, we define the expected return time up until a finite number L of time

steps as

$$T_\Psi^{(L)} = \sum_{t=1}^{L} t p_t + (L+1)\left(1 - \sum_{t=1}^{L} p_t\right) = \sum_{t=0}^{L} q_t, \quad \text{(C4)}$$

efficiently calculated using the spectral decomposition as

$$T_\Psi^{(L)} = \mathrm{Tr} \sum_{t=0}^{L} (\mathcal{M}\mathcal{S})^t [|0\rangle\langle 0|] = \sum_n c_n \frac{\alpha_n^{L+1} - 1}{\alpha_n - 1} \mathrm{Tr}\chi_n. \quad \text{(C5)}$$

[1] G. Mack, S. Wallentowitz, and P. E. Toschek, Phys. Rep. **540**, 1 (2014).
[2] C. M. Chandrashekar, Phys. Rev. A **82**, 052108 (2010).
[3] E. Joos, *Decoherence and the Appearance of a Classical World in Quantum Theory*, Physics and Astronomy Online Library (Springer, Berlin, 2003).
[4] D. Lidar and T. Brun, *Quantum Error Correction* (Cambridge University Press, Cambridge, 2013).
[5] S. Perseguers, G. Lapeyre Jr., D. Cavalcanti, M. Lewenstein, and A. Acín, Rep. Prog. Phys. **76**, 096001 (2013).
[6] S. Venegas-Andraca, Quantum Inf. Process. **11**, 1015 (2012).
[7] A. Schreiber, K. N. Cassemiro, V. Potoček, A. Gábris, P. J. Mosley, E. Andersson, I. Jex, and C. Silberhorn, Phys. Rev. Lett. **104**, 050502 (2010).
[8] M. Karski, L. Frster, J.-M. Choi, A. Steffen, W. Alt, D. Meschede, and A. Widera, Science **325**, 174 (2009).
[9] M. Genske, W. Alt, A. Steffen, A. H. Werner, R. F. Werner, D. Meschede, and A. Alberti, Phys. Rev. Lett. **110**, 190601 (2013).
[10] L. Sansoni, F. Sciarrino, G. Vallone, P. Mataloni, A. Crespi, R. Ramponi, and R. Osellame, Phys. Rev. Lett. **108**, 010502 (2012).
[11] M. A. Broome, A. Fedrizzi, B. P. Lanyon, I. Kassal, A. Aspuru-Guzik, and A. G. White, Phys. Rev. Lett. **104**, 153602 (2010).
[12] F. Zähringer, G. Kirchmair, R. Gerritsma, E. Solano, R. Blatt, and C. F. Roos, Phys. Rev. Lett. **104**, 100503 (2010).
[13] A. Schreiber, K. N. Cassemiro, V. Potoček, A. Gábris, I. Jex, and C. Silberhorn, Phys. Rev. Lett. **106**, 180403 (2011).
[14] N. Shenvi, J. Kempe, and K. B. Whaley, Phys. Rev. A **67**, 052307 (2003).
[15] L. K. Grover, in *Proceedings of the 28th Annual ACM Symposium on the Theory of Computing (STOC)* (ACM, New York, 1996), pp. 212–219.
[16] N. B. Lovett, S. Cooper, M. Everitt, M. Trevers, and V. Kendon, Phys. Rev. A **81**, 042330 (2010).
[17] L. Barreira, in *XIVth International Congress on Mathematical Physics* (World Scientific, Singapore, 2006), pp. 415–422.
[18] G. Casati, G. Maspero, and D. L. Shepelyansky, Phys. Rev. Lett. **82**, 524 (1999).
[19] J. G. Kemeny and J. L. Snell, *Finite Markov Chains* (Springer-Verlag, New York, 1976).
[20] F. Grünbaum, L. Velazquez, A. Werner, and R. Werner, Commun. Math. Phys. **320**, 543 (2013).
[21] G. I. Cirillo and F. Ticozzi, J. Phys. A **48**, 085302 (2015).
[22] M. B. Plenio and S. F. Huelga, New J. Phys. **10**, 113019 (2008).
[23] P. Rebentrost, M. Mohseni, I. Kassal, S. Lloyd, and A. Aspuru-Guzik, New J. Phys. **11**, 033003 (2009).
[24] S. Attal, F. Petruccione, C. Sabot, and I. Sinayskiy, J. Stat. Phys. **147**, 832 (2012).
[25] C. F. Lardizabal and R. R. Souza, J. Stat. Phys. (2015).
[26] K. Kraus, in *States, Effects, and Operations: Fundamental Notions of Quantum Theory*, Lecture Notes in Physics, edited by A. Böhm, J. D. Dollard, and W. H. Wootters, Vol. 190 (Springer, Berlin, 1983).
[27] E. B. Davies, *Quantum Theory of Open Systems* (Academic, London, 1976).
[28] J. Holbrook, D. Kribs, and R. Laflamme, Quantum Inf. Process. **2**, 381 (2003).
[29] F. Mezzadri, Not. Am. Math. Soc. **54**, 592 (2007).
[30] M. Kac, Bull. Am. Math. Soc. **53**, 1002 (1947).
[31] J. Bourgain, F. Grünbaum, L. Velázquez, and J. Wilkening, Commun. Math. Phys. **329**, 1031 (2014).
[32] M. Štefaňák, I. Jex, and T. Kiss, Phys. Rev. Lett. **100**, 020501 (2008).
[33] C. Chandrashekar, Cent. Eur. J. Phys. **8**, 979 (2010).
[34] M. Varbanov, H. Krovi, and T. A. Brun, Phys. Rev. A **78**, 022324 (2008).
[35] Z. Darázs and T. Kiss, Phys. Rev. A **81**, 062319 (2010).
[36] M. Faccin, T. Johnson, J. Biamonte, S. Kais, and P. Migdał, Phys. Rev. X **3**, 041007 (2013).
[37] M. Faccin, P. Migdał, T. H. Johnson, V. Bergholm, and J. D. Biamonte, Phys. Rev. X **4**, 041012 (2014).

Irodalomjegyzék

[1] Bartel Leendert Van der Waerden. *Science awakening I*. Springer Science & Business Media, 2012.

[2] Nicholas Campion. *The great year: astrology, millenarianism, and history in the Western tradition*. Penguin (Non-Classics), 1994.

[3] John M Cooper and DS Hutchinson. *Plato complete works*. Hackett Publishing Company, 1997.

[4] Isaac Newton and Andrew Motte. *Principia*. Maclehose, 1871.

[5] Alain Chenciner. Three body problem. *Scholarpedia*, 2(10):2111, 2007.

[6] Joachim Worthington. *A Study of the Planar Circular Restricted Three Body Problem and the Vanishing Twist*. PhD thesis, Thesis, Univ. Sydney, 2012.

[7] Henri Poincaré. Sur le problème des trois corps et les équations de la dynamique. *Acta mathematica*, 13(1):A3–A270, 1890.

[8] Luis Barreira. Poincaré recurrence: old and new. In *XIVth International Congress on Mathematical Physics. World Scientific*, pages 415–422. World Scientific, 2006.

[9] Bertrand Duplantier and Vincent Rivasseau. *Henri Poincaré, 1912–2012*. Springer, 2012.

[10] M. Kac. On the notion of recurrence in discrete stochastic processes. *Bulletin of the American Mathematical Society*, 53(10):1002–1010, 10 1947.

[11] F Alberto Grünbaum, Luis Velázquez, Albert H Werner, and Reinhard F Werner. Recurrence for discrete time unitary evolutions. *Communications in Mathematical Physics*, 320(2):543–569, 2013.

[12] P Sinkovicz, Z Kurucz, T Kiss, and JK Asbóth. Quantized recurrence time in unital iterated open quantum dynamics. *Physical Review A*, 91(4):042108, 2015.

[13] P. Sinkovicz, T. Kiss, and J. K. Asbóth. Generalized Kac lemma for recurrence time in iterated open quantum systems. *Phys. Rev. A*, 93:050101, May 2016.

[14] John Frank Charles Kingman. On the chapman-kolmogorov equation. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 276(1259):341–369, 1974.

[15] Andrei Kolmogoroff. Über die analytischen methoden in der wahrscheinlichkeitsrechnung. *Mathematische Annalen*, 104(1):415–458, 1931.

[16] Andrei Nikolaevich Kolmogorov. On the analytic methods of probability theory. *Uspekhi matematicheskikh nauk*, 1(5):5–41, 1938.

[17] Garrett Birkhoff. *Lattice theory*, volume 25. American Mathematical Society New York, 1948.

[18] John Von Neumann. A certain zero-sum two-person game equivalent to the optimal assignment problem. *Contributions to the Theory of Games*, 2:5–12, 1953.

[19] Oskar Perron. Zur theorie der matrices. *Mathematische Annalen*, 64(2):248–263, 1907.

[20] Georg Frobenius. *Über Matrizen aus nicht negativen Elementen*. Königliche Akademie der Wissenschaften, 1912.

[21] Roger A Horn and Charles R Johnson. *Matrix Analysis*. Cambridge University Press, 1985.

[22] William Feller. *An introduction to probability and its applications, Vol. II*. Wiley, New York, 1971.

[23] Richard Serfozo. *Basics of applied stochastic processes*. Springer Science & Business Media, 2009.

[24] Lawrence Page, Sergey Brin, Rajeev Motwani, and Terry Winograd. The PageRank citation ranking: Bringing order to the web. Technical Report 1999-66, Stanford InfoLab, November 1999. Previous number = SIDL-WP-1999-0120.

[25] Leonardo Ermann, Klaus M. Frahm, and Dima L. Shepelyansky. Google matrix analysis of directed networks. *Rev. Mod. Phys.*, 87:1261–1310, Nov 2015.

[26] Olle Häggström. *Finite Markov chains and algorithmic applications*, volume 52. Cambridge University Press, 2002.

[27] Paul Adrien Maurice Dirac. *The principles of quantum mechanics*. Oxford university press, 1981.

[28] John Von Neumann. *Mathematical foundations of quantum mechanics*. Princeton university press, 1955.

[29] Franco Fagnola. Quantum Markov semigroups and quantum flows. *Proyecciones*, 18(3):1–144, 1999.

[30] Vittorio Gorini, Alberto Frigerio, Maurizio Verri, Andrzej Kossakowski, and ECG Sudarshan. Properties of quantum Markovian master equations. *Reports on Mathematical Physics*, 13(2):149–173, 1978.

[31] Andrzej Kossakowski. On quantum statistical mechanics of non-Hamiltonian systems. *Reports on Mathematical Physics*, 3(4):247–274, 1972.

[32] Dariusz Chruściński. On time-local generators of quantum evolution. *Open Systems & Information Dynamics*, 21(01n02):1440004, 2014.

[33] Michael M Wolf. Quantum channels & operations: Guided tour. *Lecture notes available at http://www-m5. ma. tum. de/foswiki/pub M*, 5, 2012.

[34] Hilary A Carteret, Daniel R Terno, and Karol Życzkowski. Dynamics beyond completely positive maps: Some properties and applications. *Physical Review A*, 77(4):042113, 2008.

[35] James M McCracken. *Negative Quantum Channels: An Introduction to Quantum Maps that are Not Completely Positive*. Morgan & Claypool Publishers, 2014.

[36] James M McCracken. Quantum channel negativity as a measure of system-bath coupling and correlation. *Physical Review A*, 88(3):032103, 2013.

[37] Yaakov S Weinstein, Timothy F Havel, Joseph Emerson, Nicolas Boulant, Marcos Saraceno, Seth Lloyd, and David G Cory. Quantum process tomography of the quantum Fourier transform. *The Journal of chemical physics*, 121(13):6117–6133, 2004.

[38] Bálint Kollár, Tamás Kiss, Jaroslav Novotnỳ, and Igor Jex. Asymptotic dynamics of coined quantum walks on percolation graphs. *Physical review letters*, 108(23):230505, 2012.

[39] Bálint Kollár, Jaroslav Novotnỳ, Tamás Kiss, and Igor Jex. Percolation induced effects in two-dimensional coined quantum walks: Analytic asymptotic solutions. *New Journal of Physics*, 16(2):023002, 2014.

[40] Christian B Mendl and Michael M Wolf. Unital quantum channels–convex structure and revivals of Birkhoff's theorem. *Communications in Mathematical Physics*, 289(3):1057–1086, 2009.

[41] Michael M Wolf, Toby S Cubitt, and David Perez-Garcia. Are problems in Quantum Information Theory (un) decidable? *arXiv preprint arXiv:1111.5425*, 2011.

[42] Uffe Haagerup and Magdalena Musat. Factorization and dilation problems for completely positive maps on von Neumann algebras. *Communications in Mathematical Physics*, 303(2):555–594, 2011.

[43] ECG Sudarshan, PM Mathews, and Jayaseetha Rau. Stochastic dynamics of quantum-mechanical systems. *Physical Review*, 121(3):920, 1961.

[44] Man-Duen Choi. Completely positive linear maps on complex matrices. *Linear Algebra Appl.*, 10(1):285–290, 1975.

[45] Karl Kraus. *States, effects, and operations fundamental notions of quantum theory*. Springer Velag, 1983.

[46] W Forrest Stinespring. Positive functions on C-star-algebras. *Proceedings of the American Mathematical Society*, 6(2):211–216, 1955.

[47] Ingemar Bengtsson and Karol Zyczkowski. *Geometry of quantum states: an introduction to quantum entanglement*. Cambridge University Press, 2006.

[48] Bernhard Baumgartner and Heide Narnhofer. The structures of state space concerning quantum dynamical semigroups. *Reviews in Mathematical Physics*, 24(02):1250001, 2012.

[49] Raffaella Carbone and Yan Pautrat. Irreducible decompositions and stationary states of quantum channels. *arXiv preprint arXiv:1507.08404*, 2015.

[50] B Russo, HA Dye, et al. A note on unitary operators in C-star-algebras. *Duke Mathematical Journal*, 33(2):413–416, 1966.

[51] Man-Duen Choi. Some assorted inequalities for positive linear maps on C-star-algebras. *J. Operator Theory*, 4(2):271–285, 1980.

[52] Alvaro Arias, Aurelian Gheondea, and Stanley Gudder. Fixed points of quantum operations. *Journal of Mathematical Physics*, 43(12):5872–5881, 2002.

[53] John A Holbrook, David W Kribs, and Raymond Laflamme. Noiseless subsystems and the structure of the commutant in quantum error correction. *Quantum Information Processing*, 2(5):381–419, 2003.

[54] Jaroslav Novotnỳ, Gernot Alber, and Igor Jex. Asymptotic evolution of random unitary operations. *Central European Journal of Physics*, 8(6):1001–1014, 2010.

[55] Masatoshi Enomoto and Yasuo Watatani. A Perron-Frobenius type theorem for positive linear maps on C-star-algebras. *Math. Japan*, 24:53–63, 1979.

[56] L. Euler. Solutio problematis ad geometriam situs pertinentis. *Comment. Acad. Sci. U. Petrop.*, 1(8):128–140, 1739.

[57] H Larralde. Transport properties of a two-dimensional "chiral" persistent random walk. *Physical Review E*, 56(5):5004, 1997.

[58] Haim Weissman, George H Weiss, and Shlomo Havlin. Transport properties of the continuous-time random walk with a long-tailed waiting-time density. *Journal of Statistical Physics*, 57(1-2):301–317, 1989.

[59] Jeffrey D Picka and Karthik Chermakani. Random-walk-based estimates of transport properties in small specimens of composite materials. *Physical Review E*, 67(4):041104, 2003.

[60] Keith J McCree. The action spectrum, absorptance and quantum yield of photosynthesis in crop plants. *Agricultural Meteorology*, 9:191–216, 1972.

[61] RE Chandler, AJ Houtepen, J Nelson, and D Vanmaekelbergh. Electron transport in quantum dot solids: Monte Carlo simulations of the effects of shell filling, Coulomb repulsions, and site disorder. *Physical Review B*, 75(8):085325, 2007.

[62] Andris Ambainis. Quantum walks and their algorithmic applications. *International Journal of Quantum Information*, 1(04):507–518, 2003.

[63] Sanjeev Arora. *Approximation, Randomization, and Combinatorial Optimization. Algorithms and Techniques: 6th International Workshop on Approximation Algorithms for Combinatorial Optimization Problems, APPROX 2003 and 7th International Workshop on Randomization and Approximation Techniques in Computer Science, RANDOM 2003, Princeto, NY, USA, August 24-26, 2003*, volume 2764. Springer Science & Business Media, 2003.

[64] Hari Krovi and Todd A Brun. Hitting time for quantum walks on the hypercube. *Physical Review A*, 73(3):032341, 2006.

[65] Martin Varbanov, Hari Krovi, and Todd A Brun. Hitting time for the continuous quantum walk. *Physical Review A*, 78(2):022324, 2008.

[66] Michael A Nielsen and Isaac L Chuang. *Quantum computation and quantum information*. Cambridge university press, 2010.

[67] *Proceedings of the 45th Annual IEEE Symposium on Foundations of Computer Science*. IEEE, 2004.

[68] Julia Kempe. Quantum random walks: An introductory overview. *Contemporary Physics*, 44(4):307–327, 2003.

[69] Edward A Codling, Michael J Plank, and Simon Benhamou. Random walk models in biology. *Journal of the Royal Society Interface*, 5(25):813–834, 2008.

[70] Herman OA Wold. *Scientists at Work: Festschrift in Honour of Herman Wold*. Almqvist & Wiksell, 1970.

[71] Georg Pólya. Über eine Aufgabe der Wahrscheinlichkeitsrechnung betreffend die Irrfahrt im Straßennetz. *Mathematische Annalen*, 84:149–160, 1921.

[72] John G Kemeny and James Laurie Snell. *Finite Markov chains*, volume 356. van Nostrand Princeton, NJ, 1960.

[73] James R Norris. *Markov chains*. Cambridge university press, 1998.

[74] M Štefaňák, I Jex, and T Kiss. Recurrence and Pólya number of quantum walks. *Physical review letters*, 100(2):020501, 2008.

[75] Edward Brian Davies. *Quantum theory of open systems*. IMA, 1976.

[76] Neil Shenvi, Julia Kempe, and K Birgitta Whaley. Quantum random-walk search algorithm. *Physical Review A*, 67(5):052307, 2003.

[77] Domenico PL Castrigiano and U Mutze. Repeated measurements in quantum theory. *Physical Review A*, 30(5):2210, 1984.

[78] CM Chandrashekar. Zeno subspace in quantum-walk dynamics. *Physical Review A*, 82(5):052108, 2010.

[79] Gerhard Mack, Sascha Wallentowitz, and Peter E Toschek. Decoherence in generalized measurement and the quantum Zeno paradox. *Physics Reports*, 540(1):1–23, 2014.

[80] Pierre Curie. *Propriétés magnétiques des corps a diverses températures*. Gauthier-Villars et fils, 1895.

[81] Louis Néel. Proprietes magnetiques des ferrites-ferrimagnetisme et antiferromagnetisme. In *Annales de Physique*, number 2 in 3, pages 137–198. EDP SCIENCES SA 17, AVE DU HOGGAR, PA COURTABOEUF, BP 112, F-91944 LES ULIS CEDEX A, FRANCE, 1948.

[82] Louis Néel. *Influence des fluctuations des champs moléculaires sur les propriétés magnétiques des corps*. PhD thesis, Universite, 1932.

[83] LD Landau. A possible explanation of the field dependence of the susceptibility at low temperatures. *Phys. Z. Sowjet*, 4:675, 1933.

[84] L Néel. Théorie du paramagnétisme constant; application au manganèse. *CR Acad. Sc*, 203:304–306, 1936.

[85] Linus Pauling. The calculation of matrix elements for Lewis electronic structures of molecules. *The Journal of Chemical Physics*, 1(4):280–283, 1933.

[86] Bill Sutherland. Systems with resonating-valence-bond ground states: Correlations and excitations. *Physical Review B*, 37(7):3786, 1988.

[87] S Liang, B Doucot, and PW Anderson. Some new variational resonating-valence-bond-type wave functions for the spin-1/2 antiferromagnetic heisenberg model on a square lattice. *Physical review letters*, 61(3):365, 1988.

[88] Werner Heisenberg. Zur theorie des ferromagnetismus. *Zeitschrift für Physik*, 49(9-10):619–636, 1928.

[89] I. Y. Pomeranchuk. Zh. Eksp. Teor. Fiz. 11 (226), 1941.

[90] I. Y. Pomeranchuk. Sov. Phys. JETP, 8 (361), 1958.

[91] Philip W Anderson. Resonating valence bonds: A new kind of insulator. *Mater. Res. Bull*, 8(2):153–60, 1973.

[92] PWAP Fazekas and PW Anderson. On the ground state properties of the anisotropic triangular antiferromagnet. *Philosophical Magazine*, 30(2):423–440, 1974.

[93] Patrik Fazekas. *Electron correlation and magnetism*, volume 5. World Scientific, 1999.

[94] Ernst Ising. Beitrag zur theorie des ferromagnetismus. *Zeitschrift für Physik A Hadrons and Nuclei*, 31(1):253–258, 1925.

[95] Hans Bethe. Zur theorie der metalle. *Zeitschrift für Physik*, 71(3-4):205–226, 1931.

[96] HM Babujian. Exact solution of the one-dimensional isotropic Heisenberg chain with arbitrary spins s. *Physics Letters A*, 90(9):479–482, 1982.

[97] Lars Onsager. Crystal statistics. I. A two-dimensional model with an order-disorder transition. *Physical Review*, 65(3-4):117, 1944.

[98] Chen Ning Yang. The spontaneous magnetization of a two-dimensional Ising model. *Physical Review*, 85(5):808, 1952.

[99] Daniel C Mattis and CY Pan. Ground-State Energy of Heisenberg Antiferromagnet for Spins $s = 1/2$ and $s = 1$ in $d = 1$ and 2 Dimensions. *Physical review letters*, 61(4):463, 1988.

[100] DC Mattis and CY Pan. *Magnetic Excitations and Fluctuations II*. Springer Series in Solid State Physics, 1984.

[101] PW Anderson, G Baskaran, Z Zou, and T Hsu. Resonating–valence-bond theory of phase transitions and superconductivity in La 2 CuO 4-based compounds. *Physical review letters*, 58(26):2790, 1987.

[102] JE Hirsch. Antiferromagnetism, localization, and pairing in a two-dimensional model for CuO 2. *Physical review letters*, 59(2):228, 1987.

[103] PB Wiegmann. Superconductivity in strongly correlated electronic systems and confinement versus deconfinement phenomenon. *Physical review letters*, 60(9):821, 1988.

[104] E Jordao Neves and J Fernando Perez. Long range order in the ground state of two-dimensional antiferromagnets. *Physics Letters A*, 114(6):331–333, 1986.

[105] Ian Affleck, Tom Kennedy, Elliott H Lieb, and Hal Tasaki. Valence bond ground states in isotropic quantum antiferromagnets. In *Condensed Matter Physics and Exactly Soluble Models*, pages 253–304. Springer, 2004.

[106] PC Hohenberg. Existence of long-range order in one and two dimensions. *Physical Review*, 158(2):383, 1967.

[107] N David Mermin and Ho Wagner. Absence of ferromagnetism or antiferromagnetism in one-or two-dimensional isotropic Heisenberg models. *Physical Review Letters*, 17(22):1133, 1966.

[108] Sidney Coleman. There are no Goldstone bosons in two dimensions. *Communications in Mathematical Physics*, 31(4):259–264, 1973.

[109] M. Greiner O. Mandel T. Esslinger T. W. Hansch és I. Bloch. Quantum phase transition from a superfluid to a Mott insulator in a gas of ultracold atoms. *Nature*, 415:39, 2002.

[110] R. Jordens N. Strohmaier K. Gunter H. Moritz and T. Esslinger. A Mott insulator of fermionic atoms in an optical lattice. *Nature*, 455:204, 2008.

[111] U. Schneider L. Hackermüller S. Will Th. Best I. Bloch T. A. Costi R. W. Helmes D. Rasch és A. Rosch. Metallic and insulating phases of repulsively interacting fermions in a 3D optical lattice. *Science*, 322:1520, 2008.

[112] P. Zoller E. Demler M. D. Lukin és A. M. Rey A. V. Gorshkov M. Hermele V. Gurarie C. Xu P. S. Julienne J. Ye. Two-orbital SU(N) magnetism with ultracold alkaline-earth atoms. *Nature Physics*, 6:289–295, 2010.

[113] S. Taie R. Yamazaki S. Sugawa és Yoshiro Takahashi. An SU(6) Mott insulator of an atomic Fermi gas realized by large-spin Pomeranchuk cooling. *Nature Physics*, 8:825–830, 2012.

[114] E. J. W. Verwey J. H. de Boer. Semi-conductors with partially and with completely filled 3D-lattice bands. *Proc. Phys. Soc.*, 49(4S):59–72, 1937.

[115] R. Peierls N. F. Mott. Discussion of the paper by de Boer and Verwey. *Proc. Phys. Soc.*, 49(4S):72–73, 1937.

[116] N. F. Mott. The Basis of the Electron Theory of Metals, with Special Reference to the Transition Metals. *Proc. Phys. Soc.*, 62(7):416–422, 1949.

[117] John Hubbard. Electron correlations in narrow energy bands. In *Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, volume 276, pages 238–257. The Royal Society, 1963.

[118] MC Gutzwiller. Phys. Re V. Lett. 1963, 10, 159, 1964.

[119] Eduardo Fradkin. *Field theories of condensed matter systems*. Addison Wesley Publishing Company, 1991.

[120] Jozef Spalek. t-J model then and now: a personal perspective from the pioneering times. *arXiv preprint arXiv:0706.4236*, 2007.

[121] Masao Ogata and Hiroyuki Shiba. Bethe-ansatz wave function, momentum distribution, and spin correlation in the one-dimensional strongly correlated Hubbard model. *Physical Review B*, 41(4):2326, 1990.

[122] C Stephen Hellberg and EJ Mele. Phase diagram of the one-dimensional t-J model from variational theory. *Physical review letters*, 67(15):2080, 1991.

[123] Roser Valentí and Claudius Gros. Luttinger Liquid Instability of the 2D t- J Model: A Variational Study. *Physical review letters*, 69(6):996, 1992.

[124] C Stephen Hellberg and EJ Mele. Luttinger-liquid instability in the one-dimensional t-J model. *Physical Review B*, 48(1):646, 1993.

[125] Alexander Altland and Ben D Simons. *Condensed matter field theory*. Cambridge University Press, 2010.

[126] E Fradkin and A Auerbach. *Interacting Electrons and Quantum Magnetism*. Springer-Verlag, New York, 1994.

[127] Xi-Wen Guan, Murray T Batchelor, and Chaohong Lee. Fermi gases in one dimension: From Bethe ansatz to experiments. *Reviews of Modern Physics*, 85(4):1633, 2013.

[128] Ole Jürgensen, Jannes Heinze, and Dirk-Sören Lühmann. Large-amplitude superexchange of high-spin fermions in optical lattices. *New Journal of Physics*, 15(11):113017, 2013.

[129] Immanuel Bloch. Ultracold quantum gases in optical lattices. *Nature Physics*, 1(1):23–30, 2005.

[130] Leticia Tarruell, Daniel Greif, Thomas Uehlinger, Gregor Jotzu, and Tilman Esslinger. Creating, moving and merging Dirac points with a Fermi gas in a tunable honeycomb lattice. *Nature*, 483(7389):302–305, 2012.

[131] Daniel Greif, Gregor Jotzu, Michael Messer, Rémi Desbuquois, and Tilman Esslinger. Formation and dynamics of anti-ferromagnetic correlations in tunable optical lattices. *arXiv preprint arXiv:1509.00854*, 2015.

[132] Markus Greiner, Olaf Mandel, Tilman Esslinger, Theodor W Hänsch, and Immanuel Bloch. Quantum phase transition from a superfluid to a Mott insulator in a gas of ultracold atoms. *nature*, 415(6867):39–44, 2002.

[133] Robert Jördens, Niels Strohmaier, Kenneth Günter, Henning Moritz, and Tilman Esslinger. A Mott insulator of fermionic atoms in an optical lattice. *Nature*, 455(7210):204–207, 2008.

[134] Wilhelm Zwerger. Mott–Hubbard transition of cold atoms in optical lattices. *Journal of Optics B: Quantum and Semiclassical Optics*, 5(2):S9, 2003.

[135] Immanuel Bloch, Jean Dalibard, and Wilhelm Zwerger. Many-body physics with ultracold gases. *Reviews of Modern Physics*, 80(3):885, 2008.

[136] Cheng Chin, Rudolf Grimm, Paul Julienne, and Eite Tiesinga. Feshbach resonances in ultracold gases. *Reviews of Modern Physics*, 82(2):1225, 2010.

[137] F Werner, O Parcollet, A Georges, and SR Hassan. Interaction-induced adiabatic cooling and antiferromagnetism of cold fermions in optical lattices. *Physical review letters*, 95(5):056401, 2005.

[138] Lorenzo De Leo, Corinna Kollath, Antoine Georges, Michel Ferrero, and Olivier Parcollet. Trapping and cooling fermionic atoms into Mott and Néel states. *Physical review letters*, 101(21):210403, 2008.

[139] Robin Côté, Alexander Russell, Edward E Eyler, and Phillip L Gould. Quantum random walk with Rydberg atoms in an optical lattice. *New Journal of Physics*, 8(8):156, 2006.

[140] Wolfgang Dür, Robert Raussendorf, Viv M Kendon, and H-J Briegel. Quantum walks in optical lattices. *Physical Review A*, 66(5):052319, 2002.

[141] Philipp M Preiss, Ruichao Ma, M Eric Tai, Alexander Lukin, Matthew Rispoli, Philip Zupancic, Yoav Lahini, Rajibul Islam, and Markus Greiner. Strongly correlated quantum walks in optical lattices. *Science*, 347(6227):1229–1233, 2015.

[142] Nandan Satapathy, Henning Hagman, Martin Zelán, Anders Kastberg, and Hema Ramachandran. Theoretical investigations of quantum walks by cold atoms in a double optical lattice. *Physical Review A*, 80(1):012302, 2009.

[143] P Sinkovicz, A Zamora, E Szirmai, M Lewenstein, and G Szirmai. Spin liquid phases of alkaline-earth-metal atoms at finite temperature. *Physical Review A*, 88(4):043619, 2013.

[144] Assa Auerbach and Daniel P Arovas. Spin dynamics in the square-lattice antiferromagnet. *Physical review letters*, 61(5):617, 1988.

[145] Laura Messio, Claire Lhuillier, and Grégoire Misguich. Time reversal symmetry breaking chiral spin liquids: Projective symmetry group approach of bosonic mean-field theories. *Physical Review B*, 87(12):125127, 2013.

[146] Rebecca Flint and P Coleman. Symplectic N and time reversal in frustrated magnetism. *Physical Review B*, 79(1):014424, 2009.

[147] Fa Wang. Schwinger boson mean field theories of spin liquid states on a honeycomb lattice: Projective symmetry group analysis and critical field theory. *Physical Review B*, 82(2):024419, 2010.

[148] Peng Li, Guang-Ming Zhang, and Shun-Qing Shen. SU(3) bosons and the spin nematic state on the spin-1 bilinear-biquadratic triangular lattice. *Physical Review B*, 75(10):104420, 2007.

[149] D Jakab, E Szirmai, M Lewenstein, and G Szirmai. Competition between valence bond and symmetry breaking Mott states of four component fermions on a honeycomb optical lattice. *arXiv preprint arXiv:1509.07362*, 2015.

[150] Philip W Anderson. An approximate quantum theory of the antiferromagnetic ground state. *Physical Review*, 86(5):694, 1952.

[151] J Goldstone. Nuovo cim. 19 (1961) 154; j. goldstone, a. salam and s. weinberg. *Phys. Rev*, 127(965):2, 1962.

[152] Zoltan Kurucz and Klaus Mølmer. Multilevel Holstein-Primakoff approximation and its application to atomic spin squeezing and ensemble quantum memories. *Physical Review A*, 81(3):032314, 2010.

[153] Bela Bauer, Philippe Corboz, Andreas M Läuchli, Laura Messio, Karlo Penc, Matthias Troyer, and Frédéric Mila. Three-sublattice order in the SU(3) Heisenberg model on the square and triangular lattice. *Physical Review B*, 85(12):125116, 2012.

[154] Tamás A Tóth, Andreas M Läuchli, Frédéric Mila, and Karlo Penc. Three-sublattice ordering of the SU(3) Heisenberg model of three-flavor fermions on the square and cubic lattices. *Physical review letters*, 105(26):265301, 2010.

[155] Christopher L Henley. Ordering by disorder: Ground-state selection in fcc vector antiferromagnets. *Journal of Applied Physics*, 61(8):3962–3964, 1987.

[156] Christopher L Henley. Ordering due to disorder in a frustrated vector antiferromagnet. *Physical review letters*, 62(17):2056, 1989.

[157] Taner Yildirim. Ordering due to disorder in frustrated quantum magnetic systems. *Turkish Journal of Physics*, 23(1):47–76, 1999.

[158] Igor A Zaliznyak. *Spin Structures and Spin Wave Excitations*. Handbook of Magnetism and Advanced Magnetic Materials, 2007.

[159] TE Mason. Neutron scattering studies of spin fluctuations in high temperature superconductors. *arXiv preprint cond-mat/9812287*, 1998.

[160] VE Naish, Ruslan Pavlovich Ozerov, et al. *Neutron diffraction of magnetic materials*. Springer Science & Business Media, 2012.

[161] Tapan Chatterji. *Neutron scattering from magnetic materials*. Gulf Professional Publishing, 2005.

[162] Robert M White and Bradford Bayne. *Quantum theory of magnetism*, volume 1. Springer, 1983.

[163] Igor A Zaliznyak and Seung-Hun Lee. *Magnetic neutron scattering*. Modern Techniques for Characterizing Magnetic Materials, Springer, Heidelberg, 2005.

[164] Lov K Grover. A fast quantum mechanical algorithm for database search. In *Proceedings of the twenty-eighth annual ACM symposium on Theory of computing*, pages 212–219. ACM, 1996.

[165] V Potoček, Aurél Gábris, Tamás Kiss, and Igor Jex. Optimized quantum random-walk search algorithms on the hypercube. *Physical Review A*, 79(1):012325, 2009.

[166] Barry C Sanders, Stephen D Bartlett, Ben Tregenna, and Peter L Knight. Quantum quincunx in cavity quantum electrodynamics. *Physical Review A*, 67(4):042305, 2003.

[167] Tiegang Di, Mark Hillery, and M Suhail Zubairy. Cavity QED-based quantum walk. *Physical Review A*, 70(3):032304, 2004.

[168] H Jeong, M Paternostro, and MS Kim. Simulation of quantum random walks using the interference of a classical field. *Physical Review A*, 69(1):012310, 2004.

[169] Linda Sansoni, Fabio Sciarrino, Giuseppe Vallone, Paolo Mataloni, Andrea Crespi, Roberta Ramponi, and Roberto Osellame. Two-particle bosonic-fermionic quantum walk via integrated photonics. *Physical review letters*, 108(1):010502, 2012.

[170] Antoni Wójcik, Tomasz Łuczak, Paweł Kurzyński, Andrzej Grudka, Tomasz Gdala, and Małgorzata Bednarska-Bzdęga. Trapping a particle of a quantum walk on the line. *Physical Review A*, 85(1):012329, 2012.

[171] Sandeep K Goyal, Filippus S Roux, Andrew Forbes, and Thomas Konrad. Implementing quantum walks using orbital angular momentum of classical light. *Physical review letters*, 110(26):263602, 2013.

[172] Daniel J Egger and Frank K Wilhelm. Optimized controlled-Z gates for two superconducting qubits coupled through a resonator. *Superconductor Science and Technology*, 27(1):014001, 2014.

[173] Orsolya Kálmán, Tamás Kiss, and Péter Földi. Quantum walk on the line with quantum rings. *Physical Review B*, 80(3):035327, 2009.

[174] Kai Eckert, J Mompart, G Birkl, and Maciej Lewenstein. One-and two-dimensional quantum walks in arrays of optical traps. *Physical Review A*, 72(1):012327, 2005.

[175] Michal Karski, Leonid Förster, Jai-Min Choi, Andreas Steffen, Wolfgang Alt, Dieter Meschede, and Artur Widera. Quantum walk in position space with single optically trapped atoms. *Science*, 325(5937):174–177, 2009.

[176] Maximilian Genske, Wolfgang Alt, Andreas Steffen, Albert H Werner, Reinhard F Werner, Dieter Meschede, and Andrea Alberti. Electric quantum walks with individual atoms. *Physical review letters*, 110(19):190601, 2013.

[177] Marcel Weiß, Caspar Groiseau, WK Lam, Raffaella Burioni, Alessandro Vezzani, Gil S Summy, and Sandro Wimberger. Steering random walks with kicked ultracold atoms. *Physical Review A*, 92(3):033606, 2015.

[178] Hector Schmitz, Robert Matjeschk, Ch Schneider, Jan Glueckert, Martin Enderlein, Thomas Huber, and Tobias Schaetz. Quantum walk of a trapped ion in phase space. *Physical review letters*, 103(9):090504, 2009.

[179] F Zähringer, G Kirchmair, R Gerritsma, E Solano, R Blatt, and CF Roos. Realization of a quantum walk with one and two trapped ions. *Physical review letters*, 104(10):100503, 2010.

[180] Nathan Goldman, Egidijus Anisimovas, Fabrice Gerbier, P Öhberg, IB Spielman, and G Juzeliūnas. Measuring topology in a laser-coupled honeycomb lattice: from Chern insulators to topological semimetals. *New journal of physics*, 15(1):013025, 2013.

[181] Seiji Yunoki and Sandro Sorella. Two spin liquid phases in the spatially anisotropic triangular heisenberg model. *Physical Review B*, 74(1):014408, 2006.

[182] Monika Aidelsburger, Michael Lohse, C Schweizer, Marcos Atala, Julio T Barreiro, S Nascimbene, NR Cooper, Immanuel Bloch, and N Goldman. Measuring the Chern number of hofstadter bands with ultracold bosonic atoms. *Nature Physics*, 11(2):162–166, 2015.

[183] GK Rohde, JM Nichols, and F Bucholtz. Chaotic signal detection and estimation based on attractor sets: Applications to secure communications. *Chaos: An Interdisciplinary Journal of Nonlinear Science*, 18(1):013114, 2008.

[184] Giulio Casati, Giulio Maspero, and Dima L Shepelyansky. Quantum Poincaré recurrences. *Physical review letters*, 82(3):524, 1999.

[185] Giuliano Benenti, Giulio Casati, Giulio Maspero, and Dima L Shepelyansky. Quantum Poincaré recurrences for a hydrogen atom in a microwave field. *Physical review letters*, 84(18):4088, 2000.

[186] Karol Życzkowski and Ingemar Bengtsson. On duality between quantum maps and quantum states. *Open systems & information dynamics*, 11(01):3–42, 2004.

[187] Wojciech H Zurek. Decoherence and the transition from quantum to classical. *arXiv preprint quant-ph/0306072*, 2003.

[188] Leonardo Novo, Shantanav Chakraborty, Masoud Mohseni, Hartmut Neven, and Yasser Omar. Systematic Dimensionality Reduction for Quantum Walks: Optimal Spatial Search and Transport on Non-Regular Graphs. *Scientific Reports*, 5(13304), 2015.

[189] Francesco Mezzadri. How to generate random matrices from the classical compact groups. *arXiv preprint math-ph/0609050*, 2006.

[190] Jörg Liesen and Zdenek Strakos. *Krylov subspace methods: principles and analysis*. Oxford University Press, 2012.

[191] Oliver Mülken and Alexander Blumen. Continuous-time quantum walks: Models for coherent transport on complex networks. *Physics Reports*, 502(2):37–87, 2011.

[192] Oliver Mülken, Alexander Blumen, Thomas Amthor, Christian Giese, Markus Reetz-Lamour, and Matthias Weidemüller. Survival probabilities in coherent exciton transfer with trapping. *Physical review letters*, 99(9):090601, 2007.

[193] Oliver Mülken, Veronika Bierbaum, and Alexander Blumen. Coherent exciton transport in dendrimers and continuous-time quantum walks. *The Journal of chemical physics*, 124(12):124905, 2006.

[194] Oliver Mülken, Volker Pernice, and Alexander Blumen. Quantum transport on small-world networks: A continuous-time quantum walk approach. *Physical Review E*, 76(5):051125, 2007.

[195] M E Shirokov. Reversibility conditions for quantum channels and their applications. *Sbornik: Mathematics*, 204(8):1215, 2013.

[196] Hermann Arthur Jahn and Edward Teller. Stability of polyatomic molecules in degenerate electronic states. I. Orbital degeneracy. In *Proceedings of the Royal Society of London A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, volume 161, pages 220–235. The Royal Society, 1937.

[197] Masatoshi Imada, Atsushi Fujimori, and Yoshinori Tokura. Metal-insulator transitions. *Reviews of Modern Physics*, 70(4):1039, 1998.

[198] T Kimura, S Ishihara, H Shintani, T Arima, KT Takahashi, K Ishizaka, and Y Tokura. Distorted perovskite with e g 1 configuration as a frustrated spin system. *Physical Review B*, 68(6):060403, 2003.

[199] Ming Yi, Donghui Lu, Jiun-Haw Chu, James G Analytis, Adam P Sorini, Alexander F Kemper, Brian Moritz, Sung-Kwan Mo, Rob G Moore, Makoto Hashimoto, et al. Symmetry-breaking orbital anisotropy observed for detwinned Ba (Fe1-xCox) 2As2 above the spin density wave transition. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 108(17):6878–6883, 2011.

[200] S Ishihara, J Inoue, and S Maekawa. Effective Hamiltonian in manganites: mStudy of the orbital and spin structures. *Physical Review B*, 55(13):8280, 1997.

[201] Kliment I Kugel' and D I Khomskiĭ. The Jahn-Teller effect and magnetism: transition metal compounds. *Soviet Physics Uspekhi*, 25(4):231, 1982.

[202] Jeroen van den Brink, Zohar Nussinov, and Andrzej M. Oleś. Frustration in systems with orbital degrees of freedom. In Claudine Lacroix, Philippe Mendels, and Frédéric Mila, editors, *Introduction to Frustrated Magnetism*, volume 164 of *Springer Series in Solid-State Sciences*, pages 629–670. Springer Berlin Heidelberg, 2011.

[203] P Sinkovicz, G Szirmai, and K Penc. Order by disorder in a four-flavor Mott insulator on the fcc lattice. *Physical Review B*, 93(7):075137, 2016.

[204] Y. Q. Li, Michael Ma, D. N. Shi, and F. C. Zhang. Su(4) theory for spin systems with orbital degeneracy. *Phys. Rev. Lett.*, 81:3527–3530, Oct 1998.

[205] Yasufumi Yamashita, Naokazu Shibata, and Kazuo Ueda. Su(4) spin-orbit critical state in one dimension. *Phys. Rev. B*, 58:9114–9118, Oct 1998.

[206] K. I. Kugel, D. I. Khomskii, A. O. Sboychakov, and S. V. Streltsov. Spin-orbital interaction for face-sharing octahedra: Realization of a highly symmetric SU(4) model. *Phys. Rev. B*, 91:155125, Apr 2015.

[207] Beat Frischmuth, Frédéric Mila, and Matthias Troyer. Thermodynamics of the one-dimensional SU(4) symmetric spin-orbital model. *Phys. Rev. Lett.*, 82:835–838, Jan 1999.

[208] Philippe Corboz, Miklós Lajkó, Andreas M. Läuchli, Karlo Penc, and Frédéric Mila. Spin-Orbital Quantum Liquid on the Honeycomb Lattice. *Phys. Rev. X*, 2:041013, Nov 2012.

[209] Bill Sutherland. Model for a multicomponent quantum system. *Phys. Rev. B*, 12:3795–3805, Nov 1975.

[210] Mathias van den Bossche, Patrick Azaria, Philippe Lecheminant, and Frédéric Mila. Spontaneous plaquette formation in the SU(4) Spin-Orbital ladder. *Phys. Rev. Lett.*, 86(18):4124, April 2001.

[211] Philippe Corboz, Karlo Penc, Frédéric Mila, and Andreas M. Läuchli. Simplex solids in SU(N) Heisenberg models on the kagome and checkerboard lattices. *Phys. Rev. B*, 86:041106, Jul 2012.

[212] Miklós Lajkó and Karlo Penc. Tetramerization in a SU(4) Heisenberg model on the honeycomb lattice. *Phys. Rev. B*, 87:224428, Jun 2013.

[213] M. van den Bossche, F.-C. Zhang, and F. Mila. Plaquette ground state in the two-dimensional SU(4) spin-orbital model. *The European Physical Journal B - Condensed Matter and Complex Systems*, 17(3):367–370, 2000.

[214] E. Szirmai and M. Lewenstein. Exotic magnetic orders for high-spin ultracold fermions. *Europhys. Lett.*, 93(6):66005, 2011.

[215] Philippe Corboz, Andreas M. Läuchli, Karlo Penc, Matthias Troyer, and Frédéric Mila. Simultaneous Dimerization and SU(4) Symmetry Breaking of 4-Color Fermions on the Square Lattice. *Phys. Rev. Lett.*, 107(21):215301, November 2011.

[216] S. Pankov, R. Moessner, and S. L. Sondhi. Resonating singlet valence plaquettes. *Phys. Rev. B*, 76:104436, Sep 2007.

[217] Cenke Xu and Congjun Wu. Resonating plaquette phases in SU(4) Heisenberg antiferromagnet. *Phys. Rev. B*, 77:134449, Apr 2008.

[218] Stefan Buhrandt and Lars Fritz. Spin-liquid phase and order by disorder of classical Heisenberg spins on the swedenborgite lattice. *Physical Review B*, 90(2):020403, 2014.

[219] Taner Yildirim, A Brooks Harris, and Eugene F Shender. Frustration and quantum fluctuations in Heisenberg fcc antiferromagnets. *Physical Review B*, 58(6):3144, 1998.

[220] Assa Auerbach. *Interacting electrons and quantum magnetism*. Springer Science & Business Media, 1994.

[221] Christian Krumnow. *Bogoliubov Theory for Bose Gases in Random Potentials*. PhD thesis, Freie Universitat Berlin, 2010.

[222] Yvan Castin. Bose-Einstein condensates in atomic gases: simple theoretical results. In *Coherent atomic matter waves*, pages 1–136. Springer, 2001.

[223] Julian Schwinger et al. *On angular momentum*. World Scientific, 1952.

[224] S Chaturvedi, Giuseppe Marmo, N Mukunda, Rajiah Simon, and Alessandro Zampini. The schwinger representation of a group: concept and applications. *Reviews in Mathematical Physics*, 18(08):887–912, 2006.

[225] Vivien Zapf, Marcelo Jaime, and CD Batista. Bose-Einstein condensation in quantum magnets. *Reviews of Modern Physics*, 86(2):563, 2014.

[226] Daniel P Arovas and Assa Auerbach. Functional integral theories of low-dimensional quantum Heisenberg models. *Physical Review B*, 38(1):316, 1988.

[227] N Read and Subir Sachdev. Valence-bond and spin-Peierls ground states of low-dimensional quantum antiferromagnets. *Physical review letters*, 62(14):1694, 1989.

[228] Manu Mathur, Indrakshi Raychowdhury, and Ramesh Anishetty. SU(N) irreducible schwinger bosons. *Journal of Mathematical Physics*, 51(9):093504, 2010.

[229] P Vinternitz, Ya A Smorodinskii, M Uglirzh, and I Frish. Symmetry groups in classical and quantum mechanics. *Yadern. Fiz.*, 4, 1966.

[230] Peter Woit. Quantum Theory, Groups and Representations: An Introduction (under construction), 2015.

[231] William Fulton. *Young tableaux: with applications to representation theory and geometry*, volume 35. Cambridge University Press, 1997.

[232] Charles Miller Grinstead and James Laurie Snell. *Introduction to probability*. American Mathematical Soc., 2012.