Dekohärenzeffekte in topologischen Phasen von Quantenwalks

BACHELORARBEIT IN PHYSIK

von Thorsten Georg Groh

angefertigt am Institut für Angewandte Physik,

vorgelegt der Mathematisch-Naturwissenschaftlichen Fakultät der Universität Bonn

> ^{im} Juli 2015.

1. Gutachter Prof. Dr. Dieter Meschede

> 2. Gutachter Prof. Dr. Johann Kroha

Die Klassifizierung von Quantenwalks über topologische Phasen ermöglicht die Erklärung der Existenz geschützter Zustände an räumlichen Phasengrenzen. In dieser Arbeit wird die Einwirkung von Dekohärenzeffekten auf die Existenz und Form dieser topologisch geschützten Zuständen in Quantenwalks mit diskreter Zeit auf ein- und zweidimensionalen diskreten Gittern simuliert und untersucht. Für die zeitliche Entwicklung topologisch geschützter, lokalisierter Randzustände wird im eindimensionalen System ein einfaches Modell gefunden. Die Grenzen des verwendeten Dekohärenzmodells werden durch die Konstruktion eines dekohärenzfreien Quantenwalk-Protokolls aufgezeigt. Außerdem werden die Möglichkeiten und Einschränkungen einer experimentellen Realisierung von topologischen Effekten in Quantenwalks mit neutralen Atomen in optischen Gittern simuliert und analysiert.

Inhaltsverzeichnis

1.	Einleitung		
2.	Quantenwalks mit diskreter Zeit 2.1. System	6 7 7 9 9	
3.	Dekohärenz 3.1. Verschränkung mit der Umgebung 3.2. Markovsche Umgebung 3.3. Dekohärenz in Quantenwalks	11 11 12 13	
4.	Topologie 4.1. Geschützte Randzustände4.2. Klassifizierung topologischer Phasen4.3. Erzeugung topologischer Phasenübergänge	15 15 16 17	
5.	Dekohärenzeffekte in topologischen Phasen in 1D 5.1. Topologische Klassifizierung 5.2. Form und Entwicklung der Randzustände 5.3. Population der Randzustände unter Spin-Dekohärenz 5.4. Dekohärenzfreie Zustände	19 19 23 25 27	
6.	Topologisch geschützte Zustände in 2D6.1. Topologische Klassifizierung6.2. Propagierende Randzustände	29 29 29	
7.	Simulation	32	
8.	Zusammenfassung und Ausblick	32	
Lit	eratur	33	
Α.	Anhang A.1. Herleitung – Quasienergie-Spektrum	35 35	
в.	Versicherung	36	

1. Einleitung

Seit Entdeckung des Quanten-Hall-Effekts 1980 [1] gab es großes Interesse an einer neuen Form von Materialien, welche sehr robuste und gegen viele Arten von Störungen geschützte Eigenschaften hervorbringen. So sind einige Materialien z.B. perfekte Isolatoren, zeigen jedoch eine Leitfähigkeit an den Rändern auf [2]. Dieser Effekt kann durch topologische Argumente erklärt und so bspw. die an den Rändern auftretende Leitfähigkeit auf große Genauigkeit vorhergesagt werden [2, 3]. Diese neuen Phasen von Festkörpern werden topologische Isolatoren genannt. Eine Vielzahl topologischer Isolatoren wurden bis jetzt vorhergesagt, jedoch nur eine kleine Zahl experimentell nachgewiesen. Die Erzeugung in Festkörpern ist nicht einfach, Festkörper-Isolatoren sind durch Unreinheiten im Material und auf Grund endlicher Temperaturen schwierig zu kontrollierende Systeme.

Quantenwalks bilden auf Grund eines diskreten, regelmäßigen Gitters ebenso wie topologische Isolatoren Energiebänder aus und auch in der topologischen Natur zeigen sich viele Parallelen. Auf Grund der Möglichkeit, den Ablauf eines Walks im Experiment sehr genau festzulegen und somit die topologische Struktur beeinflussen zu können, bieten Quantenwalks großes Potential, topologische Ordnungen in Festkörpern zu simulieren. Als periodisch getriebene Systeme zeigen sie jedoch auch einige Unterschiede zu statischen Isolatoren auf und erlauben den Zugang zu einer Vielzahl neuer topologischer Quantenmaterialien. In Anlehnung an die beobachteten Effekte in der Festkörperphysik, werden deren Eigenschaften mit dem Begriff "topologische Phasen" beschrieben.

In Abschnitt 2 wird zunächst das Konzept von Quantenwalks mit diskreter Zeit eingeführt und die hier untersuchten Quantenwalk-Protokolle vorgestellt. Die damit verbundenen Energiespektren werden berechnet. In 3 wird auf die Grundlagen des Dekohärenzbegriffs und die damit verbundene Beschreibung des Systems über eine reduzierte Dichtematrix eingegangen. Ein einfaches Dekohärenzmodell wird vorgestellt. Die topologische Natur statischer und periodisch getriebener Systeme und die damit verbundene Existenz topologisch geschützter Zustände wird in Abschnitt 4 aufgezeigt. Die Arbeit stellt hierbei keinen Anspruch, eine grundlegende mathematische Erklärung zu geben. Stattdessen werden anschauliche Argumente für die Existenz und den Schutz dieser Zustände geliefert. In Abschnitt 5 und 6 wird die topologischen Klassifizierungen in ausgewählten Quantenwalk-Protokollen in ein- und zweidimensionalen Systemen vorgestellt und die Existenz topologisch geschützter Zustände unter dem Einfluss von Dekohärenz simuliert und analysiert. Auf die Implementierung der Simulation wird in 7 kurz eingegangen.

2. Quantenwalks mit diskreter Zeit

Quantenwalks sind das quantenmechanische Analogon zum klassischen Randomwalk. In beiden Fällen wird ein Objekt, der sogenannte Walker, in Abhängigkeit eines zufällig bestimmten binären Freiheitsgrads auf einem Gitter mit diskreten Positionen bewegt. Diese Operationen, das Bestimmen des internen Freiheitsgrad und die anschließende vom Resultat abhängige Verschiebung werden periodisch wiederholt. Der interne Freiheitsgrad wird im Fall des klassischen Randomwalks durch einen Münzwurf realisiert. Auf einem eindimensionalen Gitter bewegt sich der Walker im einfachsten Fall bei Kopf einen Schritt nach rechts und bei Zahl einen Schritt nach links. Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit des Walkers auf dem Gitter nach wiederholter Anwendung der beiden Operationen wird durch die Anzahl, der in jedem Punkt des Gitters endenden Trajektorien bestimmt und resultiert bei einer fairen Münze¹ in einer Binomialverteilung [4]. Im klassischen Randomwalk ist das Ergebnis des Münzwurfs immer Kopf *oder* Zahl, pro Schritt bewegt sich der Walker somit in eine der beiden Richtungen. Im Quantenwalk wird der interne Freiheitsgrad als Zweiniveau-System beschrieben. Die quantenmechanische Beschreibung erlaubt hier Superpositionen von Zuständen, der Walker kann sich in einem Schritt somit nach rechts *und* links bewegen. Zwei durch einen Punkt verlaufende Trajektorien können sich auf Grund von Interferenz hiermit auch destruktiv überlagern.

¹ Die Wahrscheinlichkeit Kopf oder Zahl zu werfen sei gleich groß.

2.1. System

Das Quantensystem bestehe aus einem N-dimensionalen Gitter mit diskreten Positionen $\mathbf{x} \in \mathbb{Z}^N$. Der interne binäre Freiheitsgrad sei als Spin-1/2-System mit Spin $s \in \{\uparrow,\downarrow\}$ beschrieben. Ein reiner Zustand des Systems ist somit über

$$|\psi\rangle = \sum_{\mathbf{x}\in\mathbb{Z}^N}\sum_{s\in\{\uparrow,\downarrow\}}\psi_{\mathbf{x},s} |\mathbf{x}\rangle\otimes|s\rangle = \sum_{\mathbf{x},s}\psi_{\mathbf{x},s} |\mathbf{x}\rangle\otimes|s\rangle$$
(2.1)

mit Koeffizienten $\psi_{\mathbf{x},s} \in \mathbb{C}$ eindeutig bestimmt¹. Abkürzend sei $|\mathbf{x}, s\rangle = |\mathbf{x}\rangle \otimes |s\rangle$. Die Komponenten von \mathbf{x} seien $x_i \in \mathbb{Z}$, sodass $|\mathbf{x}\rangle = \bigotimes_{i=1}^N |x_i\rangle$. Das den Walker tragende Gitter habe vorerst eine unendliche Ausdehnung. Im Experiment sowie in der Simulation des Systems ist dieses natürlich auf einen endlichen Bereich $|x_i| \leq x_{i, \max}$ mit $x_{i, \max} \in \mathbb{Z}$ für alle *i* beschränkt.

2.2. Protokoll

Diese Arbeit beschränkt sich auf die Beschreibung von Quantenwalks mit diskreter Zeit, die Zustände des Systems ändern sich somit in festen Zeitschritten *T*. Es genügt also eine Beschreibung des Systems zu den Zeitpunkten t = mT mit $m \in \mathbb{N}$, wobei im Folgenden *t* in Einheiten von *T* angegeben sei, d.h. m = t. Der Ausgangszustand des Systems sei durch einen reinen Zustand $|\psi_0\rangle$ gegeben. Der Zustand zum Zeitpunkt t > 0 ist über einen unitären Operator \hat{U}_t , den Zeitentwicklungsoperator gegeben, der auf Grund der Periodizität der Zeitentwicklung durch einen periodisch auf das System wirkenden, unitären Walk-Operator \hat{W} beschrieben werden kann:

$$|\psi_t\rangle = \hat{U}_t |\psi_0\rangle = \hat{W}^t |\psi_0\rangle . \tag{2.2}$$

Die Form des Walk-Operators definiert das "Protokoll" des Walks. Im einfachsten Fall besteht jener aus einem Münz-Operator \hat{C} (Coin) sowie einem spinabhängigen Shift-Operator \hat{S}_j . Der Münz-Operator ist definiert über

$$\hat{C}(\theta) = \hat{\mathbb{1}}_{\mathfrak{X}} \otimes \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{\sigma}_2 \,\theta/2},\tag{2.3}$$

wobei $\hat{\sigma}_2$ die zweite Pauli-Matrix² und $\hat{\mathbb{1}}_{\mathfrak{X}} = \sum_{\mathbf{x}} |\mathbf{x}\rangle \langle \mathbf{x}|$ der Einheitsoperator im Ortsraum ist. Diese Operation entspricht, bei der Betrachtung des Spinors als Vektor auf der Bloch-Kugel³, einer Drehung des Spin-Vektors um den Winkel θ um die y-Achse. Ein in Ort $|\phi\rangle$ und Spin $|s\rangle$ ($s \in \{\uparrow, \downarrow\}$) faktorisierender Zustand erfährt die Abbildung

$$C(\theta) : |\phi\rangle \otimes |\uparrow\rangle \quad \mapsto \quad |\phi\rangle \otimes (+\cos(\theta/2) |\uparrow\rangle + \sin(\theta/2) |\downarrow\rangle) |\phi\rangle \otimes |\downarrow\rangle \quad \mapsto \quad |\phi\rangle \otimes (-\sin(\theta/2) |\uparrow\rangle + \cos(\theta/2) |\downarrow\rangle) .$$
(2.4)

Der Coin-Operator bringt die Spin-Zustände in eine Superposition von \uparrow und \downarrow und übernimmt somit die Rolle der Münze. Für $\theta = \pi/2$ ist die Münze fair (sog. "Hadamard-Münze"). Der Shift-Operator \hat{S}_j ist für $j \in [1, N]$ über folgende Abbildung definiert:

$$\hat{S}_{j}:\left(\bigotimes_{i\neq j}|x_{i}\rangle\right)\otimes|x_{j}\rangle\otimes|\uparrow\rangle \quad \mapsto \quad \left(\bigotimes_{i\neq j}|x_{i}\rangle\right)\otimes|x_{j}+1\rangle\otimes|\uparrow\rangle \\
\left(\bigotimes_{i\neq j}|x_{i}\rangle\right)\otimes|x_{j}\rangle\otimes|\downarrow\rangle \quad \mapsto \quad \left(\bigotimes_{i\neq j}|x_{i}\rangle\right)\otimes|x_{j}-1\rangle\otimes|\downarrow\rangle$$
(2.5)

Dieser "verschiebt" Zustände mit Spin \uparrow in positive und Zustände mit Spin \downarrow in negative x_j -Richtung. Der Shift-Operator lässt sich somit schreiben als

$$\hat{S}_{j} = \left(\bigotimes_{i \neq j} \sum_{x_{i}} |x_{i}\rangle\langle x_{i}|\right) \otimes \left(\sum_{x_{j}} |x_{j}+1\rangle\langle x_{j}|\otimes|\uparrow\rangle\langle\uparrow| + \sum_{x_{j}} |x_{j}-1\rangle\langle x_{j}|\otimes|\downarrow\rangle\langle\downarrow|\right).$$
(2.6)

¹ Im Experiment realisierte Systeme werden natürlich vielmehr durch eine Wellenfunktion, anstatt durch einen diskreten Zustands beschrieben. Für räumlich stark lokalisierte Teilchen mit kleiner Ausdehnung ist dies dennoch eine gute Näherung. ² Definiere $\hat{\sigma}_0 = |\uparrow\rangle\langle\uparrow| + |\downarrow\rangle\langle\downarrow|$, $\hat{\sigma}_1 = |\uparrow\rangle\langle\downarrow| + |\downarrow\rangle\langle\uparrow|$, $\hat{\sigma}_2 = i (|\downarrow\rangle\langle\uparrow| - |\uparrow\rangle\langle\downarrow|)$ und $\hat{\sigma}_3 = |\uparrow\rangle\langle\downarrow| - |\downarrow\rangle\langle\downarrow|$. ³ $|\uparrow\rangle$ sei der oberen und $|\downarrow\rangle$ der unteren Halbkugel zugeordnet.

Für das sogenannte Split-Step-Protokoll werden für N = 1 zusätzlich die modifizierten Shift-Operatoren

$$\hat{S}_{1}^{\uparrow} = \sum_{x} |x+1\rangle \langle x| \otimes |\uparrow\rangle \langle\uparrow| + \sum_{x} |x\rangle \langle x| \otimes |\downarrow\rangle \langle\downarrow| , \qquad (2.7)$$

$$\hat{S}_{1}^{\downarrow} = \sum_{x} |x\rangle \langle x| \otimes |\uparrow\rangle \langle\uparrow| + \sum_{x} |x-1\rangle \langle x| \otimes |\downarrow\rangle \langle\downarrow|$$
(2.8)

benötigt, welche nur je auf einen Spin-Zustand wirken und den anderen unbeeinflusst lassen. Da im Folgenden $N \leq 2$ sei $x_1 = x$, $x_2 = y$ und $\hat{S}_1 = \hat{S}_x$, $\hat{S}_2 = \hat{S}_y$. Ist das betrachtete System eindimensional sei der Index teilweise komplett unterdrückt: $\hat{S}_1 = \hat{S}_x = \hat{S}$.

Folgende Protokolle werden in dieser Arbeit untersucht:

1D-Standard-Protokoll: $\hat{W} = \hat{S}_x \hat{C}$	θ) (2.9)
---	------------------

1D-Split-Step-Protokoll:	$\hat{W} = \hat{S}_x^{\downarrow} \hat{C}(\theta_2) \hat{S}_x^{\uparrow} \hat{C}(\theta_1)$	(2.10)
2D-Standard-Protokoll:	$\hat{W} = \hat{S}_{tt} \hat{C}(\theta_2) \hat{S}_{tt} \hat{C}(\theta_1)$	(2.11)

Eine schematische Darstellung eines Schritts der Entwicklung des 1D-Standard-Protokolls findet sich in Abb. 2.1a. Die Wahrscheinlichkeit $p_{\mathbf{x},t}$ den Walker zur Zeit t am Ort \mathbf{x} des Gitters zu finden berechnet sich über die Projektion des Walk-Zustandes auf die Gitterzustände $|\mathbf{x}\rangle$, wobei über beide Spins summiert wird: $p_{\mathbf{x},t} = |\langle \mathbf{x}, \uparrow | \psi_t \rangle|^2 + |\langle \mathbf{x}, \downarrow | \psi_t \rangle|^2$. Die resultierende Verteilung ist für den 1D-Standard-Walk mit fairer Münze ($\theta = \pi/2$, sog. "Hadamard-Walk") in Abb. 2.1b dargestellt. Das dezentrale, stark ausgeprägte Maximum liegt in Abhängigkeit des Spin-Anfangszustand links oder rechts vom Startpunkt. Für den Anfangszustand $|\psi_0\rangle = |\mathbf{x}_0\rangle \otimes (1/\sqrt{2} |\uparrow\rangle + i/\sqrt{2} |\downarrow\rangle)$, d.h. mit gleich wahrscheinlicher Superposition von Spin \uparrow und \downarrow ergibt sich eine symmetrische Verteilung.

Die Standard-Abweichung σ des Quantenwalks zeigt ein ballistisches Verhalten mit $\sigma \propto t$, wohingegen sich der klassische Randomwalk mit $\sigma \propto \sqrt{t}$ diffusiv ausbreitet. Dieser Unterschied ist in Abb. 2.1b gut zu erkennen. Dies ist ein Grund, warum auf Quantenwalks basierende Algorithmen für bestimmte Probleme kürzere Laufzeiten versprechen und somit Motivation für den Bau von Quantencomputern. [5]



Abb. 2.1: (a) Schematische Darstellung des 1D-Standard-Protokolls bestehend Rotation um den Winkel θ und spinabhängigem Shift Ŝ. Der Pfeil symbolisiert den Spin, dessen Größe die Aufenthaltswahrscheinlichkeit.
(b) Aufenthaltswahrscheinlichkeit des 1D-Hadamard-Walks (blau) mit Anfangszustand |0⟩ ⊗ |↑⟩ (oben) bzw. |0⟩ ⊗ (1/√2 |↑⟩ + i/√2 |↓⟩) (unten) nach je 50 Schritten. Nur gerade Gitterplätze werden besetzt, diese sind verbunden dargestellt. Die Aufenthaltswahrscheinlichkeit eines Randomwalks (orange) mit gleicher Schrittzahl und Ausgangsposition ist zum Vergleich dargestellt.

2.3. Experiment

Im Experiment übernehmen Caesium-Atome die Rolle des Walkers. Die Reduktion auf ein effektives Spin-1/2-System erfolgt hierbei über die Wahl zweier Feinstruktur-Zustände, deren Lebensdauern groß im Vergleich zu den im Experiment relevanten Zeitskalen sind. Die Münzoperation wird durch Rabi-Oszillationen mit gewünschter Pulslänge erzielt. In einem Aufbau mit eindimensionalen Gitter wird dafür Mikrowellenstrahlung verwendet. Für die Realisierung auf dem Gitter variierende Münz-Winkel (vgl. 4.3) sollen für eine bessere Ortsauflösung jedoch Raman-Laser mit einer Wellenlänge von $\lambda_C = 894$ nm, der D1-Linie von Cs verwendet werden.

Über nichtresonante Laserstrahlung, welche eine stehende Welle bildet, wird das Atom in einem optischen Gitter gefangen. Das Atom erfährt hier aufgrund des Stark-Effekts ein periodisches, je nach Vorzeichen der Verstimmung des Laserlichts attraktives oder repulsives Potential. Durch Abstimmung der Frequenzen rotverstimmter Laserstrahlung an die ausgewählten Feinstrukturzustände des Walkers lässt sich ein spinabhängiges, in Bereichen hoher Intensität attraktives Potential realisieren (vgl. Abb. 2.2). Durch Variation der Position der spinabhängigen optischen Gitter kann das Caesium-Atom spinabhängig auf dem Gitter verschoben werden. [6, 7]



Abb. 2.2: Schematische Darstellung eines optischen Gitters (Dipolfalle). Ein Laserstrahl wird reflektiert und bildet eine stehende Welle. Die Gitterkonstante entspricht der halben Wellenlänge des Lasers.

2.4. Energiespektrum

Die in (2.3), (2.5), (2.7) und (2.8) definierten Operatoren sind für feste θ , wie weiter unten gezeigt, translationsinvariant. Die Eigenzustände des Hamilton-Operators eines räumlich diskreten, translationsinvarianten System sind nach dem Bloch-Theorem das Produkt ebener Wellen mit einem gitterperiodischen Blochfaktor [8]. Die Wellenlänge der ebenen Welle definiert einen Quasiimpuls **k**, der eine $2\pi/a$ -Periodizität aufweist, wobei *a* die Gitterkonstante des Systems ist. Zur Vereinfachung sei a = 1. Dieser Quasiimpuls ist über die Fouriertransformierte der Ortszustände

$$|\mathbf{k}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_{\mathbf{x}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} |\mathbf{x}\rangle$$
(2.12)

gegeben¹ und ist auf die, in Analogie zu der Beschreibung von Kristallstrukturen in der Festkörperphysik sog. (erste) Brillouin-Zone $BZ = \{\mathbf{k} \in \mathbb{R}^N | -\pi \le k_i \le \pi \ \forall i \in [1, N]\}$ beschränkt.

An Stelle des eigentlich zeitabhängigen Hamiltonian $\hat{H}(t)$ des periodisch getriebenen Systems kann im Rahmen der Floquet-Theorie über (2.2) ein effektiver Hamiltonian \hat{H} definiert werden [9]. Dieser beschreibt dann in Analogie zu einem nicht getriebenen System die Entwicklung des Systems über

$$|\psi_t\rangle = \hat{W}^t |\psi_0\rangle = e^{-i\hat{H}t} |\psi_0\rangle .$$
(2.13)

Die mit \hat{H} über den Erwartungswert assoziierte Energie wird Quasi-Energie genannt. Ähnlich wie die räumliche Translationsinvarianz den Quasiimpuls induziert, führt die Translationssymmetrie in der Zeit zu einer Quasienergie. Auf Grund der Form von (2.13) ist diese 2π -periodisch und sei deshalb im Folgenden ohne Beschränkung der Allgemeinheit auf das Intervall $[-\pi,\pi]$ beschränkt. Quasienergie ist ebenso wie Energie eine Erhaltungsgröße [9, S. 27]. Zusammen mit der diskreten Translationsinvarianz bildet ein Quantenwalk somit Quasienergiebänder. Das Bloch-Theorem sagt die Existenz kontinuierlicher Energiebänder voraus, deren Existenz im Folgenden bestätigt werden soll.

¹ Der Quasiimpuls **p** ist gegeben über $\mathbf{p} = \hbar \mathbf{k}$, wobei \hbar das Plancksche Wirkungsquantum ist. Im Folgenden sei $\hbar = 1$. Wellenvektor **k** und Impuls **p** sind somit gleich.

Die in (2.3), (2.5), (2.7) und (2.8) definierten Operatoren transformieren unter Ausnutzung von $|\mathbf{x}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{BZ} d\mathbf{k} \, e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \, |\mathbf{k}\rangle$ zu:

$$\hat{C} = \hat{\mathbb{1}}_{\mathcal{K}} \otimes e^{-i\hat{\sigma}_2 \theta/2}, \qquad (2.14)$$

$$\hat{S}_{j} = \left(\bigotimes_{i \neq j} \int \mathrm{d}\,k_{i} \,|k_{i}\rangle\langle k_{i}|\right) \otimes \int \mathrm{d}\,k_{j} \,|k_{j}\rangle\langle k_{j}| \otimes \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\,\hat{\sigma}_{3}\,k_{j}}\,,\tag{2.15}$$

$$\hat{S}_{j}^{\uparrow} = \left(\bigotimes_{i \neq j} \int \mathrm{d} \, k_{i} \, |k_{i}\rangle\langle k_{i}|\right) \otimes \int \mathrm{d} \, k_{j} \, |k_{j}\rangle\langle k_{j}| \otimes \left(\mathrm{e}^{\mathrm{i} \, k_{j}} \, |\uparrow\rangle\langle\uparrow| + |\downarrow\rangle\langle\downarrow|\right), \tag{2.16}$$

$$\hat{S}_{j}^{\downarrow} = \left(\bigotimes_{i \neq j} \int \mathrm{d}\,k_{i} |k_{i}\rangle\langle k_{i}|\right) \otimes \int \mathrm{d}\,k_{j} |k_{j}\rangle\langle k_{j}| \otimes \left(|\uparrow\rangle\langle\uparrow| + \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\,k_{j}} |\downarrow\rangle\langle\downarrow|\right), \qquad (2.17)$$

wobei k_i die *i*-te Komponente des Quasiimpulses darstellt, d.h. $|\mathbf{k}\rangle = \bigotimes_{i=1}^{N} |k_i\rangle$ und der Einheitsoperator im Quasiimpulsraum über $\hat{\mathbb{1}}_{\mathcal{H}} = \int d\mathbf{k} |\mathbf{k}\rangle \langle \mathbf{k}|$ mit $\int d\mathbf{k} = \int d^N k$ abkürzend definiert ist¹. Der Walk-Operator ist somit diagonal im **k**-Raum, weswegen diesem über

$$\hat{W} = \int d\mathbf{k} |\mathbf{k}\rangle \langle \mathbf{k}| \otimes \hat{W}(\mathbf{k}) = \int d\mathbf{k} |\mathbf{k}\rangle \langle \mathbf{k}| \otimes e^{-i\hat{H}(\mathbf{k})}$$
(2.18)

ein effektiver Bloch-Hamiltonian $\hat{H}(\mathbf{k})$ zugeordnet werden kann. Dessen Erwartungswert $\langle \hat{H}(\mathbf{k}) \rangle = E(\mathbf{k})$ entspricht der Quasienergie des Systems für feste \mathbf{k} . $\hat{W}(\mathbf{k})$ wirkt nur auf den Spin-Freiheitsgrad und kann deshalb als Superposition der Pauli-Matrizen geschrieben werden $\hat{W}(\mathbf{k}) = \vec{w}(\mathbf{k}) \cdot \hat{\sigma} + w_0(\mathbf{k}) \hat{\sigma}_0$ [10, S. 202]. Das damit verbundene Energiespektrum ergibt sich zu²:

$$E(\mathbf{k}) = \pm \arccos |w_0(\mathbf{k})|. \qquad (2.19)$$

Die dazugehörigen Eigenzustände können auf der Blochkugel dargestellt werden und sind durch den Vektor $\vec{n}(\mathbf{k})$ gegeben:

$$\vec{n}(\mathbf{k}) = \frac{\mathrm{i}\,\vec{w}(\mathbf{k})}{\sqrt{1 - w_0(\mathbf{k})^2}}\,.\tag{2.20}$$

Für die drei oben definierten Quantenwalk-Protokolle ergibt sich:

1D-Standard-Protokoll:

$$E(k) = \pm \arccos\left[\cos(\theta/2)\cos(k)\right]$$
(2.21)

1D-Split-Step-Protokoll:

$$E(k) = \pm \arccos\left[\cos(\theta_1/2)\cos(\theta_2/2)\right] \cos(k) - \sin(\theta_1/2)\sin(\theta_2/2)\right]$$
(2.22)

2D-Standard-Protokoll:

$$E(k_x, k_y) = \pm \arccos\left[\cos(\theta_1/2)\cos(\theta_2/2)\cos(k_x + k_y) - \sin(\theta_1/2)\sin(\theta_2/2)\cos(k_x - k_y)\right]$$
(2.23)

Hierbei wurde $k = k_1$ in 1D und $k_x = k_1$, $k_y = k_2$ in 2D definiert. Die drei Energiespektren sind in in Abb. 2.3 für verschiedene Münzwinkel in Abhängigkeit des Quasiimpulses dargestellt. Es bilden sich jeweils zwei um E = 0 symmetrische Energiebänder. Die Bandlücke kann auf Grund der Periodizität der Quasi-Energie sowohl bei E = 0, als auch bei $E = \pi = -\pi$ schließen.

¹ Integrale über den Quasiimpuls seien, wenn nicht explizit angegeben, auf die erste Brillouin-Zone beschränkt.

² Vgl. Herleitung in A.1.



Abb. 2.3: (a) Energiespektrum des 1D-Standard-Protokolls für $\theta = 0$ (rot-blau), $\pi/2$ (schwarz) und π (grün). (b) Energiespektrum des 1D-Split-Step-Protokolls für festes $\theta_1 = -\pi/2$ und $\theta_2 = -\pi/2$ (blau), 0 (schwarz) und $\pi/2$ (rot). Die Bandlücke kann in beiden Fällen sowohl bei Energie E = 0 (rot) oder $\pm \pi$ (blau) und $k = 0, \pm \pi$ schließen. (c) Energiespektrum des 2D-Standard-Protokolls für $\theta_1 = -\pi/2, \theta_2 = \pi/4$.

3. Dekohärenz

Bisher wurde das System als isoliert angenommen und somit jegliche Wechselwirkung mit der Umgebung vernachlässigt. Diese Annahme ist in einem experimentellen Aufbau nicht mehr gültig. Durch Interaktion mit der Umgebung kommt es zur Dekohärenz:

»Dekohärenz ist der umgebungswechselwirkungsinduzierte Verlust der Phaseninformationen in einem offenen quantenmechanischen System. Sie führt zum klassischen Verhalten makroskopischer Systeme.« [11]

Im Gegensatz zur Dissipation gibt es unter dem Einfluss von Dekohärenz keinen Energieaustausch mit der Umgebung. Dekohärenz beschreibt den Informationsverlust über die Phasenbeziehungen von Superpositionszuständen, was zu einer nicht unitären Zeitentwicklung führt. Die Ausführungen zu den theoretischen Grundlagen folgen [12, 13].

3.1. Verschränkung mit der Umgebung

Betrachte im Folgenden das System G bestehend aus Quantensystem S und Umgebung E. Der das System beschreibende Hilbertraum ist somit das Produkt $\mathcal{H}_G = \mathcal{H}_S \otimes \mathcal{H}_E$ der die Untersysteme beschreibenden Hilberträume \mathcal{H}_S , \mathcal{H}_E . Im Allgemeinen sind die Zustände von S und E verschränkt, d.h. ein Zustand $|\Phi\rangle$ in G kann nicht als Tensorprodukt von Zuständen der Teilsysteme geschrieben werden. Das System S wäre sonst unabhängig von E beschreibbar und somit effektiv wieder isoliert. Der Zustand $|\Phi\rangle$ ist im Allgemeinen also durch $|\Phi\rangle = \sum_{i,j} \Phi_{i,j} |s_i\rangle \otimes |e_j\rangle$ gegeben, wobei $\Phi_{i,j} \in \mathbb{C}$ und $\{|s_i\rangle\}, \{|e_i\rangle\}$ Basen in $\mathcal{H}_S, \mathcal{H}_E$ sind. Im Folgenden wird davon ausgegangen, dass die $|s_i\rangle$ orthonormal sind. Diesem Zustand kann eine Dichtematrix $\hat{\rho} = |\Phi\rangle \langle \Phi|$ zugeordnet werden. Unter der Annahme, dass der Experimentator nur Zugang zum Teilsystem *S* hat, sind alle Informationen über *G* nur durch lokale Messungen an *S* gegeben. Für die Messung einer Observablen, dessen Operator $\hat{O} = \hat{O}_S \otimes \mathbb{1}_E$ nur in *S* wirkt, gilt dann:

$$\langle O \rangle = \operatorname{Tr}\left[\hat{\rho} \,\hat{O}\right] = \sum_{i,j} \langle s_i | \otimes \langle e_j | \left(\hat{\rho} \,\left(\hat{O}_S \otimes \mathbb{1}_E\right)\right) | s_i \rangle \otimes | e_j \rangle = \sum_i \langle s_i | \left(\sum_j \langle e_j | \hat{\rho} | e_j \rangle\right) \hat{O}_S | s_i \rangle$$

$$= \sum_i \langle s_i | \operatorname{Tr}_E\left[\hat{\rho}\right] \,\hat{O}_S | s_i \rangle = \operatorname{Tr}_S\left[\hat{\rho}_S \,\hat{O}_S\right],$$

$$(3.1)$$

wobei die reduzierten Dichtematrix $\hat{\rho}_S = \text{Tr}_E[\hat{\rho}]$ über die Spur in *E* definiert wurde. Die reduzierte Dichtematrix entspricht formal der Dichtematrix einer gemischten Gesamtheit, d.h. $\text{Tr}_S(\hat{\rho}_S) = 1$, $\text{Tr}_S(\hat{\rho}_S^2) < 1$. Dies ist jedoch nicht damit gleichzusetzen, dass sich das System *S* in einem gemischten Zustand, d.h. in einem statistisch verteilten Ensemble von reinen Zuständen befindet, da es im Allgemeinen mit *E* verschränkt ist und somit keine Zustandsbeschreibung des Teilsystems möglich ist.

Von Neumann-Messung Die Interaktion zwischen S und E lässt sich als Von Neumann-Messung der Umgebung am System beschreiben. Im Gegensatz zur Kopenhagener Interpretation der Quantenmechanik wird der Messapparat hier als nicht-klassisch angenommen. Dieser befindet sich vor dem Kontakt mit dem System in einem "Ready"-Zustand $|\tilde{e}\rangle$. Den Systemzuständen $|s_i\rangle$ werden dann die Zustände $|e_i\rangle$ der Messapparatur, bspw. Zeigerpositionen auf einer Messskala, über

$$|s_i\rangle \otimes |\tilde{e}\rangle \xrightarrow{\text{Messung}} |s_i\rangle \otimes |e_i\rangle$$
 (3.2)

zugewiesen, wobei der Überlapp der Basiszustände $0 \le \langle e_i | e_j \rangle \le 1$ für alle $i \ne j$ ein Maß für die Auflösung des Messapparats ist. Ein vor der Messung in \mathcal{H}_S vorliegender reiner Zustand $|\psi\rangle = \sum_i \psi_i |s_i\rangle$ entwickelt sich somit zu $\sum_i \psi_i |s_i\rangle \otimes |e_i\rangle$. Die reduzierte Dichtematrix ist dann gegeben über

$$\hat{\rho}_{S} = \operatorname{Tr}_{E}\left[\hat{\rho}\right] = \sum_{i,j,k} \psi_{i}\psi_{j}^{*} |s_{i}\rangle\langle s_{j}|\langle e_{k}^{\prime}|e_{i}\rangle\langle e_{j}|e_{k}^{\prime}\rangle = \sum_{i,j} \psi_{i}\psi_{j}^{*} |s_{i}\rangle\langle s_{j}|\langle e_{j}|e_{i}\rangle .$$

$$(3.3)$$

Hierbei wurde die Spur über orthonormale Basiszustände $\{|e'_i\rangle\}$ gebildet und die damit verbundene Vollständigkeitsrelation $\sum_k |e'_k\rangle \langle e'_k| = \hat{1}$ genutzt. Die Messung der Umgebung führt also dazu, dass die Nicht-Diagonalelemente der das System beschreibenden reduzierten Dichtematrix um den Faktor $\langle e_i | e_i \rangle$ reduziert werden. Der Überlapp $\langle e_i | e_j \rangle$ ist somit ein Maß für die Stärke der Dekohärenz.

Das Messschema ist jedoch abhängig von der Wahl der Basiszustände $\{|s_i\rangle\}$: Ein in den Basiszuständen präpariertes System erfährt keine Verschränkung mir der Umgebung und ist somit robust gegen Dekohärenz. Die stabilen Zustände sind die Zustände, die die Umgebung über die Interaktion misst. Für räumliche Dekohärenz bspw., d.h. einer Messung der Trajektorien des Systems (z.B. über Streuung von Photonen oder Luftmolekülen) sind die Ortszustände $|\mathbf{x}\rangle$ des Systems die ausgezeichneten, sog. superselektierten Zustände. Ein Messapparat kann keine Superpositionen von Ortszuständen bestimmen. [11, S. 195ff]

3.2. Markovsche Umgebung

Die Markovsche Annahme unterstellt der Dynamik eines offenen Systems, dass diese nicht von der Vergangenheit des Systems abhängt [11, S.202]. Für die Beschreibung von Dekohärenz bedeutet das, dass die Umgebungsfreiheitsgrade auf der relevanten Zeitskala des Systems (oder des Experiments) keine Veränderung wahrnehmen. In zeitdiskreten Systemen, kann Dekohärenz als eine mit der Wahrscheinlichkeit $p_{\rm D}$ periodisch auftretende Messung nach dem Von Neumann-Schema dargestellt werden. Ist das System S zur Zeit t durch die reduzierte Dichtematrix $\hat{\rho}_t = \sum_{i, j} (\rho_t)_{i, j} |s_i\rangle \langle s_j|$ mit $(\rho_t)_{i, j} = \langle s_i | \hat{\rho}_t | s_j \rangle$ beschrieben, ist die Entwicklung unter Dekohärenz gegeben durch:

- Die Umgebung befindet sich in Ready-Zustand $|\tilde{e}\rangle$.
- Mit der Wahrscheinlichkeit $p_{\rm D}$ wird eine Messung durchgeführt, die Dichtematrix des Gesamtsystems erfährt die Entwicklung

$$\hat{\rho}_t \otimes |\tilde{e}\rangle \langle \tilde{e}| \quad \to \quad (1 - p_{\rm D}) \,\hat{\rho}_t \otimes |\tilde{e}\rangle \langle \tilde{e}| + p_{\rm D} \, \sum_{i,\,j} (\rho_t)_{i,\,j} \, |s_i\rangle \langle s_j| \otimes |e_i\rangle \langle e_j| \,. \tag{3.4}$$

Die neue reduzierte Dichtematrix $\hat{\rho}_{t+1}$ ist dann:

$$\hat{\rho}_{t+1} = (1 - p_{\mathrm{D}})\,\hat{\rho}_t + p_{\mathrm{D}}\,\sum_{i,\,j} (\rho_t)_{i,\,j}\,|s_i\rangle\langle s_j|\langle e_j|e_i\rangle\;. \tag{3.5}$$

• Die Umgebung E fällt bis zum Eintreten der neuen Messung wieder in den "Ready"-Zustand $|\tilde{e}\rangle$ zurück.

3.3. Dekohärenz in Quantenwalks

Für einen Quantenwalk mit neutralen Atome in optischen Gittern (vgl. 2.3) verläuft die Entwicklung des Systems zwischen den diskreten Zeitschritten näherungsweise kohärent [14]. Somit ist die Markovsche Näherung anwendbar. Eine genauere Analyse der mit diesem Modell beschreibbaren Dekohärenzquellen findet sich in [14].

Die Basiszustände des Quantensystems $|s_i\rangle$ sind hier über ein Produkt $|\mathbf{x}\rangle \otimes |s\rangle$, mit $\mathbf{x} \in \mathbb{Z}^N$ und $s \in \{\uparrow,\downarrow\}$ gegeben. Das System ist im Allgemeinen zu jedem Zeitpunkt *t* also durch eine Dichtematrix

$$\hat{\rho}_t = \sum_{\mathbf{x}, s} \sum_{\mathbf{x}', s'} (\rho_t)_{\mathbf{x}, s; \mathbf{x}', s'} |\mathbf{x}, s\rangle \langle \mathbf{x}', s'|$$
(3.6)

mit $(\rho_t)_{\mathbf{x}, s; \mathbf{x}', s'} = \langle \mathbf{x}, s | \hat{\rho}_t | \mathbf{x}', s' \rangle$ beschreibbar. Die kohärente Zeitentwicklung unter dem unitären Walk-Operator \hat{W} ist somit gegeben durch:

$$\hat{\rho}_{t+1} = \hat{W}\hat{\rho}_t \hat{W}^{\dagger} \,. \tag{3.7}$$

Im Folgenden sei zwischen Dekohärenz unterschieden, welche nur die Position bzw. nur den Spin-Freiheitsgrad des Walkers beeinflusst, da diese die superselektierten Zustände des Systems darstellen. Die Basiszustände der Umgebung seien deshalb ebenso durch ein Tensorprodukt $|\bar{\mathbf{x}}, \bar{s}\rangle = |\bar{\mathbf{x}}\rangle \otimes |\bar{s}\rangle$ mit $\bar{\mathbf{x}} \in \mathbb{Z}^N$ und $\bar{s} \in \{\uparrow,\downarrow\}$ und der Überlapp dieser durch

$$\langle \overline{\mathbf{x}}, \overline{s} | \overline{\mathbf{x}}', \overline{s}' \rangle = \begin{cases} \delta_{\overline{\mathbf{x}}, \overline{\mathbf{x}}'} &, \text{ für Räumliche Dekohärenz} \\ \delta_{\overline{s}, \overline{s}'} &, \text{ für Spin-Dekohärenz} \end{cases}$$
(3.8)

gegeben. Dies stellt sicher, dass die Kohärenz des Spin-Freiheitsgrads im Fall räumlicher Dekohärenz erhalten bleibt und anders herum. Mit (3.5) ergibt sich die Zeitentwicklung unter räumlicher Dekohärenz zu

$$\hat{\rho}_t \to (1 - p_{\rm S})\,\hat{\rho}_t + p_{\rm S}\,\sum_{\mathbf{x},\,s,\,s'}(\rho_t)_{\mathbf{x},\,s,\,\mathbf{x},\,s'}\,\delta_{\mathbf{x},\mathbf{x}'}\,\left|\mathbf{x},s\right\rangle\langle\mathbf{x}',s'\right| = (1 - p_{\rm S})\,\hat{\rho}_t + p_{\rm S}\,\sum_{\mathbf{x}}\hat{\mathbb{P}}_{\mathbf{x}}\hat{\rho}_t\,\hat{\mathbb{P}}_{\mathbf{x}}^{\dagger} = \hat{\mathfrak{D}}_{\rm S}\,\hat{\rho}_t\,,\,\,(3.9)$$

wobei durch $\hat{\mathfrak{D}}_{S}$ ein Operator für die Entwicklung unter räumlicher Dekohärenz definiert ist und $p_{\rm D} = p_{\rm S}$ als Dekohärenzrate für ebendiese eingeführt wurde. Die $\hat{\mathbb{P}}_{\mathbf{x}}$ sind die Projektoren auf die räumlichen Freiheitsgrade des Walker $\hat{\mathbb{P}}_{\mathbf{x}} = \sum_{s} |\mathbf{x}, s\rangle \langle \mathbf{x}, s|$ und übernehmen somit die Rolle der Delta-Distribution $\delta_{\mathbf{x},\mathbf{x}'}$. Für reine Spin-Dekohärenz ergibt sich mit $p_{\rm D} = p_{\rm C}$ und $\hat{\mathbb{P}}_{s} = \sum_{\mathbf{x}} |\mathbf{x}, s\rangle \langle \mathbf{x}, s|$ analog:

$$\hat{\rho}_t \to (1 - p_{\rm C})\,\hat{\rho}_t + p_{\rm C}\,\sum_s \hat{\mathbb{P}}_s \hat{\rho}_t \hat{\mathbb{P}}_s^\dagger = \hat{\mathfrak{D}}_{\rm C}\,\hat{\rho}_t\,. \tag{3.10}$$

Zusammenfassend lässt sich die gesamte Zeitentwicklung des Quantenwalks unter Dekohärenz somit als Anwendung eines Operators $\hat{\mathscr{L}}$ schreiben, wobei

$$\hat{\rho}_t \to \hat{\rho}_{t+1} = \hat{\mathscr{L}} \ \hat{\rho}_t = \underbrace{(1-p_{\rm D}) \ \hat{W} \ \hat{\rho}_t \ \hat{W}^{\dagger}}_{\text{kohärente Entwicklung}} + \underbrace{p_{\rm D} \sum_i \hat{\mathbb{P}}_i \ \hat{W} \ \hat{\rho}_t \ \hat{W}^{\dagger} \ \hat{\mathbb{P}}_i^{\dagger}}_{\text{Dekohärenz}}$$
(3.11)

mit $i = \mathbf{x}$ und $p_D = p_S$ im Fall räumlicher Dekohärenz und i = s und $p_D = p_C$ im Fall von reiner Spin-Dekohärenz (vgl. auch [14]).

Abb. 3.1 zeigt das Verhalten eines 1D-Hadamard-Walks für verschieden starke Dekohärenzraten p_D . Für $p_D = 1$ geht die Wahrscheinlichkeitsverteilung des Quantenwalks in die des klassischen Random-Walks über. Kleine Raten führen im Fall reiner Spin-Dekohärenz zu einem zentralen Peak, welcher mit steigendem p_C wächst. Die charakteristische Form der dezentralen Peaks hält der Walk hier relativ lange bei. Räumliche Dekohärenz verursacht einen flacheren und breiteren Anstieg, der eine starke Reduktion des zentralen und der dezentralen Peaks verursacht. Ebenso wie Spin-Dekohärenz führt sie zu einer Population der zentralen Gitterplätze.

Messungen im Experiment zeigen, dass die Hauptursache für Dekohärenz im Quantenwalk-System mit neutralen Atomen in der Dephasierung des Spin-Freiheitsgrads liegt. Eine Anpassung des Modells (3.10) an die Messdaten der räumlichen Aufenthaltswahrscheinlichkeit im 1D-Experiment liefert eine gute Übereinstimmung mit einer Dekohärenzrate um die $p_{\rm C} \approx 5\%$ [14]. Alberti u.a. geben an, dass Spin-Dekohärenz die dominierende Dekohärenzquelle im Quantenwalk-Experiment ist. Aus diesem Grund liegt der weitere Fokus besonders auf der Analyse der Spin-Dekohärenz.



Abb. 3.1: Aufenthaltswahrscheinlichkeit eines 1D-Hadamard-Walks (blau) für einen Walker mit symmetrischem Anfangszustand $|0\rangle \otimes (1/\sqrt{2} |\uparrow\rangle + i/\sqrt{2} |\downarrow\rangle)$ nach je 50 Schritten Entwicklung unter reiner Spin-Dekohärenz (links) und unter räumlicher Dekohärenz (rechts). Die Dekohärenzraten p_D sind angegeben. Nur gerade Gitterplätze werden besetzt, diese sind verbunden dargestellt. Zum Vergleich ist die Aufenthaltswahrscheinlichkeit eines Randomwalks (orange) dargestellt. Für $p_D = 1$ gehen beide Aufenthaltswahrscheinlichkeiten in die des Randomwalks über. Abbildung in Anlehnung an [14, Fig. 3] reproduziert.

4. Topologie

Die Topologie ist ein Teilgebiet der Mathematik und beschäftigt sich mit der Beschreibung und Klassifizierung von Räumen und geometrischen Körpern unter dem Einfluss stetiger Verformungen. Topologie ist zunächst ein mengentheoretischer Begriff: Ein topologischer Raum ist definiert über eine Menge X, welche mit einer Topologie, einer Menge von Teilmengen von X mit bestimmten abschließenden Eigenschaften versehen ist. Zwei Räume heißen dann topologisch gleich (homöomorph), wenn sie durch eine bijektive, stetige Abbildung ineinander überführbar sind. Stetig ineinander überführbare topologische Räume können über topologische Invarianten klassifiziert werden [15]. So können bspw. Kaffebecher und Donut die selbe topologische Invariante zugeordnet werden, wohingegen der Ball topologisch verschieden ist, vgl. dazu Abb. 4.1. Die Idee der topologischen Klassifizierung ist somit sehr allgemein und auf eine Vielzahl von Systemen anwendbar.



Abb. 4.1: Die mit den dargestellten geschlossenen Flächen assoziierte topologische Invariante ist die Euler-Poincaré-Charakterstik [16, S. 556 ff], welche das Geschlecht g, also die Anzahl der Löcher bestimmt. Kaffebecher und Donut (jeweils g = 1) stellen zwei homöomorphe geometrische Körper dar, durch Anhebung des Becherbodens können diese stetig ineinander überführt werden. Der Ball (g = 0) hingegen ist nicht stetig in die beiden anderen Körper verformbar und somit topologisch ungleich.

Topologische Invarianten sind geschützt vor kontinuierlichen Störungen, d.h. den Transformationen, welche einen Homöomorphismus im betrachteten System darstellen. Werden dem System zusätzlich noch eine oder mehrere Symmetrien unterstellt, so lassen sich oft weitere topologische Invarianten definieren. Deren Invarianz ist dann jedoch nur gegeben, wenn auch die Störung die Symmetrien aufweist, unter denen die Invarianten definiert wurden.

4.1. Geschützte Randzustände

Sei das Gitter des Quantenwalks durch einen Rand in eine oder mehrere Richtungen beschränkt. Diese Grenze (engl.: Boundary) führt unter der Annahme der Lokalität des Hamiltonian zu keiner Beeinflussung der Zustände, welche hinreichend weit entfernt dieser Ränder liegen. Der vom Rand unbeeinflusste Bereich wird im Folgenden mit Bulk (engl. für Großteil) bezeichnet. Die Eigenzustände des Bulks sind ebene Wellen und somit delokalisiert. Ihre Eigenenergien formen die Bulk-Energiebänder, welche in guter Näherungen denen des unendlich ausgedehnten Systems entsprechen.

Particle-Hole-Symmetrie Alle Bestandteile des Walk-Operators (2.3), (2.5), (2.7) und (2.8) sind reellwertig. Der effektive Hamiltonian, definiert über $\hat{W} = e^{-i\hat{H}}$ ist somit symmetrisch unter der Anwendung der komplexen Konjugation \hat{K} (sog. Particle-Hole-Symmetrie, PHS) [17, S. 3]:

$$\hat{K}\,\hat{H}\,\hat{K}^{-1} = -\hat{H}\,. \tag{4.1}$$

Dies führt dazu, dass die Energie
eigenzustände in Paaren auftreten, denn für einen Eigenzustand $|\phi_n\rangle$
des effektiven Hamiltonian mit Quasienergie E_n gilt:

$$\hat{H} |\phi_n\rangle = E_n |\phi_n\rangle \quad \Rightarrow \quad \hat{H}\hat{K} |\phi_n\rangle \stackrel{(4.1)}{=} -\hat{K}\hat{H} |\phi_n\rangle = -E_n |\phi\rangle.$$
(4.2)

Somit ist $\hat{K} |\phi_n\rangle$ ebenso Eigenzustand von \hat{H} mit Energieeigenwert $-E_n$. Die beiden Energiebänder des Quantenwalks liegen also symmetrisch um E = 0, siehe Abb. 4.2a.

Die Einführung von Rändern führt zu Randzuständen, welche in der Bandlücke liegen können. Auch diese Zustände müssen in Paaren auftreten. Durch eine stetige Deformation des Energiespektrums



Abb. 4.2: Quasienergiespektrum eines eindimensionalen periodisch getriebenen Systems mit PHS. Die im unendlich ausgedehnte System (a) entstehenden Energiebänder (beige) sind auch im Bulk des Systems mit Rändern (b), (c) zu finden. Periodizität von Quasiimpuls und -energie führen in (a) zu einer Torus-Form des Energiespektrums: Der Quasiimpuls $k = \pi$ ist identisch mit $k = -\pi$, die beiden Grenzen können verbunden werden. So bildet sich ein Kreis in k-Richtung. Dies gilt analog für die Quasienergie E und $E = \pm \pi$. Im System mit Rand ist die diskrete Translationssymmetrie gebrochen und die Energie somit nicht in Abhängigkeit des Quasiimpulses darstellbar. In (b) können die Randzustände (grün) aus der Bandlücke in die Energiebänder angehoben werden. Die in (c) einzeln auftretenden Randzustände mit $E = 0, \pm \pi$ (rot, blau) erfahren topologischen Schutz, solange die PHS erhalten ist oder die Bandlücke nicht schließt.

können diese voneinander getrennt werden und mit den Energiebändern zusammenfallen. Die einzige Ausnahme bilden die Energiezustände $E = 0, \pm \pi$, denn sie erfüllen auf Grund der Periodizität der Quasienergie beide die Beziehung E = -E und müssen demnach nicht in Paaren auftreten. Eine Deformation des Energiespektrums kann ungepaarte Zustände nicht in die Bänder anheben, ohne die PHS zu verletzen oder die Bänder zu schließen (vgl. Abb. 4.2b). Diese Zustände sind somit geschützt.

4.2. Klassifizierung topologischer Phasen

Topologische Isolatoren Die Klassifizierung topologischer Isolatoren ist durch die Dimension N des Systems und dessen Symmetrien bestimmt. Topologische Isolatoren sind statische Systeme, die relevanten Symmetrien sind über das Verhalten des statischen Hamiltonians \hat{H} definiert:

Zeitumkehrinvarianz	$\hat{T}\hat{H}\hat{T}^{-1}=\hat{H},$	(4.3)
Particle-Hole-Symmetrie (PHS)	$\hat{P} \hat{H} \hat{P}^{-1} = -\hat{H},$	(4.4)
Chirale Symmetrie	$\hat{\Gamma} \hat{H} \hat{\Gamma}^{-1} = -\hat{H}$,	(4.5)

wobei von den Operatoren gefordert wird, dass \hat{T}, \hat{P} antiunitär und $\hat{\Gamma}$ unitär ist¹. Insgesamt gibt es 10 verschiedene Klassifizierungen topologischer Phasen in ein- und zweidimensionalen statischen Systemen [19]. Die Form der damit verknüpften topologischen Invarianten ist in Abb. 4.3 dargestellt.

Periodisch getriebene Systeme Auch periodisch getriebene Systeme, wie der hier behandelte Quantenwalk weisen verschiedenste topologische Klassifizierungen auf. Durch die Möglichkeit der Definition eines effektiven Hamiltonians, lassen sich viele Effekte bereits unter leichter Modifikation durch die Klassifizierungen in statischen Systemen beschreiben [20] und die Existenz topologischer Phasen in periodisch getriebenen Systemen teilweise richtig vorhersagen. Diese Beschreibung ist jedoch nicht vollständig. Viele topologische Effekte in periodisch getriebenen Systemen lassen sich erst durch die Analyse der gesamten Zeitentwicklung erklären. So ist bspw. die Existenz von Randzuständen mit Energie $E = \pm \pi$ unter Particle-Hole-Symmetrie auf Grund der Periodizität der Quasienergie einzigartig für periodisch getriebene Systeme.

¹ Ein Operator \hat{A} heißt (anti)unitär, wenn er (anti)linear und sein Inverses gleich seinem Adjungierten ist. Nach einem Theorem von Wigner sind alle Symmetrietransformationen entweder unitär oder antiunitär [18, S. 228].



Abb. 4.3: Klassifizierung topologischer Phasen in ein- und zweidimensionalen statischen, nicht-interagierenden Systemen in Anwesenheit von Zeitumkehrinvarianz, Particle-Hole-Symmetrie und chiraler Symmetrie. Für die einzelnen Fälle ist die Form der topologischen Invarianten (ℤ: ganzahlig oder ℤ₂: binär) angegeben. Die Zahlen ±1 repräsentieren das Verhalten der antiunitären Symmetrieoperatoren: Î² = ±1 bzw. P² = ±1. Das X kennzeichnet die Abwesenheit der Symmetrie. Abb. entnommen aus [19].

4.3. Erzeugung topologischer Phasenübergänge

Ein Quantenwalk-Protokoll kann sich nur in der Wahl der Münzwinkel unterscheiden, den korrespondierenden Bulks können verschiedene topologische Invarianten in Abhängigkeit dieser Münzwinkel zugeordnet werden. Teilen zwei topologisch unterschiedliche Bulks eines Quantenwalks eine gemeinsame Grenze im Raum, so bilden sich neben den Bulk-Energiebändern zusätzliche Zustände am Rand. Randzustände mit Energie $E = 0, \pm \pi$ sind topologisch geschützt, solange sie nicht in Paaren auftreten und die Bandlücke nicht schließt. Die Zahl der ungepaarten Randzustände kann aus den Eigenschaften des Bulks und den damit verknüpften topologischen Invarianten vorhergesagt werden. Sie ist unabhängig von der Form des Randes, weswegen dieser Zusammenhang zwischen ausgedehntem System und Rand *Bulk-Boundary-Correspondence* genannt wird [17, 21]. Um diese Randzustände im Experiment beobachten zu können, soll der Münzwinkel im Ort variiert werden.

Die Besetzungswahrscheinlichkeit der einzelnen Zustände eines über Rabi-Oszillation getriebenen Zweiniveausystems ist abhängig von der Pulsdauer der eingestrahlten Laserstrahlung, als auch von deren Intensität [22]. Der Münzwinkel kann also durch Beeinflussung der Lichtintensität räumlich verändert werden. Das verwendete Laserlicht wird z.B. durch eine halbtransparente Blende in der Intensität variiert und dann über ein Linsensystem auf das Gitter abgebildet (vgl. Abb. 4.1a). Beugungseffekte an der Blende und im Linsensystem beschränken jedoch die Auflösung und somit die Form des Intensitätsprofils. Die folgenden Formeln sind [23, S. 529ff] und [24, S. 43ff] entnommen.

Betrachtet sei eine zweidimensionalen Blende mit räumlich variierender Transmission. Das Intensitätsprofil in der Blende sei über eine Stufenfunktion $I_0(u, v)$ gegeben, wobei (u, v) die Koordinaten in der Blendenebene sind. Das Intensitätsprofil einer Punktquelle nach Abbildung über das Linsensystem, die sog. Punktspreizfunktion (PSF) ist im Experiment näherungsweise über ein Airy-Beugungsscheibchen gegeben:

$$PSF(X,Y) = \mathcal{N} \left(\frac{2J_1\left(\frac{\pi R}{R_A}\right)}{\frac{\pi R}{R_A}} \right)^2 \bigg|_{R=\sqrt{X^2+Y^2}} \qquad \text{mit} \qquad \mathcal{N} = \frac{\pi}{4R_A^2} \cdot 1$$
(4.6)

Die Koordinaten des Gitters (X, Y) sind mit den Gitterpositionen (x, y) über (X, Y) = a(x, y) verknüpft, wobei *a* die Gitterkonstante ist. Der Abbe-Radius $R_A = \lambda_C/(2 NA)$ ist über die Wellenlänge des einfallenden Lichts λ_C und die numerische Apertur des Linsensystems *NA* gegeben. In Abb. 4.4a sind die Airy-Beugungsscheibchen für die Parameter der beiden in Bonn existierenden Experimente aus Tab. 4.1b dargestellt.

 $[\]overline{{}^1 J_1}$ ist die sphärische Besselfunktion erster Ordnung.

Das Intensitätsprofil I(X,Y) der Blende auf dem Gitter ergibt sich nun über die Faltung

$$I(X,Y) = I_0(X,Y) * PSF(X,Y) = \int_{-\infty}^{\infty} du \int_{-\infty}^{\infty} dv \ I_0(u,v) \operatorname{PSF}(u-X,v-Y).$$
(4.7)

Das Resultat lässt sich numerisch errechnen und ist für eine eindimensionale Stufenfunktion

$$I_0(u) = \begin{cases} I_{\rm L} &, u \le 0\\ I_{\rm R} &, \text{ sonst} \end{cases}$$
(4.8)

in Abb. 4.4b zu finden.

Die Airy-Disk kann auch durch eine Gaußverteilung mit Standardabweichung $\sigma = \sqrt{2} R_A / \pi \approx 0.45 R_A$ approximiert werden. Auch hier ist das resultierende Intensitätsprofil in Abb. 4.4b zu finden. Die Abweichung ist klein, weswegen im Folgenden die PSF durch das Gaußprofil angenähert wird. Gleichung (4.7) hat dann eine einfache Lösung: Für (4.8) ergibt sich der Münzwinkel

$$\theta(x) = \theta_{\rm L} + \frac{\theta_{\rm R} - \theta_{\rm L}}{2} \left[1 + \operatorname{erf} \left(b \, x \right) \right] \qquad \text{mit} \qquad b = \frac{a}{\sqrt{2} \, \sigma} = a \, \pi \, \frac{NA}{\lambda_{\rm C}} \,, \tag{4.9}$$

wobei erf die gaußsche Fehlerfunktion und θ_L (θ_R) der der Intensität I_L (I_R) zugeordnete Münzwinkel ist. Der Münzwinkel $\theta(x, y)$ erzeugt durch eine zweidimensionale Kreisblende ergibt sich analog zu

$$\theta(x,y) = \theta_{\rm in} + \frac{\theta_{\rm out} - \theta_{\rm in}}{2} \left[1 + \operatorname{erf} \left(b \left(\sqrt{x^2 + y^2} - r_0 \right) \right) \right].$$
(4.10)

Hierbei ist der Radius $r_0 \in \mathbb{Z}$ der Projektion auf dem Gitter definiert und θ_{in} (θ_{out}) ist der Münzwinkel innerhalb (außerhalb) der auf dem Gitter erzeugten Kreisfläche.

Die Winkel-Verteilungen (4.9), (4.10) werden für die folgende Analyse geschützter Zustände an Phasenübergängen verwendet. Ein Walk mit im Ort variierenden Münzwinkeln wird dabei als inhomogen bezeichnet. Der dimensionslose Parameter b dient dabei als Maß für die Steilheit der Übergänge und ist proportional zur numerischen Apertur. Für eine perfekte numerischen Apertur (NA = 1, in Vakuum) ist das im 2D-Experiment maximal erreichbare b = 2.2.

h



	sanft (1D-Experiment)	steil (2D-Experiment)	
λ_C	894 nm		
NA	0.22	0.9	
a	433 nm	612 nm	
b	0.33	1.94	

Tab. 4.1: (a) Aufbau zur Erzeugung top. Phasenübergänge. (b) Beugungsbestimmende Parameter der beiden in Bonn beheimateten Quantenwalk-Experimente mit neutralen Atomen auf optischen Gittern. $\lambda_{\rm C}$ = geplante Wellenlänge des Lasers für die Rabi-Oszillation (Münzoperation). *NA* = numerische Apertur. *a* = Gitterkonstante des optischen Gitters. Der Beugungsparameter *b* berechnet nach (4.9).



Abb. 4.4: (a) Punktspreizfunktion und (b) daraus resultierendes Intensitätsprofile für die Abbildung einer 1D-Stufenfunktion ausgewertet an den Punkten des Gitters $X = x a, x \in \mathbb{Z}$. Die Parameter entsprechen den Daten aus Tab. 4.1b, wobei der sanfte Übergang (b = 0.33) gelb und der steile Übergang (b = 1.94) blau dargestellt ist. Die Punkte entsprechen der Faltung mit der in (a) dargestellten Airy-Disk PSF, die durchgezogenen Linien einer PSF mit Gaußprofil. Die Abweichung ist nahezu nicht erkennbar.

5. Dekohärenzeffekte in topologischen Phasen in 1D

Im Folgenden wird die topologische Klassifizierung des 1D-Split-Step-Protokolls unter einer chiralen Symmetrie vorgestellt und das Verhalten der dort existierenden topologisch geschützten Zustände unter Dekohärenz untersucht. Die Existenz nicht-trivialer topologischer Phasen im 1D-Standard-Protokoll wurde zuerst verneint [25], doch auch hier führt die PHS zu einer nicht-trivialen topologischen Klassifizierung [17]. Da hier jedoch nur ein Parameter, der Münzwinkel θ die Form des Walk-Operators und somit die topologische Struktur beeinflussen kann, ist Zahl der verschiedenen Phasen stärker beschränkt als im Split-Step-Protokoll mit zwei verschiedenen Münzwinkeln. In der Tat realisiert das Standard-Protokoll lediglich zwei unterschiedliche topologische Phasen [17], wohingegen im Split-Step-Walk eine $\mathbb{Z}_2 \times \mathbb{Z}_2$ -Invariante definiert werden kann. Auf Grund der damit verbundenen Vielfalt möglicher Phasenübergänge betrachtet diese Arbeit letzteres Protokoll.

5.1. Topologische Klassifizierung

Eine grobe Bestimmung der Phasengrenzen kann über die Berechnung der Münzwinkel erfolgen, für welche die Bandlücke des Systems schließt. Inwiefern das System jedoch nicht-triviale topologische Phasen ausbildet, d.h. verschiedenen Münzwinkeln unterschiedliche topologische Invarianten zugeordnet werden können, entscheidet der Bulk-Boundary-Zusammenhang.

Chirale Symmetrie Für die Definition einer chiralen Symmetrie für periodisch getriebene Systeme ist es nötig die gesamte Zeitentwicklung des Walks zu analysieren. Auf Grund der Periodizität der Zeitentwicklung kann ein Walk-Operator $\hat{W}[\tau]$ für beliebige Zeitpunkte $0 \le \tau \le T$ definiert werden, sodass dieser die Zeitentwicklung für alle $\tau + t$, $t \in \mathbb{N}$ beschreibt:

$$\hat{W}[\tau] = \hat{\mathcal{T}} e^{-i \int_{\tau}^{\tau+1} d\tau' \hat{H}(\tau')}, \qquad (5.1)$$

wobei $\hat{\mathcal{T}}$ die folgenden Terme nach den Zeitpunkten sortiert und $\hat{H}(\tau')$ der zeitabhängige Hamiltonian des Systems ist. [26, S. 1]

Ein Quantenwalk-Protokoll ist chiral symmetrisch, wenn es einen Zeitpunkt τ gibt, für den der dem Walk-Operator $\hat{W}[\tau] = e^{-i\hat{H}[\tau]}$ zugeordnete effektive Hamiltonian $\hat{H}[\tau]$ eine chirale Symmetrie nach (4.5) aufweist [27, S. 2], d.h. $\hat{\Gamma} \hat{H}[\tau] \hat{\Gamma}^{-1} = -\hat{H}[\tau]$, wobei $\hat{\Gamma}$ unitär sein muss. Für $\hat{W}[\tau]$ folgt dann

$$\hat{\Gamma} \, \hat{W}[\tau] \, \hat{\Gamma}^{-1} = \hat{W}^{-1}[\tau] = \hat{W}^{\dagger}[\tau] \,. \tag{5.2}$$

Die Existenz dieser Symmetrie im 1D-Split-Step-Protokoll soll nun bewiesen werden.

Durch die Verschiebung des Startpunktes τ sei ein neuer Walk-Operator \hat{W}' definiert:

Hierbei wurde ausgenutzt, dass $\hat{C}(\theta_A + \theta_B) = \hat{C}(\theta_A) \hat{C}(\theta_B)$. Die einzelnen Bestandteile des 1D-Split-Step-Walks, definiert in (2.10) erfüllen die chirale Symmetrie mit $\hat{\Gamma} = \hat{\sigma}_1$:¹

$$\hat{\sigma}_1 \, \hat{C}(\theta) \, \hat{\sigma}_1 = \hat{C}(-\theta) = \hat{C}(\theta)^{\dagger} \,, \qquad \hat{\sigma}_1 \, \hat{S}^{\downarrow} \, \hat{\sigma}_1 = (\hat{S}^{\uparrow})^{\dagger} \,, \qquad \hat{\sigma}_1 \, \hat{S}^{\uparrow} \, \hat{\sigma}_1 = (\hat{S}^{\downarrow})^{\dagger} \,. \tag{5.4}$$

Somit erfüllt auch \hat{W}' die chirale Symmetrie, denn mit $\hat{\sigma}_1^2 = 1$ gilt:

$$\hat{\sigma}_{1} \hat{W}' \hat{\sigma}_{1} = \hat{\sigma}_{1} \hat{C}(\theta_{1}/2) \hat{S}^{\downarrow} \hat{C}(\theta_{2}) \hat{S}^{\uparrow} \hat{C}(\theta_{1}/2) \hat{\sigma}_{1}$$

$$= \hat{\sigma}_{1} \hat{C}(\theta_{1}/2) \hat{\sigma}_{1} \hat{\sigma}_{1} \hat{S}^{\downarrow} \hat{\sigma}_{1} \hat{\sigma}_{1} \hat{C}(\theta_{2}) \hat{\sigma}_{1} \hat{\sigma}_{1} \hat{S}^{\uparrow} \hat{\sigma}_{1} \hat{\sigma}_{1} \hat{C}(\theta_{1}/2) \hat{\sigma}_{1}$$

$$= \hat{C}(\theta_{1}/2)^{\dagger} (\hat{S}^{\uparrow})^{\dagger} \hat{C}(\theta_{2})^{\dagger} (\hat{S}^{\downarrow})^{\dagger} \hat{C}(\theta_{1}/2)^{\dagger} = \hat{W}'^{\dagger}.$$
(5.5)

Topologische Invariante – Die Windungszahl Mit $\hat{F} = \hat{C}(\theta_2/2) \hat{S}^{\uparrow} \hat{C}(\theta_1/2)$ und (5.4) lässt sich der zeitverschobene Walk-Operator \hat{W}' des 1D-Split-Step-Protokolls in zwei Teile zerlegen [26, S. 2]:

$$\hat{W}' = \underbrace{\hat{C}(\theta_1/2)\,\hat{S}^{\downarrow}\,\hat{C}(\theta_2/2)}_{=\,\hat{\sigma}_1\,\hat{F}^{\dagger}\,\hat{\sigma}_1} \qquad \underbrace{\hat{C}(\theta_2/2)\,\hat{S}^{\uparrow}\,\hat{C}(\theta_1/2)}_{\hat{F}} \,. \tag{5.6}$$

In einem unendlich ausgedehnten, translationsinvarianten System ist \hat{F} diagonal im Quasi-Impulsraum, d.h. $\hat{F} = \int dk |k\rangle \langle k| \otimes \hat{F}(k)$. Der Operator der chiralen Symmetrietransformation $\hat{\Gamma}$ kann nun über $\hat{D} = (\hat{\sigma}_1 + \hat{\sigma}_3) / \sqrt{2}$ diagonalisiert werden: $\hat{D}^{-1} \hat{\Gamma} \hat{D} = \hat{\sigma}_3$. Der transformierte Walk-Operator $\hat{D}^{-1} \hat{F} \hat{D}$ behält beim Basiswechsel seine Diagonalgestalt, da \hat{D} nur im Spin-Raum wirkt. Die Matrixelemente des transformierten Operators seien mit $f_{s,s'}(k)$ bezeichnet:

$$\hat{D}^{-1}\hat{F}(k)\hat{D} = \sum_{s, s' \in \{\uparrow, \downarrow\}} f_{s, s'}(k) |s\rangle \langle s'| .$$
(5.7)

Wie Asbóth u.a. [26, S. 2-3] zeigen sind die topologischen Invarianten dann durch ein Paar von ganzen Zahlen, den "Windungszahlen" der Nebendiagonalelemente von $\hat{D}^{-1} \hat{F}(k) \hat{D}$ gegeben

$$\{\nu_0, \nu_\pi\} = \left\{\nu\left[f_{\uparrow,\downarrow}\right], \nu\left[f_{\downarrow,\uparrow}\right]\right\}, \qquad (5.8)$$

$$\nu[u] = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\pi}^{\pi} dk \frac{d}{dk} \log u(k).$$
(5.9)

Die Differenz der Windungszahl v_{ϵ} zweier Bulks gibt an, wie viele ungepaarte Randzustände bei der Energie $\epsilon = 0, \pi$ auftreten. Dies ist das Bulk-Boundary-Prinzip des 1D-Split-Step-Protokolls.

Die Windungszahlen können sich nur ändern, wenn der Bulk die Bandlücke schließt. Durch numerische Berechnung der Windungszahl für ausgewählte Winkelpaare, sowie der Münzwinkel für denen die Quasienergie aus (2.22) die Werte 0, $\pm \pi$ annimmt, lässt sich somit auf das gesamte Phasendiagramm schließen. Dieses ist in Abb. 5.1 dargestellt. Ein Winkelbereich in dem die Bandlücke nicht schließt muss immer der selben Phase angehören. Dadurch dass ein Spinor bei einer Münzrotation um 2π eine Phase von -1 aufsammelt, ist der Münzoperator $\hat{C}(\theta)$ und somit auch das Phasendiagramm 4π -periodisch in beiden Münzwinkeln.

¹ Dies lässt sich mit $\hat{\sigma}_1 = |\uparrow\rangle\langle\downarrow| + |\downarrow\rangle\langle\uparrow| = (\hat{\sigma}_1)^{-1}$ leicht überprüfen.



Abb. 5.1: Phasendiagramm des 1D-Split-Step-Protokolls. Dem Walk kann eine $\mathbb{Z}_2 \times \mathbb{Z}_2$ -Invariante (ν_0, ν_{π}) zugeordnet werden (farbige Bereiche). Zwischen verschiedenen Phasen schließt die Bandlücke bei Energie 0 (gestrichelt) oder $\pm \pi$ (durchgezogen). Die Differenz der ν_{ϵ} zweier räumlich getrennter Phasen gibt die Zahl der bei der Energie ϵ auftretenden Randzustände an. Die in Abb. 5.2 realisierten Phasenübergang sind eingezeichnet (gelb, grün). Der Stern symbolisiert die Existenz geschützter Randzustände.

Das 1D-Split-Step-Protokoll kann im Vergleich zu allgemeinen chiral symmetrischen, periodisch getriebenen Systemen nur eine $\mathbb{Z}_2 \times \mathbb{Z}_2$ -Invariante realisieren. Diese Einschränkung begründet sich in der Particle-Hole-Symmetrie. Wie Asbóth u.a. [17] zeigen, stimmt die von Jiang u.a. [28] eingeführte topologische Invariante für periodisch getriebene Systeme mit PHS mit dem hier definierten Windungszahl-Paar (v_0, v_π) überein. Frühere Analysen des 1D-Split-Step-Protokolls durch Kitagawa u.a. [25] führen die topologische Klassifizierung auf eine winkelabhängige, d.h. im inhomogenen Walk lokale chirale Symmetrie zurück. Asbóth [17] argumentiert, dass diese Symmetrie aufgrund ihrer Lokalität keine Zustände schützen kann. Es wird auch lediglich eine \mathbb{Z}_2 -Invariante vorhergesagt, die Zahl der verschiedenen topologischen Phasen ist somit kleiner. So sind bspw. die in Abb. 5.1 gelb verbunden dargestellten Punkte im Phasendiagramm nach Kitagawa topologisch gleich, ein geschützter Randzustand zwischen den Bereichen kann somit nicht vorhergesagt werden.

Nachweis geschützter Zustände Abb. 5.2a zeigt die Entwicklung des 1D-Split-Step-Walks mit inhomogenen Münzwinkeln. Der Winkel $\theta_1 = -\pi/2$ wird hierbei konstant gehalten, θ_2 variiert kontinuierlich von $3\pi/4$ links bis $-3\pi/4$ im rechten Bereich des Gitters. Dabei wird über (4.9) mit b = 1.9 ein relativ steiler Phasenübergang eingestellt, der Münzwinkel ändert sich über 2 bis 3 Gitterplätze. Die beiden Winkelpaare entsprechen den beiden gelb eingezeichneten Punkten in Abb. 5.1. Der Walk realisiert somit zwei verschiedene topologische Phasen mit $(v_0, v_\pi) = (0, 1)$ für $x \gg 0$ und $(v_0, v_\pi) = (1, 0)$ für $x \ll 0$. Erwartet werden also zwei topologisch geschützte Zustände, einer bei Energie 0 und einer bei Energie π . Dies bestätigt die numerische Berechnung der Eigenzustände über Diagonalisierung des inhomogenen Walk-Operators. Diese sind um die Phasengrenze bei x = 0 herum lokalisiert (vgl. Abb. 5.2c) und werden bei nicht verschwindendem Überlapp mit dem Anfangszustand des Walks bevölkert. Der Walker wird dafür bei $x_0 = 0$ initialisiert. Der topologische Schutz führt auch bei einer großen Schrittzahl zu einer starken Besetzung dieser Zustände. In Abb. 5.2b weisen die beiden Bulks des Systems wieder verschiedene Münzwinkel auf ($\theta_1 = -\pi/2, \ \theta_2 = 5\pi/4$ für $x \ll 0$ und $\theta_2 = -5\pi/4$ für $x \gg 0$), jedoch unterscheiden sich hier die beiden Phasen nicht. Die gemeinsame topologische Invariante ist $(v_0, v_\pi) = (1, 1)$ (vgl. grüne Punkte in Abb. 5.1). Somit existiert kein topologisch geschützter Randzustand und der Walk kann sich ballistisch ausbreiten.

Wenn die Verbindung beider Phasen die Bandlücke schließt, können sich im Allgemeinen auch Randzustände mit Energie 0, π bilden, selbst wenn die beiden Phasen topologisch gleich sind. Diese Zustände treten aufgrund des Phasendiagramms jedoch pro Energie immer paarweise auf. Eine kontinuierliche Deformation des Energiespektrums kann diese also in die Bulk-Energiebänder anheben, ohne die PHS zu verletzen.

Das Quantenwalkprotokoll stellt allgemein keine derartige Deformation dar, weswegen auch diese Zustände in der Simulation teilweise als geschützt erscheinen. Deren Existenz kann durch die Form des Phasenübergangs kontrolliert werden. So weist der in Abb. 5.2b dargestellte Walk für b = 0.2, d.h. einer Münzwinkeländerung über etwa 20 Gitterplätze ebenso paarweise auftretende geschützte Zustände auf. Ist der Übergang steiler, kommen nur wenige bis gar keine anderen Winkel aus dem Intervall $\theta_2 \in [-7\pi/4, 7\pi/4]$ im Gitter vor, der Übergang ist fast diskret. Die beiden Bulks können aufgrund der 4π -Periodizität des Münzwinkels somit im Phasendiagramm effektiv auch über das Intervall $[7\pi/4, -7\pi/4]$ (in Abb. 5.1 über die Grenzen des dargestellten Bereichs hinaus) verbunden werden, hier schließt die Bandlücke beim Übergang nicht. Da der Schutz jedoch nicht durch die Topologie gesichert ist, wird auf die Existenz dieser Zustände im Folgenden nicht weiter eingegangen.



Abb. 5.2: (a), (b) Zeitentwicklung der Aufenthaltswahrscheinlichkeit eines 1D-Split-Step-Walks mit inhomogenem Münzwinkel nach (4.9) mit Anfangszustand |0⟩ ⊗ |↑⟩. Die Wahrscheinlichkeit ist farbkodiert, wobei schwarz (weiß) einer Wahrscheinlichkeit von 1 (0) entspricht. Die Zuordnung ist angegeben. Der Münzwinkel θ₁ ist konstant -π/2, für die Variation von θ₂ wird b = 1.9 gewählt. In (a) ist θ₂ = 3π/4 für x ≪ 0 und θ₂ = -3π/4 für x ≫ 0. Die beiden Bereiche des Walks realisieren topologisch verschiedene Phasen. Ein Randzustand wird populiert und ist geschützt. Die zugehörigen Münzwinkel sowie die Eigenzustände des Systems mit Energie 0, ±π sind in (c) dargestellt. Letztere sind um x = 0 herum lokalisiert. In (b) sind die beiden Phasen topologisch gleich, ein Randzustand mit Energie 0, ±π existiert hier nicht (d). Der Walk breitet sich ungestört ballistisch nach außen aus.



Abb. 5.3: (a) Maximale Gruppengeschwindigkeit v_{max} des homogenen, translationsinvarianten 1D-Split-Step-Walks numerisch für verschiedene Münzwinkelkombinationen berechnet und linear approximiert dargestellt. Sie entspricht der Ausbreitungsgeschwindigkeit der dezentralen Peaks des Walks und beträgt maximal 1 Gitterplatz/Schritt. (b) Standardabweichung des Randzustandes im 1D-Split-Step-Walks mit θ₁ = -π/2, θ₂ = π/2 + Δθ für x ≫ 0 und θ₂ = π/2 - Δθ für x ≪ 0 in Abhängigkeit von b, Δθ.

5.2. Form und Entwicklung der Randzustände

Diffusives Verhalten unter Dekohärenz Betrachtet sei die Zeitentwicklung der Aufenthaltswahrscheinlichkeit eines inhomogenen Walks mit $\theta_2 = 3\pi/4$ für $x \ll 0$ und $\theta_2 = \pi/4$ für $x \gg 0$ mit einem steilen Übergang (b = 1.9). θ_1 sei wieder konstant $-\pi/2$. Der Walk realisiert somit zwei unterschiedliche topologische Phasen mit einem geschützten Randzustand bei Energie 0. Der Randzustand wird numerisch berechnet und als Anfangszustand im Gitter präpariert. Abb. 5.4a zeigt die resultierende Entwicklung unter reiner Spin-Dekohärenz mit einer Dekohärenzrate von $p_{\rm C} = 0.1$. In 5.4b ist die Form des Randzustandes nach je 50 Schritten Entwicklung für verschiedene Dekohärenzraten dargestellt. Abb.5.4 zeigt den gleichen Walk unter dem Einfluss reiner räumlicher Dekohärenz.

Der Eigenzustand wird mit wachsendem p_D immer delokalisierter. Reine Spin-Dekohärenz zeichnet sich wie im homogenen Walk (vgl. Abb. 3.1) durch den Erhalt eines zentralen Maximums aus. Räumliche Dekohärenz führt deutlich schneller zu einer Abflachung und Verbreiterung des gesamten Zustands. Für sehr hohe Dekohärenzraten gleichen sich beide Dekohärenzarten wieder näherungsweise an, nach großer Schrittzahl oder hoher Dekohärenzrate wird der Anfangszustand wieder stärker populiert. Dies stimmt mit den Beobachtungen in Abb. 3.1 überein.

Kontrast zum Bulk Die Asymmetrie in der Stärke der Delokalisierung ist im Unterschied der beiden Bulks begründet. Unterschiedliche Energiebänder links und rechts des Phasenübergangs führen über die Dispersionsrelation zu verschiedenen Gruppengeschwindigkeiten $v(k) = \partial E/\partial k$ mit denen sich die ungeschützten Anteile des Systems ausbreiten. Im Experiment kann der Anfangszustand nicht im reinen Randzustand des Systems präpariert werden, stattdessen wird der Walker zu Beginn bspw. auf einem einzelnen Gitterplatz lokalisiert. Wie in Abb. 5.2a dargestellt, existiert dann ein großer Teil des Systems, der den Randzustand nicht bevölkert und sich ballistisch in die beiden Bulks ausbreitet. Das maximale $v(k) = v_{max}$ bestimmt gerade die Ausbreitungsgeschwindigkeit der beiden dezentralen Peaks [29, S. 11]. Um den Randzustand vom restlichen System gut unterscheiden zu können ist es somit sinnvoll Bulks mit hohen Gruppengeschwindigkeiten zu wählen, sodass sich bereits nach wenigen Schritten ein guter Konstrast zwischen Bulk und Rand bildet. Die dafür geeigneten Münzwinkel können Abb. 5.3a entnommen werden. Wie Abb. 5.4a und 5.4c jedoch zeigen, beeinflusst die Ausbreitungsgeschwindigkeit im Bulk auch die Diffusion des Randzustandes. Unter Spin-Dekohärenz mit kleinen Dekohärenzraten ist dieser Effekt jedoch vernachlässigbar klein, das zentrale Maximum des Randzustandes ist auch nach vielen Schritten Entwicklung gut sichtbar.



Abb. 5.4: Zeitentwicklung der Aufenthaltswahrscheinlichkeit eines 1D-Split-Step-Walks mit inhomogenem Münzwinkel unter Dekohärenz. Die Münzwinkel sind θ₂ = 3π/4 für x ≪ 0 und θ₂ = π/4 für x ≫ 0 mit b = 1.9. θ₁ = -π/2. (a) Entwicklung des Randzustands für reine Spin-Dekohärenz mit p_C = 0.1. (c) Entwicklung des Randzustands für reine Spin-Dekohärenz mit p_C = 0.1. (b), (d) Form des Randzustands für verschiedene Dekohärenzraten nach je 50 Schritten Walk-Entwicklung.

Breite des Randzustandes Die ungefähre Breite des Randzustandes kann näherungsweise über die Anpassung einer Gaußverteilung und Extraktion der Standardabweichung bestimmt werden. Diese ist maßgeblich durch die Form der Phasengrenze bestimmt. Es sei nun $\theta_1 = \pi/2$ und $\theta_2 = \pi/2 + \Delta\theta$ für $x \gg 0$, $\theta_2 = \pi/2 - \Delta\theta$ für $x \ll 0$, wobei $\Delta\theta > 0$ gefordert wird. Die Steilheit des Phasenübergangs wird über *b* variiert. $\Delta\theta$ wird so gewählt, dass die Phasen der beiden Bulks konstant bleiben. Die Randzustände werden numerisch berechnet, deren Breite ist in Abb. 5.3b in Abhängigkeit von *b* und $\Delta\theta$ aufgetragen.

Die Standardabweichung beträgt in dem dargestellten Bereich zwischen 0.5 und 2.0 Gitterplätzen. Für große $b \gtrsim 1.5$ geht die Standardabweichung in Sättigung, eine steilere Phasengrenze verkleinert den Randzustand nicht. Im Bereich der Sättigung zeigt sich ein lokales Minimum bei $\Delta \theta = \pi/2$. Dies ist jedoch ein trivialer Walk: Im Bulk mit $\theta_2 = \pi/2 + \Delta \theta = \pi$ ist die Gruppengeschwindigkeit v(k) = 0 für alle k (die Quasienergie bildet flache Bänder, vgl. Abb. 2.3). Für kleinere b verschiebt sich dieses Minimum zu größeren Winkeldifferenzen. In diesem Bereich ist die Abhängigkeit von $\Delta \theta$ auch deutlich stärker als im Bereich großer b.

5.3. Population der Randzustände unter Spin-Dekohärenz

Sei $|\phi_0\rangle = \sum_{x,s} \phi_{x,s} |x\rangle \otimes |s\rangle$, $\phi_{x,s} \in \mathbb{C}$ ein (topologisch geschützter) Eigenzustand des Walk-Operators \hat{W} mit Energie ϵ . Die zugehörige Dichtematrix $\hat{\rho}_0 = |\phi_0\rangle \langle \phi_0|$ ist somit invariant unter der Anwendung des Walk-Operators:

$$\hat{W}\,\hat{\rho}_0\,\hat{W}^{\dagger} = \hat{W}\,\left|\phi_0\right\rangle\left\langle\phi_0\right|\,\hat{W}^{\dagger} = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\,\epsilon}\,\left|\phi_0\right\rangle\left\langle\phi_0\right|\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\,\epsilon} = \left|\phi_0\right\rangle\left\langle\phi_0\right| = \hat{\rho}_0\tag{5.10}$$

Unter Spin-Dekohärenz erfährt das System die Entwicklung (3.11) mit i = s und $p_D = p_C$. Nach einem Schritt ist das System somit durch die reduzierte Dichtematrix $\hat{\rho}_1$ beschrieben:

$$\hat{\rho}_{1} = (1 - p_{\rm C}) \,\hat{W} \,\hat{\rho}_{0} \,\hat{W}^{\dagger} + p_{\rm C} \,\sum_{s} \hat{\mathbb{P}}_{s} \,\hat{W} \,\hat{\rho}_{0} \,\hat{W}^{\dagger} \,\hat{\mathbb{P}}_{s}^{\dagger} = (1 - p_{\rm C}) \,\hat{\rho}_{0} + p_{\rm C} \,\sum_{s} \hat{\mathbb{P}}_{s} \,\hat{\rho}_{0} \,\hat{\mathbb{P}}_{s}^{\dagger} \,. \tag{5.11}$$

Die Wahrscheinlichkeit Π_1 , dass System dann wieder im Zustand $|\phi_0\rangle$ zu finden, berechnet sich zu

$$\Pi_{1} = \operatorname{Tr}\left[|\phi_{0}\rangle\langle\phi_{0}|\ \hat{\rho}_{1}\right] = (1 - p_{C})\operatorname{Tr}\left[(\hat{\rho}_{0})^{2}\right] + p_{C}\sum_{s}\operatorname{Tr}\left[\hat{\rho}_{0}\ \hat{\mathbb{P}}_{s}\ \hat{\rho}_{0}\ \hat{\mathbb{P}}_{s}^{\dagger}\right]$$

$$= (1 - p_{C}) + p_{C}\sum_{s}\sum_{\tilde{x},\,\tilde{s}}\langle\tilde{x},\,\tilde{s}|\left[\hat{\rho}_{0}\left(\sum_{x}|x,\,s\rangle\langle x,\,s|\right)\hat{\rho}_{0}\left(\sum_{x'}|x',\,s\rangle\langle x',\,s|\right)\right]|\tilde{x},\,\tilde{s}\rangle$$

$$= (1 - p_{C}) + p_{C}\sum_{s}\sum_{x,\,x'}\langle x',\,s|\hat{\rho}_{0}|x,\,s\rangle\langle x,\,s|\hat{\rho}_{0}|x',\,s\rangle$$

$$= (1 - p_{C}) + p_{C}\sum_{s}\sum_{x,\,x'}|\langle x,\,s|\hat{\rho}_{0}|x',\,s\rangle|^{2}, \qquad (5.12)$$

wobei Tr $[\hat{\rho}^2] = 1$ für jede Dichtematrix $\hat{\rho}$ einer reinen Gesamtheit und die Orthogonalität der $|x, s\rangle$ ausgenutzt wurde. Somit gilt:

$$\hat{\rho}_{1} = \Pi_{1} \,\hat{\rho}_{0} + (1 - \Pi_{1}) \,\hat{\tilde{\rho}}_{1} = (1 - \gamma) \,\hat{\rho}_{0} + \gamma \,\hat{\tilde{\rho}}_{1} \quad \text{mit} \quad \text{Tr} \left[|\phi_{0}\rangle \langle \phi_{0}| \,\,\hat{\tilde{\rho}}_{1} \right] = 0 \,, \quad \gamma = (1 - \Pi_{1}) \,, \tag{5.13}$$

d.h. im Ensemble $\hat{\rho}_1$ kommt der Zustand $|\phi_0\rangle$ nicht vor. Unter der Annahme, dass die Zeitentwicklung von $\hat{\rho}_1$ den Zustand $|\phi_0\rangle$ nicht erneut populiert, d.h. Tr $\left[|\phi_0\rangle\langle\phi_0| \hat{\mathcal{L}}^t \hat{\rho}_1\right] = 0$ für alle Zeiten *t*, gilt für die Wahrscheinlichkeit das System zum Zeitpunkt *t* im Ausgangszustand $|\phi_0\rangle$ zu finden:

$$\Pi_t = \operatorname{Tr}\left[|\phi_0\rangle\langle\phi_0|\;\hat{\mathscr{L}}^t\hat{\rho}_0\right] = \operatorname{Tr}\left[\hat{\rho}_0\,\hat{\mathscr{L}}^{t-1}\hat{\rho}_1\right] = (1-\gamma)^t \operatorname{Tr}\left[\hat{\rho}_0^2\right]$$
(5.14)

Somit ist:

$$\Pi_{t} = (1 - \gamma)^{t} \qquad \text{mit} \qquad \gamma = p_{\rm C} \left(1 - \sum_{s} \sum_{x, x'} |\langle x, s | \hat{\rho}_{0} | x', s \rangle|^{2} \right) = p_{\rm C} \, \kappa \,. \tag{5.15}$$

Variation der Dekohärenzrate Ein Walk mit inhomogenem Münzwinkel unter Spin-Dekohärenz wird simuliert. Die Münzwinkel seien wieder $\theta_2 = 3\pi/4$ für $x \ll 0$ und $\theta_2 = \pi/4$ für $x \gg 0$ mit b = 1.9, $\theta_1 - \pi/2$. Nach jedem Schritt des Walks wird Π_t über die Spur Tr $[\hat{\rho}_0 \hat{\rho}_t]$ berechnet. Das Ergebnis ist in Abb. 5.5a dargestellt. An die numerisch berechneten Daten wird das Modell (5.15) nach der Methode der kleinsten Quadrate angepasst. Für wenige Schritte $t \leq 10 / \sqrt{p_C}$ stimmen Theorie und Simulation gut überein, es zeigt sich in der logarithmischen Darstellung ein näherungsweise lineares Verhalten. Im Falle großer Schrittzahl bzw. starker Dekohärenz ist die getroffene Annahme, dass der Randzustand durch den Bulk nicht mehr populiert wird nicht mehr gesichert. Ab $t \approx 10 / \sqrt{p_C}$ nimmt die Wahrscheinlichkeit nicht mehr exponentiell ab, tendiert aber weiterhin gegen Null. Der Dekohärenz renzprozess sorgt zu einem Anstieg der Aufenthaltswahrscheinlichkeit um den Ausgangszustand des Walks (vgl. auch Abb. 3.1). Somit kann auch der Randzustand immer stärker bevölkert werden.

Die Verlustrate γ wird aus der Anpassung extrahiert und ist in Abb. 5.5b gegen die Dekohärenzrate $p_{\rm C}$ aufgetragen. Der lineare Zusammenhang (5.15) bestätigt sich für kleine Dekohärenzraten $p_{\rm C} \leq 0.2$. Mit wachsendem $p_{\rm C}$ weicht die Verlustrate jedoch stark vom linearen Verlauf ab.



Abb. 5.5: (a) Zeitliche Entwicklung der Wahrscheinlichkeit Π_t den Randzustand zu bevölkern, für verschiedene Dekohärenzraten p_C , inklusive exponentieller Anpassung. Die Anpassung wurde jeweils nur für einen Teil der Daten bis zu einer Schrittzahl von $t = 10 / \sqrt{p_C}$ durchgeführt. (b) Die aus mehreren Anpassungen extrahierte Verlustrate γ in Abhängigkeit der Dekohärenzrate p_C .

Variation des Randzustands Durch Variation der Münzwinkel im Bulk kann der Randzustand und somit der Faktor $\kappa = (1 - \sum_s \sum_{x, x'} |\langle x, s | \hat{\rho}_0 | x', s \rangle|^2)$ in (5.15) verändert werden. Ausgewählte Münzwinkel-Kombinationen sind in Abb. 5.6a dargestellt. Die topologischen Phasen der beiden Bulks werden dabei konstant gehalten. Der Randzustand wird jeweils numerisch berechnet und die Entwicklung von Π_t für eine feste Dekohärenzrate von $p_C = 0.1$ simuliert. Das Modell passt für kleine Schrittzahlen wieder gut zu den Daten. Die resultierenden Dekohärenzraten werden extrahiert und sind in Abb. 5.6b gegen κ aufgetragen. Hier bestätigt sich der erwartete lineare Zusammenhang.

Zwei Randzustände Die Verlustrate γ ist ein Maß für die Population des Randzustandes. Das Modell ist jedoch nur bedingt auf die gesamte Aufenthaltswahrscheinlichkeit am Rand übertragbar. Die Annahme, dass der nicht geschützte Anteil des Systems durch die ballistische Expansion verloren geht, ist nur bei der Existenz eines *einzelnen* Randzustands gegeben. Die Existenz zweier Randzustände kann dazu führen, dass der ungeschützte Anteil zwischen den beiden Eigenzuständen hin und her wechselt. Dieses Verhalten ist in Abb. 5.2 gut zu erkennen und führt dazu, dass die Aufenthaltswahrscheinlichkeit am Rand weniger stark abnimmt als im Fall einzeln auftretender Randzustände.



Abb. 5.6: (a) Münzwinkel zur Erzeugung von Randzuständen mit variierendem κ . Variationen von θ_2 unter Konstanz von θ_1 führten zu keiner merklichen Veränderung von κ . Erst die Inhomogenität in θ_1 bewirkt deutlich verschiedenen κ . Es ist b = 1.9 und $p_C = 0.1$. (b) Resultierenden Verlustraten, berechnet über die Anpassung des Spin-Dekohärenzmodells in Abhängigkeit von κ . Der Plot enthält Fehlerbalken.



Abb. 5.7: (a) Besetzungswahrscheinlichkeit Π_t in Abhängigkeit der Form der Phasengrenze bestimmt durch bund $\Delta \theta$. (b) 1D-Split-Step-Walk mit $\theta_1 = \pi/2$ und $\theta_2 = \pi$ für $x \gg 0$, $\theta_2 = 0$ für $x \ll 0$, b = 1.9. Der rechte Bulk besitzt die Gruppengeschwindigkeit v(k) = 0, weswegen der Walk halbseitige lokalisiert ist.

Variation der Phasengrenze Die Abhängigkeit der Verlustrate γ von der Form der Phasengrenze soll untersucht werden. Dazu wird wieder das Protokoll mit $\theta_1 = \pi/2$ und $\theta_2 = \pi/2 + \Delta\theta$ für $x \gg 0$, $\theta_2 = \pi/2 - \Delta\theta$ für $x \ll 0$ unter leichter Spin-Dekohärenz ($p_C = 0.1$) untersucht. Die Verlustraten γ werden über die Anpassung des Modells extrahiert und sind in Abb.5.7a in Abhängigkeit von b und $\Delta\theta$ dargestellt. Die Wahl eines konstanten Münzwinkels θ_1 stellt sicher, dass γ nicht mit κ variiert, numerisch errechnet sich κ zu 0.25 für den gesamten angegebenen Bereich. Generell treten, verglichen mit der linearen Skalierung von γ mit p_C , nur sehr kleine Veränderung der Verlustrate auf. Die Änderung beläuft sich für den gesamten dargestellten Bereich auf maximal 4 ‰. γ nimmt mit wachsendem bzu, ungeschützte Zustände können hier schneller den Bereich des Randzustandes verlassen, da dieser schmaler ist (vgl. 5.2), und ist ab $b \gtrsim 1.5$ in Sättigung, ebenso wie die Randzustandsbreite. γ zeigt ein lokales Minimum um $\Delta\theta = \pi/2$ liegt. Dies ist jedoch wieder die triviale Walk-Konfiguration: Im Bulk mit $\theta_2 = \pi/2 + \Delta\theta = \pi$ ist die Gruppengeschwindigkeit v(k) = 0 für alle k, dies führt somit zu einer halbseitigen Lokalisierung des Walks um die Ausgangsposition (vgl. Abb. 5.7b), der Walk kann den Randzustand stärker besetzen.

5.4. Dekohärenzfreie Zustände

Wie schon für die Definition der topologischen Invariante, sei ein neues Zeitfenster der Zeitentwicklung durch einen zeitverschobenen Walk-Operator \hat{W}_{μ} definiert. Der Münzoperator $\hat{C}(\theta_1)$ wird wieder in zwei Drehungen aufgeteilt: $\theta_1 = \mu \theta_1 + (1 - \mu) \theta_1$ mit $\mu \in \mathbb{R}$, d.h.:

$$\hat{W}^{t} = \dots \qquad \underbrace{\hat{S}_{\downarrow} \hat{C}(\theta_{2}) \hat{S}_{\uparrow} \hat{C}(\theta_{1})}_{\hat{W}_{\mu}} \qquad \underbrace{\hat{W}}_{\hat{S}_{\downarrow} \hat{C}(\theta_{2}) \hat{S}_{\uparrow} \hat{C}(\theta_{1})} \qquad \dots \\
= \dots \qquad \hat{S}_{\downarrow} \hat{C}(\theta_{2}) \hat{S}_{\uparrow} \hat{C} \left((1-\mu) \theta_{1}\right) \underbrace{\hat{C}(\mu \theta_{1}) \quad \hat{S}_{\downarrow} \hat{C}(\theta_{2}) \hat{S}_{\uparrow} \hat{C} \left((1-\mu) \theta_{1}\right)}_{\hat{W}_{\mu}} \hat{C}(\mu \theta_{1}) \qquad \dots \qquad (5.16)$$

Für $\mu = 1/2$ ergibt sich wieder der chiral symmetrische Walk-Operator $\hat{W}' = \hat{W}_{1/2}$. \hat{W}_{μ} beschreibt analog zu \hat{W} die Zeitentwicklung des 1D-Split-Step-Protokolls.

Für den schon untersuchten Walk mit $\theta_2 = 3\pi/4$ für $x \ll 0$, $\theta_2 = \pi/4$ für $x \gg 0$ und konstantem $\theta_1 = -\pi/2$ werden die Eigenzustände des Walk-Operators $\hat{W}_{-1/2}$ mit Energie 0 berechnet und im Gitter präpariert. Die resultierende Zeitentwicklung der Aufenthaltswahrscheinlichkeit ist in Abb. 5.8a für maximale Spin-Dekohärenz ($p_{\rm C} = 1$) dargestellt. Die Entwicklung des Randzustandes erfolgt komplett dekohärenzfrei. Dieses Phänomen kann auch für andere Münzwinkel und unterschiedlichem μ nachgewiesen werden.



Abb. 5.8: (a) Zeitentwicklung der Aufenthaltswahrscheinlichkeit der Randeigenzustände des Walk-Operators $\hat{W}_{-1/2}$ des 1D-Split-Step-Protokolls unter maximaler Spin-Dekohärenz ($p_{\rm C} = 1$). Die Münzwinkel sind $\theta_2 = 3\pi/4$ für $x \ll 0$, $\theta_2 = \pi/4$ für $x \gg 0$ und $\theta_1 = -\pi/2$ = konstant. In (b) ist der gleiche Walk mit einer Spin-Dekohärenz von effektiv $p_{\rm C} = 0.1$ gezeigt. Der Dekohärenzprozess wirkt hier als effektive Messung nach jedem Münz- bzw. Shift-Operator mit einer reduzierten Dekohärenzrate von $p'_{\rm C} = p_{\rm C}/4 = 0.025$.

Der Grund für diese Entwicklung liegt in der Form der Randzustände und der zeitlichen Diskretisierung des Dekohärenzmodells. Dieses wirkt in Form einer Messung zu diskreten Zeitpunkten. Durch die geschickte Wahl des Walk-Operators eines Walks können nun Eigenzustände in den dekohärenzstabilen Zuständen des Systems erzeugt werden. Die stabilen Zustände der Spin-Dekohärenz sind die $\{|s\rangle\}, s \in \{\uparrow,\downarrow\}$. In der Tat faktorisieren die Randeigenzustände von $\hat{W}_{-1/2}$ für die oben angegebenen Münzparameter in einen Ortsanteil $|\xi\rangle$ und Spin $|\uparrow\rangle$, was numerisch überprüft wurde. Ihr Spin-Anteil weist somit keine Kohärenzen auf, weswegen die Zustände invariant unter Spin-Dekohärenz sind. Die Wahl des Zeitfensters, in dem der effektive Hamiltonian und der Walk-Operator definiert werden, beeinflusst somit scheinbar die Stabilität der Randzustände.

Dies erscheint jedoch nicht sinnvoll. Die Wahl des Zeitfensters ist lediglich ein mathematisches Konstrukt und sollte beliebig sein. Dieses verändert jedoch nach (3.11) die Zeitpunkte zu denen Dekohärenz simuliert wird und somit die Entwicklung unter Dekohärenz. Das Problem ist also die Annahme eines zeitlich diskreten Dekohärenzmodells. Im Experiment ist Dekohärenz vielmehr durch eine kontinuierliche Dephasierung der Systemzustände und insbesondere der Spin-Zustände gegeben.

Um das Modell in gewissem Maße zu korrigieren, lässt sich der Dekohärenzprozess auf mehrere Zeitpunkte einer Walk-Periode aufteilen: Die Umgebung führe nun in einer Walk-Periode der Entwicklung $[\tau, \tau + T]$ anstatt einer, M effektive Messungen mit reduzierter Wahrscheinlichkeit $p'_{\rm D} = p_{\rm D}/M$ durch. Die Zeitpunkte seien dabei gleichmäßig über die Zeitdauer T des Schritts verteilt.

So ergibt sich für die Einwirkung von Spin-Dekohärenz nach jeder Münz- und Shift-Operation im 1D-Split-Step-Protokoll (d.h. M = 4) die in Abb. 5.8b dargestellte Entwicklung. Der Walk-Operator besitzt zwar weiterhin einen Randeigenzustand mit Spin \uparrow , jedoch ist dieser im Allgemeinen kein Eigenzustand der einzelnen Münz- und Shift-Operatoren. Der Spin ändert sich mit der Anwendung des ersten Münz-Operators und bildet somit im Idealfall einer nicht-trivialen Münze ($\theta_1 \neq r \pi$ mit $r \in \mathbb{Z}$) Kohärenzen. Genau an diesem Punkt setzt nun die Dekohärenz das erste Mal ein. Die Information über die Kohärenzen geht durch die effektive Van Neumann-Messung teilweise verloren, die gesamte weitere Entwicklung wird gestört. Der Randzustand erfährt das erwartete diffusive Verhalten.



Abb. 6.1: (a) Phasendiagramm des 2D-Standard-Protokolls. Der Walk realisiert für verschiedene Münzwinkel Bulks, denen jeweils eine Windungszahl $\xi = \pm 1$ zugeordnet werden kann (farbig getrennte Bereiche). Zwischen verschiedenen Phasen schließt die Bandlücke bei Energie 0 und π (gestrichelt). Der im Folgenden betrachtete Phasenübergang ist eingezeichnet (violett). Der Stern symbolisiert die Existenz geschützter Randzustände. (b) Realisierung räumlich getrennter Phasen in Form einer "Insel".

6. Topologisch geschützte Zustände in 2D

6.1. Topologische Klassifizierung

Rudner-Windungszahl Zweidimensionale periodisch getriebene Systeme können ähnlich zum 1D-Split-Step-Protokoll durch eine Windungszahl charakterisiert werden. Im Vergleich zum eindimensionalen System ist die Existenz einer Symmetrie jedoch nicht notwendig. Diese durch Rudner u.a. gefundene Invariante [30] wurde erst kürzlich durch Asbóth und Edge für das 2D-Quantenwalk-Protokoll berechnet, wobei wieder die gesamte Zeitentwicklung des Walks analysiert wurde. Für die Herleitung sei an dieser Stelle auf [31] verwiesen. Den verschiedenen Münzwinkeln kann eine Windungszahl $\xi = \pm 1$ zugeordnet werden. Das resultierende Phasendiagramm ist in Abb. 6.1a dargestellt. Im Energiespektrum des 2D-Standard-Protokolls schließt die Bandlücke immer gleichzeitig bei Energie 0 und π . Die zugehörigen Randzustände treten hier somit immer in Paaren auf.

6.2. Propagierende Randzustände

Die Translationsinvarianz des 2D-Standard-Protokolls sei durch Einführung von Rändern in y-Richtung gebrochen. Es sei $(\theta_1, \theta_2) = (3\pi/4, \pi/4)$ für $-10 \le y \le 10$ und $(\theta_1, \theta_2) = (\pi/4, 3\pi/4)$ sonst, mit b = 1.9. Die beiden räumlich getrennten Bereiche realisieren somit zwei unterschiedliche topologische Phasen mit Windungszahl -1 für $|y| \le 10$ und +1 sonst, weswegen ungepaarte, geschützte Zustände mit Energie 0, $\pm \pi$ erwartet werden. Der Quasiimpuls in x-Richtung k_x ist weiterhin eine gute Quantenzahl, das Energiespektrum lässt sich somit in dessen Abhängigkeit darstellen, vgl. Abb. 6.2a. In der Tat bilden sich neben zwei Energiebändern Zustände, die die Bandlücke bei 0 und π schließen. Auf Grund der Translationsinvarianz in x-Richtung muss die Eigenenergie kontinuierlich in k_x sein. Die Randzustände, die die Bandlücke schließen können somit durch keine kontinuierliche Transformation des Energiespektrums in die Bulk-Energiebänder angehoben werden, ohne dass die Kontinuität in k_x verletzt wird oder die Bandlücke schließt. Sie sind somit geschützt [9]. Teilen die beiden Bulks die selbe topologische Invariante, es sei $(\theta_1, \theta_2) = (3\pi/4, \pi/4)$ für $|y| \le 10$ und $(\theta_1, \theta_2) = (5\pi/4, -\pi/4)$ sonst, ist die Existenz von Randzuständen mit Energie 0, π nicht gesichert (vgl. Abb. 6.2b). Dadurch, dass der Rand, anders als im eindimensionalen Fall, eine ausgedehnte Linie bildet, können sich die Randzustände am Rand ausbreiten. Die Ausbreitungsrichtung und -geschwindigkeit ist über die Dispersionsrelation $v_x(k_x) = \partial E/\partial k_x$ am Rand gegeben. Die in Abb. 6.2a gezeigten Randzustände propagieren mit maximaler Geschwindigkeit $|v_x(k_x)| = 1$ Gitterplatz/Schritt.



Abb. 6.2: Numerisch berechnete Energiespektren des 2D-Standard-Walks mit Phasengrenze in y-Richtung. In (a) ist $(\theta_1, \theta_2) = (3\pi/4, \pi/4)$ für $-10 \le y \le 10$ und $(\theta_1, \theta_2) = (\pi/4, 3\pi/4)$ sonst, mit b = 1.9. Hier sind die beiden Bulks topologisch verschieden, es bilden sich Randzustände (rot, blau markiert), die die Bandlücke bei Energie 0, π schließen. In (b) ist $(\theta_1, \theta_2) = (3\pi/4, \pi/4)$ für $-10 \le y \le 10$ und $(\theta_1, \theta_2) = (5\pi/4, -\pi/4)$ sonst, mit b = 1.9. Hier sind die beiden Bulks topologisch gleich, topologisch geschützte Randzustände treten nicht auf.

Um die Entwicklung dieser Zustände im Experiment über eine große Schrittzahl beobachten zu können, kann die Form der Grenze z.B. zu einem Kreis geändert werden. Der Radius sei $r_0 = 10$ Gitterplätze, die Münzwinkel über (4.10) gegeben, der Übergang der gleiche wie im Fall der geraden Grenze in y-Richtung. Die so entstehende "Insel" (vgl. Abb. 6.1b) weist bei geeigneter Wahl der Münzwinkel unidirektional propagierende Randzustände am Rand auf [31]. Abb. 6.4a zeigt die Walk-Entwicklung für eine Walker mit Anfangszustand $|x_0 = 0, y_0 = 15, \uparrow\rangle$. Der Walker ist am Rand lokalisiert und propagiert entlang der Phasengrenze. Die Eigenzustände des Walk-Operators mit Energie $0, \pi$ wurden numerisch berechnet und sind in Abb. 6.3 dargestellt. Wie erwartet, sind die um die Phasengrenze herum lokalisiert.

Ausblick – Dekohärenzeffekte in 2D Dekohärenz macht sich wie erwartet durch den kontinuierlichen Verlust des Randzustandes bemerkbar (vgl. Abb. 6.4b). Die Wahrscheinlichkeitsverteilung zeigt jedoch ein deutlich stärkeres diffusives Verhalten, als im eindimensionalen Fall. Bereits nach wenigen Schritten ist der Überlapp des Walkzustandes mit den geschützten Eigenzuständen des Systems so gering, dass sich die Bevölkerung der Phasengrenzen nicht mehr sichtbar vom Bulk unterscheidet.

Eine detaillierte Analyse der Dekohärenzeffekte auf die topologisch geschützten Zustände im zweidimensionalen System insbesondere im Hinblick auf die experimentelle Realisierung ist Aufgabe zukünftiger Untersuchungen.



Abb. 6.3: Aufenthaltswahrscheinlichkeit der topologisch geschützten Eigenzustände mit Energie 0, π des inhomogenen Systems mit kreisförmiger topologischer Phasengrenze.







Abb. 6.4: Zeitentwicklung des 2D-Standard-Protokolls mit $(\theta_1, \theta_2) = (3\pi/4, \pi/4)$ für $\sqrt{x^2 + y^2} \le 10$, $(\theta_1, \theta_2) = (\pi/4, 3\pi/4)$ sonst, b = 1.9. Der Anfangszustand ist $|x_0 = 0, y_0 = 15, \uparrow\rangle$. Die Wahrscheinlichkeit ist farbkodiert. Die Zuordnung den Daten angepasst und angegeben. (a) Walk-Entwicklung ohne Dekohärenz. Es zeigt sich ein im Uhrzeigersinn propagierender unidirektionaler Wahrscheinlichkeitsstrom entlang der Phasengrenze. (b) Zeitentwicklung der gleichen Walk-Konfiguration unter starke Spin-Dekohärenz mit $p_C = 0.2$. Nach etwa 50 Schritten Entwicklung geht die Besetzung des Randzustands verloren.

7. Simulation

Die Simulation der Quantenwalks wurde in Mathematica [32] implementiert. Besonders im zweidimensionalen Fall sind die zu berechnenden Systeme sehr groß, für ein $n \times n$ -Gitter ergibt sich die Größe der Dichtematrix und der Walk-Operatoren zu $d \times d$ mit $d = 2n^2$. Deswegen wird verstärkt das SparseArray-Konzept [33] für dünn besetzter Matrizen genutzt. Dennoch benötigt bspw. das oben definierte Walk-Protokoll mit n = 41 während der Laufzeit rund 2.6 bis 3 GB Speicher. Deutlich größere Systeme können im Moment somit nur schwierig bewältigt werden, auch die Laufzeit stellt eine starke Einschränkung dar. Optimierungen im Speicherbedarf sind denkbar, jedoch existiert ein "Trade-Off" zwischen Speicherbedarf und Laufzeit. Für zukünftige Analysen und Simulationen des 2D-Systems unter Dekohärenz sollte die Software dafür dementsprechend optimiert werden.

8. Zusammenfassung und Ausblick

Wie die Analyse zeigt, hat Dekohärenz einen nicht zu vernachlässigenden Effekt auf die Existenz und Entwicklung topologisch geschützter Zustände. Der Einfluss der Umgebung muss für die Erzeugung und Untersuchung dieser Zustände berücksichtigt werden.

Im eindimensionalen Quantenwalk konnten Korrelationen zwischen den, durch den Experimentator einstellbaren Parametern – den Münzwinkeln – und der Breite einzeln auftretender Randzustände gefunden werden. Um diese Zustände vom restlichen System gut unterscheiden zu können, gilt es diese möglichst klein zu halten. Die Breite skaliert besonders stark mit der Ausdehnung des Münzwinkel-Übergangs, geht aber für sehr steile Übergänge in Sättigung. Dieser Bereich ist durch den dimensionslosen Beugungsparameter $b \gtrsim 1.5$ beschrieben, der im 2D-Experiment einer numerischen Apertur von $NA \gtrsim 0.7$ entspricht. Hier sollten für die mögliche Analyse eindimensionaler Phasengrenzen somit gute Resultate erwartet werden können. Im 1D-Experiment mit $b \approx 0.3$ muss die Abhängigkeit von der Wahl der Münzwinkel stärker beachtet werden. Da jedoch nur ein kleiner Teil des Phasendiagramms untersucht wurde, müssen zukünftige Analysen zeigen, welche Phasen-Übergänge am geeignetsten sind. Hohe Ausbreitungsgeschwindigkeiten in den Bulks führen zusätzlich schon nach wenigen Schritten zu einem guten Kontrast zwischen Randzustand und umliegender Walk-Entwicklung.

Die Population der Randzustände erfährt im Fall reiner Spin-Dekohärenz, welche den Einfluss der Umgebung im Experiment dominiert, näherungsweise einen exponentiellen Abfall, dessen Stärke maßgeblich durch die Dekohärenzrate bestimmt ist. Ausnahme bilden paarweise auftretende Randzustände. Hier ist der Abfall deutlich schwächer, da das System abwechselnd die beiden Randzustände besetzen kann. Dieser Effekt kann ausgenutzt werden, um Randzustände zu erzeugen, die in der Walk-Entwicklung besonders stabil gegenüber Dekohärenz sind. Eine Anpassung des hier aufgezeigten Modells für räumliche Dekohärenz ist möglich, erwartet wird ein ähnliches Verhalten, wie im Fall reiner Spin-Dekohärenz.

Die Grenzen der Gültigkeit des verwendeten Dekohärenzmodells konnten durch die Konstruktion eines scheinbar dekohärenzfreien Zeitfensters des 1D-Split-Step-Protokolls aufgezeigt werden. Weitere Untersuchungen, insbesondere die Suche nach geeigneten Phasenübergängen sollten diese Einschränkungen beachten. Eine einfache Korrektur des Modells wurde vorgestellt.

Die Analyse von Dekohärenzeffekten in zweidimensionalen Systemen im Hinblick einer experimentellen Realisierung bleibt eine Aufgabe zukünftiger Untersuchungen. Die Grundlagen für die Analyse wurde durch die Implementierung und Optimierung einer numerischen Simulation gelegt.

Literatur

- K. v. Klitzing, G. Dorda und M. Pepper. »New Method for High-Accuracy Determination of the Fine-Structure Constant Based on Quantized Hall Resistance«. In: *Phys. Rev. Lett.* 45.6 (Aug. 1980), S. 494– 497. DOI: 10.1103/physrevlett.45.494. URL: http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.45.494.
- B. I. Halperin. »Quantized Hall conductance, current-carrying edge states, and the existence of extended states in a two-dimensional disordered potential«. In: *Physical Review B* 25.4 (Feb. 1982), S. 2185–2190. DOI: 10.1103/physrevb.25.2185. URL: http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.25.2185.
- M. Z. Hasan und C. L. Kane. »Colloquium : Topological insulators«. In: Reviews of Modern Physics 82.4 (Nov. 2010), S. 3045–3067. DOI: 10.1103/revmodphys.82.3045. URL: http://dx.doi.org/10.1103/RevModPhys.82.3045.
- [4] W. Dür u. a. »Quantum walks in optical lattices«. In: *Physical Review A* 66.5 (Nov. 2002). DOI: 10.1103/ physreva.66.052319. URL: http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevA.66.052319.
- [5] A. M. Childs u. a. »Exponential algorithmic speedup by a quantum walk«. In: *Proceedings of the thirty-fifth* ACM symposium on Theory of computing - STOC '03. ACM Press, 2003. DOI: 10.1145/780542.780552. URL: http://dx.doi.org/10.1145/780542.780552.
- [6] M. Genske u. a. »Electric Quantum Walks with Individual Atoms«. In: *Phys. Rev. Lett.* 110.19 (Mai 2013).
 DOI: 10.1103/physrevlett.110.190601. URL: http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.110.
 190601.
- [7] M. Genske. »Electric Quantum Walks with Individual Atoms«. Masterarbeit. Universität Bonn, Okt. 2012. URL: http://quantum-technologies.iap.uni-bonn.de/de/diplom-theses.html?task=download& file=219&token=7a7783a9030e76655f0e21c3bb20471e.
- [8] G. Czycholl. *Theoretische Festkörperphysik*. 7. Aufl. Springer Berlin Heidelberg, 2008. DOI: 10.1007/978-3-540-74790-1. URL: http://dx.doi.org/10.1007/978-3-540-74790-1.
- F. S. Nathan. »Topological Classification of Floquet-Bloch Systems«. Masterarbeit. Kopenhagen, 2015. URL: http://cmt.nbi.ku.dk/student_projects/msc/FNathan.pdf.
- [10] F. Schwabl. Quantenmechanik (QM I). 7. Aufl. Springer Berlin Heidelberg, 2007. DOI: 10.1007/978-3-540-73675-2. URL: http://dx.doi.org/10.1007/978-3-540-73675-2.
- [11] M. M. Wolf. Quantum Information Theory. Vorlesungsskript. 2008. URL: http://www.coqus.at/fileadmin/ quantum/coqus/documents/Michael_Wolf/QITSkript_v20_01.pdf.
- [12] M. A. Schlosshauer. Decoherence and the Quantum-To-Classical Transition. 1. Aufl. Springer Berlin Heidelberg, 2007. DOI: 10.1007/978-3-540-35775-9. URL: http://dx.doi.org/10.1007/978-3-540-35775-9.
- [13] S. Haroche und J. Raimond. *Exploring the Quantum; Atoms, Cavities, and Photons.* 1. Aufl. Oxford University Press, 2006. ISBN: 978-0-19-850914-1.
- [14] A. Alberti u. a. »Decoherence models for discrete-time quantum walks and their application to neutral atom experiments«. In: *New J. Phys.* 16.12 (Dez. 2014), S. 123052. DOI: 10.1088/1367-2630/16/12/ 123052. URL: http://dx.doi.org/10.1088/1367-2630/16/12/123052.
- [15] O. Labs und F. Schreyer. Algebraische Topologie. Vorlesungsskript. 2007, S. 92. URL: http://www.oliverlabs. net/data/07_AlgTop.pdf.
- [16] R. Gross und A. Marx. Festkörperphysik. 2. Aufl. De Gruyter Oldenburg, 2014. ISBN: 978-3-11-035870-4.
- J. K. Asbóth. »Symmetries, topological phases, and bound states in the one-dimensional quantum walk«. In: *Physical Review B* 86.19 (Nov. 2012). DOI: 10.1103/physrevb.86.195414. URL: http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.86.195414.
- [18] F. Schwabl. Quantenmechanik für Fortgeschrittene (QM II). Springer Berlin Heidelberg, 2008. DOI: 10.1007/ 978-3-540-85076-2. URL: http://dx.doi.org/10.1007/978-3-540-85076-2.
- T. Kitagawa u.a. »Exploring topological phases with quantum walks«. In: *Physical Review A* 82.3 (Sep. 2010). DOI: 10.1103/physreva.82.033429. URL: http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevA.82.033429.
- [20] T. Kitagawa u.a. »Topological characterization of periodically driven quantum systems«. In: *Physical Review B* 82.23 (Dez. 2010). DOI: 10.1103/physrevb.82.235114. URL: http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.82.235114.

- [21] S. Ryu und Y. Hatsugai. "Topological Origin of Zero-Energy Edge States in Particle-Hole Symmetric Systems". In: Phys. Rev. Lett. 89.7 (Juli 2002). DOI: 10.1103/physrevlett.89.077002. URL: http: //dx.doi.org/10.1103/PhysRevLett.89.077002.
- [22] I. Bloch. Licht-Atom Wechselwirkung im Zwei-Niveau System. Vorlesungsskript, Internet Archive. 2004. URL: https://web.archive.org/web/20051220013153/http://www.quantum.physik.uni-mainz.de/ lectures/2003/ws0304_atomphysik/download/Licht_AtomWW_14.pdf.
- [23] E. Hecht. Optics. 4. Aufl. Addison Wesley, 2002. ISBN: 0-321-18878-0.
- [24] C. S. Williams und O. A. Becklund. Introduction to the Optical Transfer Function. SPIE Press, 1989. ISBN: 978-0819443366. URL: https://books.google.de/books?id=b5tVkUq3j4EC.
- [25] T. Kitagawa. »Topological phenomena in quantum walks; elementary introduction to the physics of topological phases«. In: *arXiv* (2011), S. 23. arXiv: 1112.1882v1.
- [26] J. K. Asbóth, B. Tarasinski und P. Delplace. »Chiral symmetry and bulk-boundary correspondence in periodically driven one-dimensional systems«. In: *Physical Review B* 90.12 (Sep. 2014). DOI: 10.1103/ physrevb.90.125143. URL: http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.90.125143.
- [27] J. K. Asbóth und H. Obuse. »Bulk-boundary correspondence for chiral symmetric quantum walks«. In: *Physical Review B* 88.12 (Sep. 2013). DOI: 10.1103/physrevb.88.121406. URL: http://dx.doi.org/ 10.1103/PhysRevB.88.121406.
- [28] L. Jiang u. a. »Majorana Fermions in Equilibrium and in Driven Cold-Atom Quantum Wires«. In: Phys. Rev. Lett. 106.22 (Juni 2011). DOI: 10.1103/physrevlett.106.220402. URL: http://dx.doi.org/10. 1103/PhysRevLett.106.220402.
- [29] A. Ahlbrecht u. a. »Asymptotic evolution of quantum walks with random coin«. In: J. Math. Phys. 52.4 (2011), S. 042201. DOI: 10.1063/1.3575568. URL: http://dx.doi.org/10.1063/1.3575568.
- [30] M. S. Rudner u. a. »Anomalous Edge States and the Bulk-Edge Correspondence for Periodically Driven Two-Dimensional Systems«. In: *Phys. Rev. X* 3.3 (Juli 2013). DOI: 10.1103/physrevx.3.031005. URL: http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevX.3.031005.
- [31] J. K. Asbóth und J. M. Edge. »Edge-state-enhanced transport in a two-dimensional quantum walk«. In: *Physical Review A* 91.2 (Feb. 2015). DOI: 10.1103/physreva.91.022324. URL: http://dx.doi.org/10. 1103/PhysRevA.91.022324.
- [32] Wolfram Research, Inc. Mathematica. Version 10.1. Champaign, Illinois, 2015. URL: https://www. wolfram.com.
- [33] Wolfram Research, Inc. SparseArray Mathematica Dokumentation. 2007. URL: https://reference. wolfram.com/language/ref/SparseArray.html.

A. Anhang

A.1. Herleitung – Quasienergie-Spektrum

Die Operatoren $\hat{W}(\mathbf{k})$, $\hat{H}(\mathbf{k})$ wirken nur in $\mathcal{H}_{\text{Spin}}$ und können somit als Superposition der Pauli-Matrizen $\hat{\sigma}_i$ geschrieben werden [10, S. 202]:

$$\hat{H}(\mathbf{k}) = \sum_{\mu=0}^{3} h_{\mu}(\mathbf{k}) \,\hat{\sigma}_{\mu} = \vec{h}(\mathbf{k}) \cdot \hat{\vec{\sigma}} \,, \tag{A.1}$$

$$\hat{W}(\mathbf{k}) = \sum_{\mu=0}^{3} w_{\mu}(\mathbf{k}) \,\hat{\sigma}_{\mu} = \vec{w}(\mathbf{k}) \cdot \hat{\vec{\sigma}} + w_0(\mathbf{k})\hat{\sigma}_0 \,, \tag{A.2}$$

wobei ohne Beschränkung der Allgemeinheit $h_0 = 0$ angenommen werden kann, da der Energie-Nullpunkt frei wählbar ist. Somit ist die Quasienergie auf das Intervall $[-\pi,\pi]$ beschränkt, wie später ersichtlich wird. Mit $\hat{W} = e^{-i\hat{H}}$ gilt

$$\hat{W}(\mathbf{k}) = \exp(-i\,\vec{h}(\mathbf{k})\cdot\hat{\vec{\sigma}}) = \cos|\vec{h}(\mathbf{k})|\,\hat{\sigma}_0 - i\,\sin|\vec{h}(\mathbf{k})|\,\hat{\vec{\sigma}}\cdot\frac{\vec{h}(\mathbf{k})}{|\vec{h}(\mathbf{k})|}\,,\tag{A.3}$$

wobei eine Identität für das Matrix
exponential der Pauli-Spin-Matrizen [10, S. 283] benutzt wurde. Ein Koeffizienten
vergleich mit (A.1) liefert unter Ausnutzung von sin(arccos u) = $\sqrt{1-u^2}$:

$$|\tilde{h}(\mathbf{k})| = \arccos|w_0(\mathbf{k})|, \qquad (A.4)$$

$$\vec{n}(\mathbf{k}) = \frac{\vec{h}(\mathbf{k})}{|\vec{h}(\mathbf{k})|} = \frac{\mathrm{i}\,\vec{w}(\mathbf{k})}{\sqrt{1 - w_0(\mathbf{k})^2}}\,.\tag{A.5}$$

Der Einheitsvektor $\vec{n}(\mathbf{k})$ ist auf Grund seiner Definition in (A.1) gerade der Vektor, welcher die Eigenzustände des effektiven Hamiltonians für festes \mathbf{k} auf der Blochkugel darstellt. Die dazugehörige Quasienergie ist gegeben durch

$$E(\mathbf{k}) = \langle \mathbf{k} | \hat{H}(\mathbf{k}) | \mathbf{k} \rangle = \pm | \vec{h}(\mathbf{k}) | = \pm \arccos |w_0(\mathbf{k})|.$$
(A.6)

B. Versicherung

Ich versichere, dass ich diese Arbeit selbstständig verfasst und keine anderen als die angegebenen Quellen und Hilfsmittel benutzt sowie Zitate kenntlich gemacht habe.

Ort, Datum

Unterschrift