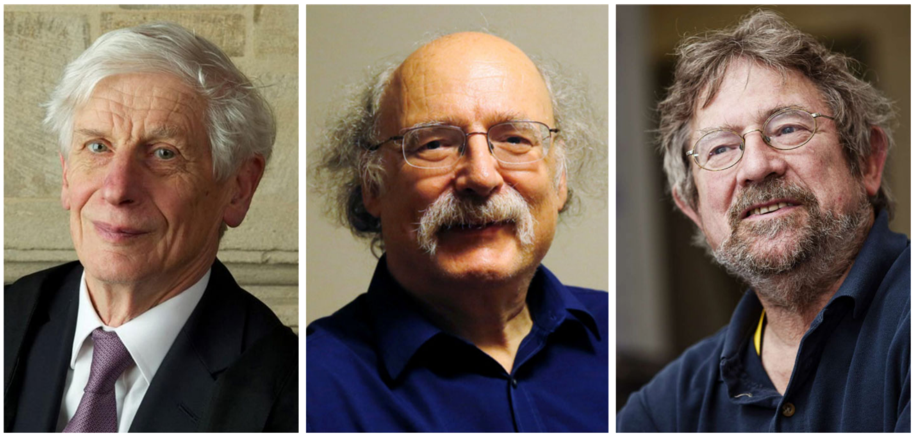
# A 2016. ÉVI FIZIKAI NOBEL-DÍJ
## – Hogyan kerül a topológia a szilárdtest-fizikába?

Asbóth János – MTA Wigner FK SZFI
Iglói Ferenc – MTA Wigner FK SZFI és SZTE Elm. Fiz. Tsz.

## A díjazottak



A 2016. évi fizikai Nobel-díjasok: David J. Thouless, F. Duncan M. Haldane és J. Michael Kosterlitz.

A Svéd Királyi Tudományos Akadémia a 2016. évi Nobel-díjat *David J. Thouless*-nek, *F. Duncan M. Haldane*-nek és *J. Michael Kosterlitz*-nek ítélte oda „A topológiai fázisátalakulással és az anyag topológiai fázisaival kapcsolatos elméleti felfedezéseiért”. A díjazott eredmények a múlt század 70-es, 80-as éveiben születtek és közvetlenül öt tudományos közleményhez kapcsolhatók [1–3, 5, 6]. Ezen eredmények közvetve az anyag szerkezetével kapcsolatos alapvető elképzeléseinket tágították ki, amely paradigmaváltáshoz vezetett a szilárdtest-fizikában és az anyagtudományban. A jelenkor hangsúlyozottan fontos kutatási területei közé tartoznak az anyag topologikus fázisainak és az azokkal kapcsolatos fázisátalakulások vizsgálata. A topologikus szigetelők és a topologikus szupravezetők kísérleti és elméleti szempontból is számos fontos kérdést vetettek és vetnek fel, és ezen vizsgálatok – reményeink szerint – közelebb hoznak a kvantumszámítógépek megvalósításához is.

A három nagy-britanniai születésű és később az USA-ban dolgozó díjazott közül ketten korábbi Nobel-díjasok tanítványai voltak. Thouless a Cornell Egyetemen 1958-ban *Hans Albrecht Bethe* (1967-es Nobel-díjas) témavezetésével nyerte el PhD címét, míg Haldane témavezetője Cambridge-ben 1978-ban *Philip Warren Anderson* (1977-es Nobel-díjas) volt. Kosterlitz szintén híres laboratóriumban, Oxfordban lett doktor 1969-ben. A díjazottak korábbi elismerései közül érdemes megemlíteni Thouless Wolf-díját (1990) és Dirac-medállját (1993), Kosterlitz és Thouless Lars Onsager-díját (2000) valamint Haldane Dirac-medállját (2012). Ezek alapján is megállapítható, hogy a díjazottak személyét szakterületükön a legnagyobbak között ismerték el.

A Nobel-díj méltatása három eredményt emel ki, amelyeket a következőkben egy-egy alfejezetben részletesebben ismertetünk. Írásunk végén egy kitekintésben a díjjal kapcsolatos eredményeknek a jelenkor fizikájára gyakorolt hatásáról is szólunk.

*Asbóth János fizikus,* az MTA Wigner FK SZFI tudományos főmunkatársa, a kvantumos bolyongás topologikus fázisainak kutatója. A topologikus szigetelőkről az ELTE-n és a Genfi Egyetemen tartott kurzust, a témáról *Pályi Andrással* és *Oroszlány Lászlóval* közösen írt egyetemi jegyzete (*A Short Course on Topological Insulators*) a Springer kiadásában jelent meg idén.

*Iglói Ferenc* fizikus, az MTA Wigner FK SZFI tudományos tanácsadója, az SZTE Elméleti Fizikai Tanszék egyetemi tanára. Kutatási területe a statisztikus fizika és az elméleti szilárdtest-fizika, különös tekintettel a fázisátalakulások és kritikus jelenségek, rendezetlen klasszikus és kvantumos rendszerek, nemegyensúlyi folyamatok vizsgálatára. Több mint 175 tudományos dolgozat szerzője. 2017-től az *Europhysics News* Science Editora.

## A Kosterlitz–Thouless átalakulás

A későbbiekben Kosterlitz–Thouless (KT) átalakulásnak elnevezett eredmények [1, 2] 1972-ben születtek Birminghamben, ahol Thouless a matematikai fizika professzora volt és Kosterlitz a második posztdoktori alkalmazását töltötte. Ebben az időszakban az elméleti fizikusok érdeklődésének homlokterében a kritikus jelenségek és – a nem sokkal korábban felfedezett – renormálásicsoport-módszer különböző alkalmazásai álltak. A KT-átalakuláshoz kapcsolódó vizs-

A szerzőket munkájukban az NKFIH az OTKA K109577, K115959, és NN109651 sz. pályázatok keretében, A. J.-t a Magyar Tudományos Akadémia a Bolyai János Kutatási Ösztöndíj keretében támogatta. Köszönetet mondunk *Sólyom Jenőnek* a hasznos diszkussziókért.

gálatokhoz kísérleti motivációt a szuperfolyékonyság, illetve a szupravezetés kétdimenziós, vékony rétegekben mutatott lehetséges viselkedése szolgáltatta. Matematikai szempontból a problémát a klasszikus, kétdimenziós XY-modell írja le, amelyet a

$$\mathcal{H}_{XY} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \cos(\theta_i - \theta_j) \tag{1}$$

Hamilton-függvény jellemez, ahol az összegzés az $\langle i,j \rangle$ elsőszomszédpárokra történik. Az itt szereplő $0 \le \theta_i < 2\pi$ változó jelentheti egy $\vec{S}_i$ síkbeli vektorhoz tartozó szöget, vagy szuperfolyékonyság esetén a szuperfolyadék

$$\Psi = \sqrt{\rho_s}\, e^{i\theta} \tag{2}$$

hullámfüggvényének fázisát, ahol $\rho_s$ a szuperfolyadék sűrűségét jelöli. Az univerzalitás elvének megfelelően ezen két rendszer azonos univerzalitási osztályba tartozik. Az XY-modell esetén ismert volt egy egzakt eredmény, az úgynevezett Mermin–Wagner-tétel [7], amely szerint véges $T > 0$ hőmérsékleten nincs hosszútávú rend, mert az $\langle \vec{S}(0)\vec{S}(\vec{r}) \rangle$ korrelációs függvény nagy $r$ esetén nullához tart.[1] Ennek ellentmondani látszottak a rendszeren számolt különböző numerikus eredmények, amelyek valamilyen fázisátalakulás jelenlétét mutatták. Közelítő, analitikus eredmény is ismert volt. Amennyiben az (1) egyenletet folytonos közelítésben írjuk fel:

$$\mathcal{H}_{XY} = \frac{J}{2} \int \mathrm{d}^2 r \left( \vec{\nabla}\theta(\vec{r}) \right)^2, \tag{3}$$

továbbá a szögváltozó értelmezési tartományát a $-\infty < \theta < \infty$ módon kiterjesztjük, akkor egy szabad, gauszszos ingadozásokat mutató térelméletre jutunk, ahol a korrelációs függvény értéke:

$$\langle \vec{S}(0)\, \vec{S}(\vec{r}) \rangle \sim \left( \frac{a}{r} \right)^{\frac{k_B T}{2\pi J}}. \tag{4}$$

Itt $a$ a mikroszkopikus hosszúságskálát jelöli. Ez az eredmény összhangban áll a Mermin–Wagner-tétellel, mivel nagy $r$ esetén valóban eltűnik, viszont nem írja le megfelelően a magashőmérsékleti tartományban tapasztalt exponenciális lecsengést.

A fenti probléma megoldásához Kosterlitz és Thouless észrevette, hogy a szögváltozó periodicitását nem lehet elhagyni, mivel ezzel a vortex-jellegű gerjesztések is eltűnnek a rendszerből. Minden egyes vortexhez egy $v$ vortexparamétert lehet definiálni:

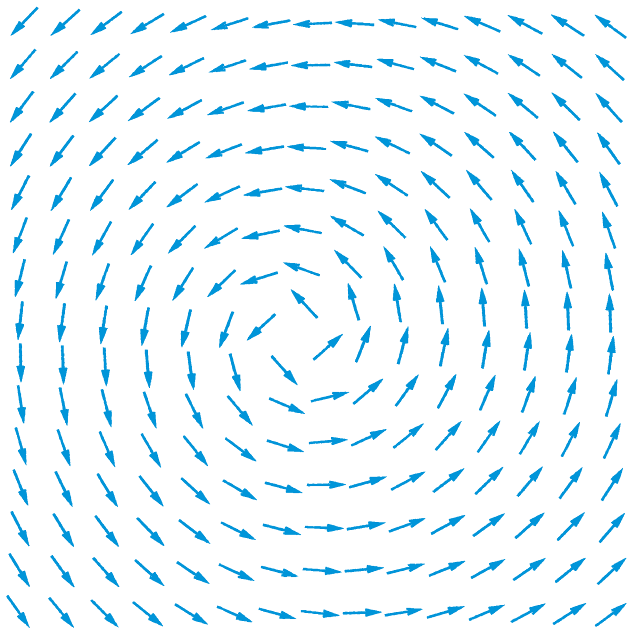
$$v = \frac{1}{2\pi} \oint_C \mathrm{d}\, r \vec{\nabla}\theta(\vec{r}), \tag{5}$$

ahol $C$ egy, a vortex középpontját megkerülő tetszőleges zárt görbét jelöl. $v$ egy egész szám, amely azt adja meg, hogy hányszor végzett teljes fordulatot a spin, miközben megkerülte a vortexet.

A probléma szempontjából releváns $v = \pm 1$ vortexek esetén $|\vec{\nabla}\theta(\vec{r})| = 1/r$ és egy izolált vortex energiája:

$$E_v = \frac{J}{2} \int \mathrm{d}^2 r \left( \frac{1}{r} \right)^2 = J\pi \ln\left( \frac{L}{a} \right), \tag{6}$$

ahol $L$ a rendszer lineáris mérete és az $a$ mikroszkopikus hosszúság a vortex magjának kiterjedését jelöli. A fentiek szerint egy izolált vortex energiája a rendszer méretével divergál és ezért termikus ingadozások során nem keletkezhet. Viszont lehetőség van vortex-antivortex párok keltésére, ahol az utóbbi



*1. ábra.* Vortexgerjesztés az XY-modellben, a vortexparaméter, $v = 1$.

[1] A rendezett fázis hiányát a következő energia-entrópia érveléssel lehet érzékeltetni. Először tekintsük a klasszikus Ising-modellt, amelynek Hamilton-függvénye a $\mathcal{H}_I = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j$ alakú, $J > 0$ és $\sigma_i = \pm 1$ diszkrét spinváltozó. Egydimenzióban, a *Landaunak* tulajdonított érvelés szerint, a rendezett fázist (+++…+) megtörő doménfal típusú gerjesztés (+++…+−−…−) energiája $\varepsilon = 2J$, míg entrópiája $s \approx k_B \ln L$, mivel egy L hosszúságú láncon $\approx L$ helyre lehet a doménfalat elhelyezni. A gerjesztéssel kapcsolatos szabadenergia-változás: $f = \varepsilon - Ts \approx 2J - Tk_B \ln L$ minden véges $T$ hőmérsékleten negatív, ezért a termikus fluktuációk doménfalakat keltenek a rendszerben és ezzel megszűnik a ferromágneses rend. Két dimenzióban, *Peierls* általánosítása szerint, egy ferromágneses (például +++…+) tengerben keltett, $L$ kerületű, ellentétesen (−−…−) mágnesezett domén gerjesztési energiája a kerület hosszával arányos: $\varepsilon = 2JL$. Az $L$ kerületű doménfalak lehetséges számát egy $L$ lépéses bolyongás lehetséges kimeneteleivel becsüljük meg. Négyzetrácsot tekintve egy bejövő lépés után tipikusan 3 különböző irányban folytatódhat a bolyongás, amely így (nem több mint) $\sim 3^L$ lehetőséget ad. Innen az entrópia $s \approx k_B L \ln 3$, a szabadenergia pedig $f \approx 2JL - Tk_B L \ln 3$. Láthatóan $T < T_c \approx 2J/\ln 3 k_B$ esetén nagy doménfalakat nem lehet termikus fluktuációkkal kelteni és a kétdimenziós Ising-modell a ferromágneses fázisában van. Folytonos szimmetriájú rendparaméter esetén, miként az (1) egyenlettel adott XY-modellnél a hasonló energia-entrópia érvelésnél a doménfal energiája akkor lesz minimális, ha a doménfal kiterjedt, mondjuk $\ell \sim L$ rácshelyet foglal el és két szomszédos rácshely között $\Delta\theta \sim 1/\ell$ szöggel fordul el a spin. Egy spinpár esetén az energiajárulék $\Delta\tilde{\varepsilon} \sim (\Delta\theta)^2 \sim 1/\ell^2$, azaz a teljes doménfal esetén az energiasűrűség $\tilde{\varepsilon} \sim 1/\ell \sim 1/L$. Két dimenzióban a doménfal keltése $\varepsilon = \mathcal{O}(1)$ energiával jár és ez minden véges hőmérsékleten kisebb, mint a $\sim Tk_B L$ entrópiajárulék, következésképpen termikus fluktuációkkal szemben a ferromágneses rend instabil.

$v = -1$ vortexparaméterrel rendelkezik. Amennyiben ezek magjainak távolsága $r$, a gerjesztési energiájuk

$$2\pi J \ln\left(\frac{r}{a}\right),$$

amely véges értékű. Ezen topologikus gerjesztések kötött állapotai jelentik a vortex-antivortex gázt, amely az XY-modell alacsony hőmérsékletű állapotát jellemzi. Elegendően magas hőmérsékleten azonban a vortex-antivortex párok felszakadnak és a rendszer nem kötött állapotú vortexekből áll. Kosterlitz és Thouless az átalakulás $T_{KT}$ hőmérsékletét energia-entrópia érveléssel becsülte meg. Egy $L$ lineáris méretű rendszerben egy izolált vortex magja $L^2/a^2$ különböző helyen lehet, innen az entrópiája:

$$S = k_B \ln\left(\frac{L^2}{a^2}\right).$$

Így a vortex szabadenergiája:

$$F = E - TS = J\pi \ln\left(\frac{L}{a}\right) - T k_B 2 \ln\left(\frac{L}{a}\right), \qquad (7)$$

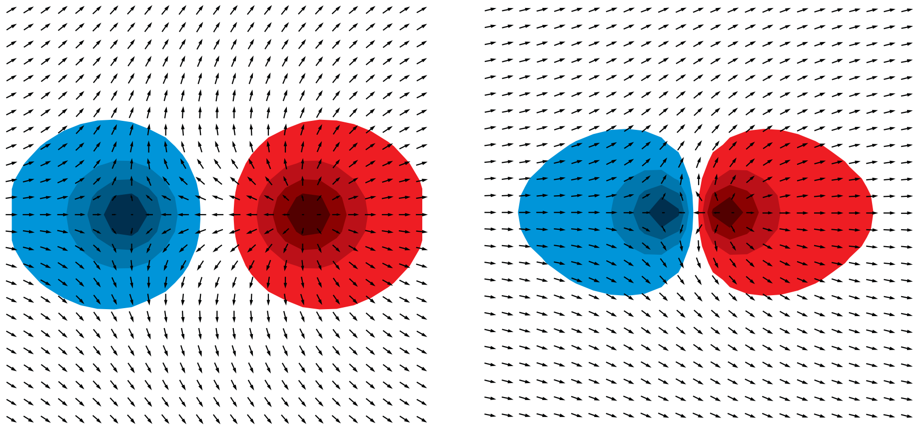
amely a $T_{KT} = J\pi/2k_B$ hőmérséklet felett negatív, azaz a szabad vortexek $T > T_{KT}$ esetén termodinamikailag stabilak.

A KT-átalakulás során az az új jelenség, hogy az átalakulás topologikus gerjesztések következtében lép föl, továbbá, hogy az átalakulás során nincs szimmetriasértés, amely a felfedezés időpontjában teljesen új és nem várt eredmény volt.

A KT-átalakulással kapcsolatban a következő eredményt a renormálásicsoport-egyenletek származtatása és azok megoldása jelentette. A Kosterlitz által elvégzett számolásokból [8] következik, hogy az átalakulás során nagyon gyenge, úgynevezett lényeges szingularitás lép föl. A $\xi$ korrelációs hossz a magas hőmérsékleti fázisban $T_{KT}$-hez közelítve hatványfüggvénynél gyorsabban divergál:

$$\xi \sim \exp\left(-\frac{A}{\sqrt{T - T_{KT}}}\right).$$

Az alacsony hőmérsékleti fázisban a korrelációs hossz divergens, a rendszer egy kiterjedt kritikus fázisban van. Itt a spin-spin korrelációs függvény a (4) szerinti hatványfüggvénnyel jellemzett lecsengést mutatja. A KT-átalakulás kísérletekben is megfigyelhető. Egyik következménye a $\rho_s$ szuperfolyékony sűrűség átalakulási pontban mutatott univerzális ugrása [9], amelyet kísérletekben is az elmélettel összhangban állónak találtak.



*2. ábra.* Ellenkező polaritású vortex-antivortex párok az XY-modellben, balra nagyobb, jobbra kisebb távolságra egymástól.

## Kvantumos Hall-effektus és a topologikus sávszerkezet-elmélet

Thouless következő nagy hozzájárulása a topologikus fázisok és fázisátalakulások megértéséhez a kvantumos Hall-effektus topológiai leírása volt. Thouless azt mutatta meg, hogy a KT-átalakuláshoz hasonlóan a kvantumos Hall-effektusnál is egy olyan újfajta fázisátalakulásról (átalakulások sorozatáról) van szó, amelyek megértéséhez a Landau-paradigma nem elég: szimmetriasértés nincsen, hanem a topológiára van szükség.

A kvantumos Hall-effektust 1980-ban fedezte fel *Klaus von Klitzing,* amikor egy félvezető felületén kialakított kétdimenziós elektrongáz tulajdonságait próbálta alacsony hőmérsékleten Hall-méréssel tesztelni. A Hall-mérésben a síkra merőleges $B$ mágneses térben $I$ áramot vezetnek a mintán keresztül, és mérik a mintának az árammal párhuzamos szélei között ébredő $U_H$ elektromos feszültséget. A kísérlet klasszikus leírása (1879, *Hall*) egyszerű: az állandósult állapotban a töltéshordozókat eltérítő Lorentz-erőt kompenzálja a minta két szélén felhalmozódott töltések elektromos tere, amiből téglalap alakú mintára

$$U_H = \frac{IB}{nq}$$

adódik, ahol $n$ a töltéshordozók felületi sűrűsége, $q$ pedig a töltésük (ami lehet pozitív is, például lyukvezetésnél). Von Klitzing ehelyett azt tapasztalta, hogy elég tiszta minták, alacsony töltéshordozó-sűrűség, nagy mágneses tér és alacsony hőmérséklet esetén a Hall-vezetőképesség nem egyszerűen folytonosan változik a mágneses térrel, hanem bizonyos élesen meghatározott

$$\sigma_H = \frac{I}{U_H} = \nu \frac{e^2}{h}, \quad \nu \in N \qquad (8)$$

értékeket vesz fel, és ezen platók között viszonylag éles átmenetek vannak. A platókon $\nu$ értéke rendkívül stabil, relatív hibája $1{:}10^9$-nek adódott, ami sok nagyságrenddel kisebb, mint akár a mintakészítés hibái, vagy a mágneses tér és a hőmérséklet fluktuációi.

A kvantumos Hall-effektus első elméleti értelmezésének alapjául *Landau* 1930-as munkája szolgált, ami szabad elektronok mágneses térben történő kétdimenziós mozgásának kvantummechanikai leírását adta. Az elektronok energia-sajátértékei itt sokszorosan degenerált, úgynevezett Landau-nívókba rendeződnek. Ha $\nu$ Landau-nívó van betöltve, az anyag tömbi része szigetelő, de a minta szélén áram fog folyni, amihez minden betöltött nívó $e^2/h$ vezetőképességgel ad járulékot. A magyarázat kulcsfontosságú része volt *Laughlin* érvelése (1981), ami segített megérteni, hogy a mintában jelenlévő rendezetlenség milyen szerepet játszik. Azonban a Laughlin-érvelés nem segített megérteni, mi történik, amikor a minta kristályrácsának periodikus potenciálja felhasítja a Landau-szinteket.

Thouless fontos hozzájárulása az volt, hogy 1982-ben, *Kohmotóval, Nightingale*-lel és *den Nijs*-szel írt (TKNN, [3]) cikkében rámutatott: a kvantumos Hall-effektus kulcsa, hogy a mágneses tér az anyag tömbi részének topológiáját módosítja. Ha a mágneses tér akkora, hogy minden elemi cellára a $h/e$ elemi fluxuskvantum racionális, $p/q$-ad része esik, a teret és a kristályrács potenciálját egyszerre lehet figyelembe venni egy nagyobb mágneses elemi cella bevezetésével. A nagyobb elemi cella miatt az eredeti energiasávok alsávokra esnek szét, amelyeket al-energiarések (subgap) választhatnak el egymástól. A mágneses teret hangolva ezek az alrések, mint azt néhány évvel korábban *Hofstadter* numerikusan felfedezte, fraktálstruktúrájú, úgynevezett Hofstadter-pillangót rajzolnak ki. Ha a kémiai potenciál egy alrésbe esik, a Hall-vezetőképesség a lineáris válaszelméletből, mint az áram válasza az $U_H$ perturbációra meghatározható. TKNN eredménye ebből a számolásból:

$$\nu = \frac{i}{2\pi} \sum_{m \in \mathrm{occ}} \int_{BZ} \mathrm{d}^2 k \, \nabla_k \times \langle u_m(k) | \nabla_k | u_m(k) \rangle, \qquad (9)$$

ahol az $m$ szerinti összeg a betöltött alsávokra vonatkozik, a $k$-integrál a mágneses Brillouin-zónán történik, az $|u_m(k)\rangle$ pedig az $m$-edik energia-sajátállapot. A Stokes-tétel alkalmazásával könnyű belátni, hogy $\nu$ valóban egésznek adódik. Matematikusabb nyelven megfogalmazva, TKNN szerint a Hall-vezetőképességet meghatározó $\nu$ a betöltött állapotokra való projektor első Chern-száma a mágneses Brillouin-zónában. A TKNN-eredmény akkor lett igazán teljes, amikor társszerzőkkel Thouless 1985-ben megmutatta [4], hogyan lehet az érvelést a rendezetlen, illetve a kölcsönható esetre is átültetni.

A technikai jellegű 1982-es TKNN-számoláshoz Thouless 1983-ban a „Thouless-pumpa” szemléletes képét csatolta. Azt mutatta meg, hogy ha a kvantumos Hall-effektus leírásánál a $k_y$ kristályimpulzust $2\pi t/(Ta)$ időre cseréljük ($a$ a rácsállandó, $T$ egy tetszőlegesen megválasztható periódusidő), a kétdimenziós kvantumos kristály problémáját egy periodikusan pumpált egydimenziós kvantumos lánc problémájára képezhetjük le. Ha $T$ elegendően nagy, a pumpálás adiabatikusnak tekinthető, és a $\nu$ egész szám ilyenkor az egy ciklus során a lánc mentén pumpált töltés mennyiségét adja meg. Ez a Thouless-pumpa, ami a Hall-effektus megértéséhez nyújt segítséget, 2015 óta nemcsak elméleti konstrukció: lézerrel csapdázott ultrahideg atomokon ekkor közvetlenül, kísérletileg megvalósították a jelenséget.

Thouless (és különböző társszerzői) munkája azt mutatta meg, hogy a kvantumos Hall-effektusra valóban érdemes egyfajta topologikus fázisátalakulások sorozataként tekintenünk. A fázisokat jellemző topologikus invariáns a Chern-szám, amely, szemben a KT-átalakulással, itt nem a rendszer valós térbeli, hanem az impulzustérbeli topológiáját adja meg.

Rögtön adódik a kérdés: nem lehet-e ezt a topológiát mágneses tér helyett valami mással megváltoztatni, azaz létezik-e kvantumos Hall-effektus Landau-nívók nélkül? A kérdésre Haldane adott pozitív választ 1988-ban, megmutatva, hogy egyrétegű grafitban (amit ma grafénként ismerünk) a másodszomszéd-hoppingoknak megfelelő komplex fázisokat adva, a Chern-számot, és így a minta Hall-vezetőképességét ugrásszerűen lehet hangolni. Azonban a komplex fázisokat Haldane kénytelen volt „kézzel beírni”, illetve egy játékmodellben egy olyan inhomogén mágneses térből származtatni, amely nagy értékeket felvéve az elemi cella közepén kifelé, a szélein befelé mutat, oly módon, hogy az összegzett fluxus az elemi cellára eltűnik. Ebből a játékmodellből nőtt ki két évtizeddel később a topologikus szigetelők területe.

## Kvantumos spinláncok és az anyag szimmetria által védett topologikus fázisai

Haldane esetén a Nobel-díj Bizottság indoklása a díjazott két 1983-ban írt egyszerzős munkáját emeli ki, amelyek az antiferromágneses Heisenberg (AFH) spinlánc alacsony energiás gerjesztéseinek vizsgálatával foglalkoznak [5, 6]. Mindkét munkát már Los Angeles-ből küldte be publikálásra a szerző, viszont a vizsgálatok még visszanyúlnak a korábbi Grenoble-ban töltött időkre is. Ugyancsak Grenoble-ban születtek Haldane fontos új eredményei az egydimenziós elektrongáz leírására szolgáló, úgynevezett Luttinger-folyadék témakörében [10].

Ami az AFH-spinláncot illeti, azt a következő Hamilton-operátor definiálja:

$$\mathcal{H}_H = J \sum_i \vec{S}_i \vec{S}_{i+1}, \qquad (10)$$

ahol $J > 0$, $\vec{S}_i$ az $i$-edik rácshelyen lévő spinoperátor és $S$ egész vagy félegész értékű lehet. Egzakt eredmények szerint az $S = 1/2$-es modellben a gerjesztésekben az energiarés eltűnik és hasonló igaz a klasszikus határesetet jelentő $S \to \infty$ modellre is. Tetszőleges $S$ értékre ugyan nem voltak eredmények, mégis a nyolcvanas évek elejéig általánosan elfogadott nézet volt, hogy az energiarés nélküli viselkedés $S$-től függetlenül teljesül.

Haldane korszakos, új eredményeket hozó munkáiban a fenti problémát nagy $S$ értékekre térelméleti módszerekkel vizsgálta [5, 6]. Először megmutatta, hogy a modell alacsonyenergiás gerjesztéseit a következő hatásintegrált tartalmazó rendszer szolgáltatja:

$$S_{NLS} = \frac{1}{2g}\int \mathrm{d}t\,\mathrm{d}x\left(\frac{1}{v}(\partial_t \vec{n})^2 - v(\partial_x \vec{n})^2\right), \tag{11}$$

ahol $\vec{n}$ egy háromdimenziós egységvektor, amely az antiferromágneses rendparaméter lassú változását írja le, $v$ a spinhullám sebessége és a $g$ csatolási állandó értéke $1/2S$. Ez a modell az $O(3)$ nemlineáris szigmamodell, amely az akkor már ismert eredmények szerint véges energiaréssel rendelkezik. Ennek minden $S$-re igaznak kellett volna lennie, de ez nyilvánvaló ellentmondásban állt az $S = 1/2$ esetén ismert egzakt eredménnyel. A probléma feloldásában Haldane rámutatott arra, hogy az erős kvantumos fluktuációk eltérő módon viselkednek egész és félegész spinű láncok esetén. A hatásintegrált tovább analizálva egy, a (11) egyenlethez járuló, úgynevezett topologikus $\theta$ tagot származtatott:

$$S_{top} = i\frac{\theta}{4\pi}\int \mathrm{d}^2 x\, \vec{n}\,(\partial_1 \vec{n} \times \partial_2 \vec{n}), \tag{12}$$

ahol $\theta = 2\pi S$ és euklideszi koordinátákat használt $(x^1, x^2) = (it, x)$. Ez a tag a mozgásegyenlethez ugyan nem ad járulékot, viszont a fázishoz egy $\exp(i2\pi SQ)$ tényezőt szolgáltat, ahol a

$$Q = \frac{1}{4\pi}\int \mathrm{d}^2 x\, \vec{n}\,(\partial_1 \vec{n} \times \partial_2 \vec{n}), \tag{13}$$

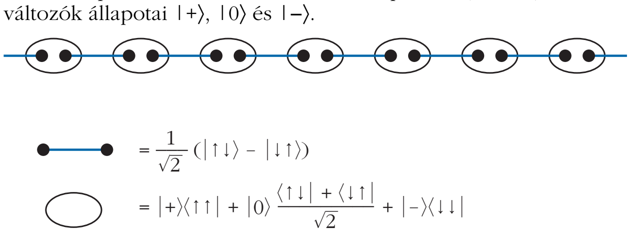
úgynevezett csavarodási szám (angolul winding number) egész értékű. $Q$ értéke az $\vec{n}$ térváltozó konfigurációjától, pontosabban annak topológiájától függ. $S$ egész értéke esetén a fázistényező mindig 1 és ezért a lánc a korábbi állítások szerint energiaréssel rendelkezik. $S$ félegész értékére a fázistényező $(-1)^Q$ különböző előjelű lehet, amely egyes tagok kiesését eredményezi. Haldane azt jósolta, hogy minden félegész spinű lánc energiarés nélküli, míg az összes egész spinű lánc energiaréssel rendelkezik. A maga idejében ez egy váratlan és meglepő jóslat volt, és az első numerikus eredmények az $S = 1$ lánc esetén még nem szolgáltattak egyértelmű igazolást.

A probléma megértéséhez nagyban hozzájárultak *Affleck, Kennedy, Lieb* és *Tasaki* (AKLT) vizsgálatai [11], akik egy közeli kapcsolatban álló modell esetén egzaktul a Haldane által jósolt véges energiaréses eredményre jutottak. Az AKLT-modell Hamilton-operátorában az $S = 1$-re vonatkozó (10) egyenletet egy bikvadratikus taggal egészítik ki:

$$\mathcal{H}_{AKLT} = \sum_i \vec{S}_i \vec{S}_{i+1} + \frac{1}{3}\sum_i \left(\vec{S}_i \vec{S}_{i+1}\right)^2, \tag{14}$$

amelynek alapállapotát mátrixszorzat-állapottal lehet felírni. Ehhez az $S = 1$ spineket két $S = 1/2$ kompozit spinnel fejezik ki, amelyek szingulett állapotban vannak a mellékelt, *3. ábra* szerint. Nyitott határfeltétel esetén a lánc két végén $S = 1/2$ spin szabadsági fokok maradnak, amelyek között a láncmérettel exponenciálisan csökkenő kölcsönhatás van. Ez az egyik első példája a spinfraktálosodásnak.

*3. ábra.* Az AKLT-modell felírása $S = 1/2$ spinváltozók segítségével (lásd Wikipedia). Az $S = 1/2$ változók állapotai $|{\uparrow}\rangle$ és $|{\downarrow}\rangle$, az $S = 1$ változók állapotai $|+\rangle$, $|0\rangle$ és $|-\rangle$.




Megjegyezzük, hogy a $CsNiCL_3$ rendszerben, amely egy $S = 1$ spinű AFH-láncot ír le, a Haldane-sejtéssel összhangban véges gerjesztési energiát mértek.

Összefoglalva elmondhatjuk, hogy az $S = 1$ spinű AFH-láncban megjósolt Haldane-fázis az anyag szimmetria által védett topologikus fázisainak prototípusát jelenti. Ebben az esetben egy nemlokális, úgynevezett sztring rendparamétert tudunk értelmezni:

$$\begin{aligned} O^z(r) &= \\ &= -\left\langle S_l^z \exp[i\pi\,(S^z_{l+1} + S^z_{l+2} + \ldots + S^z_{l+r-1})]\, S^z_{l+r}\right\rangle, \end{aligned} \tag{15}$$

amely a Haldane-fázisban véges értéket vesz fel. Az így értelmezett topologikus rend viszonylag gyenge külső perturbációk esetén robusztusan fennmarad. Példaképp említhetjük a kötésrendezetlenség esetét, viszonylag erős rendezetlenség szükséges ahhoz, hogy sztring rendparaméter és vele együtt a Haldane-féle energiarés a rendszerben eltűnjön.

## Kitekintés

*Alfred Nobel* végrendelete szerint a nevéről elnevezett díjat azon kutatóknak kell odaítélni, akik „a díjat megelőző évben az emberiség javát legjobban szolgálták”. Az évek során a Svéd Királyi Akadémia lazított a kitételen, és a díjjal legtöbbször – így idén is – évtizedekkel korábban végzett kutatást ismernek el. Az „emberiség javát” pedig sokszor talán csak a tudásvágy csillapításaként értelmezhetjük (lásd a tavalyi, neutrínóoszcillációkért, vagy a 2013-as, a Higgs-mechanizmusért, vagy akár a 2011-es, a Világegyetem gyorsulva tágulásának felfedezéséért adott díjat). Idén azonban nemcsak az absztrakt tudásvágyról van szó: Kosterlitz, Thouless és Haldane úttörő munkáiból kinőtt a topologikus szigetelők, és az erősen kölcsönható anyagok topologikus rendjének kutatása is, ez utóbbi pedig új, ígéretes utat nyitott a kvantumszámítógép megépítése felé.

A TKNN-invariánshoz hasonló impulzustérbeli topologikus invariánsok, amelyek közvetlenül megjelennek mérhető fizikai mennyiségek robusztusan kvantált értékeiben, a topologikus szigetelők [12] definiáló jellemzői. Az első elméleti jóslatot a külső tér nélküli topologikus szigetelőkre közvetlenül Haldane

1988-as, a 3. fejezetben tárgyalt munkájára építve, 2005-ben *Fu* és *Kane* adták. Azt mutatták meg, hogy a Haldane által a másodszomszéd-hoppinghoz hozzáadott fázisok ténylegesen megjelennek a grafénben a spin-pálya csatolás miatt. A grafén, Fu és Kane szerint, megfelelően alacsony hőmérsékleten két Haldane-modellként értelmezhető: kicsit leegyszerűsítve, az egyik spinbeállású vezetési elektronok a +1, a másik spinbeállásúak a −1 Chern-számot valósítják meg. Sajnos hamar kiderült, hogy grafénben a spin-pálya csatolás túl gyenge ahhoz, hogy Fu és Kane jóslata kísérletileg valaha is észlelhető legyen (a grafén gyűrődései és egyéb fluktuációk még alacsony hőmérsékleten is elmossák). Az ötlet azonban termékenynek bizonyult: 2006-ban *Bernevig, Hughes* és *Zhang* megjósolta, és 2007-ben Würzburgban *Molenkamp* csoportjában kimérték, HgTe-vékonyrétegben a spin-pálya csatolás elég erős, és itt valóban külső tér nélkül is kvantált vezetőképesség (és spin Hall-effektus) mérhető. Azóta számos egy-, két-, és háromdimenziós topologikus szigetelőanyagot szintetizáltak, az elmélet pedig a 2000-es évek végére jutott el a topologikus szigetelők univerzalitási osztályainak felírásához. Ez a „topologikus szigetelők és szupravezetők periódusos rendszere”, ami tetszőleges dimenziószám esetén megmutatja, hogy az elemi szimmetriák (időmegfordítási, részecske-lyuk, illetve az ezek kombinációjaként jelentkező királis szimmetria) milyen kombinációja szükséges ahhoz, hogy egy anyag topologikus szigetelő lehessen.

A TKNN-invariánsból kinőtt topologikus szigetelők elméletéből jósolták meg a topologikus szupravezetőkben megjelenő Majorana-fermionokat, amelyekért a 2010-es évek szilárdtest-fizikájának egyik éles versenyfutása zajlik. Ezek a kölcsönható rendszer olyan sajátmódusai, amelyeket „Zen-részecskéknek” is neveznek, mivel az egymástól távoli Majorana-fermionoknak sem energiájuk, sem töltésük, sem spinjük nincs. Mivel ezen módusok így külső terekhez nem csatolódnak, betöltési számaikban kvantuminformációt lehetne elrejteni a környezet fluktuációi okozta dekoherencia elől. Ráadásul ezen gerjesztések „fonásával” a bennük tárolt információt bizonyos mértékig manipulálni is lehet. A Majorana-fermionokat kísérletileg eddig csak áttételesen sikerült detektálni, elsőként 2012-ben Delftben, *Kouwenhoven* csoportjában, InSb-ból növesztett nanodróton, amit szupravezetővel proximitizáltak. A közvetlen kísérleti jelért folyik a mostani verseny: ez az lesz, ha Majorana-fermionokba beírunk, ott manipulálunk, majd onnan kiolvasunk kvantuminformációt. Sajnos, azonban úgy tűnik, a Majorana-fermionokban elrejtett információn nem lehet minden, a kvantumszámítógéphez szükséges műveletet fonással elvégezni.

A Haldane-lánc tulajdonságainak módszeres vizsgálata vezetett el a topologikus rend fogalmáig. Ez egy-, két-, illetve háromdimenziós erősen kölcsönható spinrácsok jellemzője, amelyeknek a termodinamikai határesetben is véges sok degenerált alapállapota van, amiket energiarés választ el a gerjesztett állapotoktól. Az alapállapotokat egymástól nem valamilyen lokális, Landau-féle rendparaméter várható értéke különbözteti meg, hanem valamilyen nagyon nemlokális sztring-rendparaméter. Ezért a topologikus rend kéz a kézben jár a hosszú távú kvantumos korrelációk kialakulásával az alapállapotban (szemben a topologikus szigetelőkkel, vagy akár a szimmetriavédett topologikus renddel, ahol a kvantumos korrelációk exponenciálisan lecsengenek). A topologikus rend másik fontos jellemzője, hogy az alapállapot felett részecskeszerű elemi gerjesztések vannak, ezen részecskék fúziós szabályaival lehet karakterizálni egy-egy topologikus rendet. A vizsgálatokat egzaktul megoldható „játékmodellek” segítik, amelyek ősatyja *Kitaev* toric-code-modellje: egy négyzetrácson definiált spinmodell, ami négyspin-kölcsönhatásokat tartalmaz. Ha a négyzetrácsot kilyukasztjuk, a rendszer alapállapota degenerálttá válik, az egymásra ortogonális alapállapotok száma a lyukak számával nő.

A manapság legígéretesebbnek tűnő kvantumszámítógép-prototípusokban a dekoherencia elleni védekezést a topologikus rend adja. A cél az úgynevezett surface code megvalósítása, ami a Kitaev-féle toric-code-modell egyfajta implementációja. A módszer hátránya, hogy így egy-egy logikai kvantumbitet többszáz fizikai kvantumbit ábrázol, de előnye, hogy a műveletek megengedett hibája 1% nagyságrendű, ami elérhető a jelenlegi technológiával. Erre épít, szupravezető kvantumbitek segítségével, a Google (UCSB+Google, Martinis-csoport, 9×1 kvantumbit), az IBM (Gambetta csoportja, 2×2 kvantumbit), de vannak ötletek a surface code implementációjára az ausztrál Kane-féle kvantumszámítógépen is (itt a kvantumbiteket szilíciumba ágyazott foszforatomok magspinje tárolja). A vezető technológiai cégek nemcsak a kísérleti, hanem az elméleti fejlesztésbe is beszálltak: a topologikus kvantumszámítás-elmélet egyik vezető csoportját, a Station Q-t, a Microsoft finanszírozza. Ez a pezsgés mutatja, hogy a topologikus fázisok és fázisátalakulások nemcsak az 1970-es és 1980-as évek fizikájának kérdéseit válaszolták meg, de a kvantumfizika jövőbeli alkalmazásának is szerves részei.

## Irodalom


1. J. M. Kosterlitz, D. J. Thouless: Long range order and metastability in two dimensional solids and superfluids. (Application of dislocation theory). *Journal of Physics C: Solid State Physics 5* (1972) L124.
2. J. M. Kosterlitz, D. J. Thouless: Ordering, metastability and phase transitions in two-dimensional systems. *Journal of Physics C: Solid State Physics 6* (1973) 1181.
3. D. J. Thouless, M. Kohmoto, M. P. Nightingale, M. den Nijs: Quantized Hall conductance in a two-dimensional periodic potential. *Physical Review Letters 49* (1982) 405.
4. Q. Niu, D. J. Thouless, Y.-S. Wu: Quantized Hall conductance as a topological invariant. *Physical Review B 31* (1985) 3372.
5. F. D. M. Haldane: Continuum dynamics of the 1-D Heisenberg antiferromagnet: Identification with the O(3) nonlinear sigma model. *Physics Letters A 93* (1983) 464.
6. F. D. M. Haldane: Nonlinear Field Theory of Large-Spin Heisenberg Antiferromagnets: Semiclassically Quantized Solitons of the One-Dimensional Easy-Axis Néel State. *Physical Review Letters 50* (1983) 1153.

7. N. D. Mermin, H. Wagner: Absence of ferromagnetism or antiferromagnetism in one- or two-dimensional isotropic Heisenberg models. *Physical Review Letters 17* (1966) 1133.
8. J. M. Kosterlitz: The critical properties of the two-dimensional xy model. *Journal of Physics C: Solid State Physics 7* (1974) 1046.
9. D. R. Nelson, J. M. Kosterlitz: Universal jump in the superfluid density of two-dimensional superfluids. *Physical Review Letters 39* (1977) 1201.
10. F. D. M. Haldane: 'Luttinger liquid theory' of one-dimensional quantum fluids. *Journal of Physics C: Solid State Physics 14* (1981) 2585.
11. I. Affleck, T. Kennedy, E. H. Lieb, H. Tasaki: Rigorous results on valence-bond ground states in antiferromagnets. *Physical Review Letters 59* (1987) 799.
12. M. Z. Hasan, C. L. Kane: Colloquium: Topological insulators. *Review of Modern Physics 82* (2010) 3045.