SSH model u 1D i 2D u svrhu prikaza uloge topologije u kvantnoj mehanici

Dario Rudec Fizički odsjek, PMF, Bijenička c. 32, 10 000 Zagreb Mentor: prof.dr.sc Hrvoje Buljan

Siječanj 2020

Sažetak

Topologija dobija veliki značaj u kvantnoj mehanici u drugoj polovici 20. stoljeća. Mnogi fenomeni u kvantnoj mehanici mogu se pojasniti zahvaljujući topološkim razlikama pojedinih materijala. Jedan od modela koji to vrlo jasno pokazuje je Su-Schrieffer-Heeger (SSH) model. Rješavanjem toga relativno jednostavnog modela lako se uviđa kako različite topološke verzije jednog sustava donose do drugačijih faza materijala



Slika 1: Topološka ekvivalentnost šalice kave i krafne. Šalica kave može glatko biti deformirana u krafnu bez pridruživanja dva dijela skupa ili kidanja.

1 Topologija u kvantnoj fizici

Topologija je grana matematike koja proučava ona svojstva geometrijskih objekata koja ostaju nepromijenjena (invarijantna) kad se oblici izobličuju rastezanjem, izvrtanjem ili gnječenjem (ne i prekidanjem ili ponovnim spajanjem djelova objekta). Primjerice, šalica čaja topološki je ekvivalentna krafni (Transformacija je prikazana na slici 1). Slično tome, nogometna lopta jest topološki ekvivalent listu papira. Gauss-Bonnet teorem:

$$\frac{1}{4\pi} \int_M \kappa dA = 1 - g, \tag{1}$$

nam govori da ako integriramo Gaussovu krivulju objekta preko površine objekta i podijelimo s 4π rezultat će biti 1-g, gdje je g broj rupa u objektu. M je objekt a κ predstavlja Gaussovu krivulju objekta. g je topološka invarijanta koja se ne mijenja malim promjenama na površini objekta. U fizici čvrstog stanja moguće je konstruirati faze koje se opisuju veličinama analognim topološkoj invarijanti. U slučaju 1D SSH za poliacetilen to je broj namatanja.

Ako termodinamički veliki sustav podlegne ma-

lenim promjenama u jednadžbama gibanja i kao posljedicu doživi naglu promjenu osnovnih i nižih pobuđenih stanja kaže se da dolazi do kvantne promjene faze. Dva su stanja u istoj fazi ako mogu biti polako transformirana jedno u drugo bez da dođe do kvantne promjene faze, a ako je to nemoguće dva su stanja u različitoj fazi. Po toj su definiciji vodiči, izolatori i supervodiči različite faze materije, a primjerice dva vodiča s malo različitom odbojnošću među elektronima iste su faze.

2 Aproksimacija čvrste veze

U fizici čvrstog stanja aproksimaciju čvrste veze koristimo kako bismo opisali elektronske vrpce materijala. U toj aproksimaciji pretpostavljamo da su atomi u čvorovima rešetke. Kada su atomi dovoljno blizu u rešetci, njihove valne funkcije nisu ortogonalne nego se pomiješaju formirajući vezajuća i antivezajuća stanja. Osim toga kada su atomi dovoljno blizu, elektroni se mogu delokalizirati tuneliranjem s atoma na atom. Tunelirajući potencijal dan je s preklopom (-t) između dva stanja na različitim ćelijama. Za jednodimenzionalni prsten dan je hamiltonijan:

$$H = -\sum_{i,j} t_{ij} |i\rangle \langle j|, \qquad (2)$$

gdje nam i i j predstavljaju poziciju čvora a $-t_{ij}$ je integral preklopa između i-tog i j-tog čvora. Na slici 2 nalazi se skica problema. Naravno iz logike problema se odmah vidi da vrijedi $t_{ij} = t_{ji}$, te da vrijedi $t_{ii} = 0$ za svaki *i*. Translacijski operator dan je s $T = \sum_i |i+1| > < i|$. Pretpostavimo li da integral preklopa ovisi samo o udaljenosti između pojedina dva čvora $(t_{i,i+n} = t_n)$ tada je hamiltonijan



Slika 2: Isječak 1D sustava.



Slika 3: Disperzija za 1D hamiltonijan uz aproksimaciju prvih susjeda. Crveni dio predstavlja popunjena stanja.

iz jednadžbe (2) funkcija translacijskog operatora:

$$H = -\sum_{n} t_n T^n.$$
(3)

Slijedi da se hamiltonijan može dijagonalizirati u bazi svojstvenih vektora operatora translacije koji su dani ravnim valovima:

$$|k\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j} e^{ikj} |j\rangle \tag{4}$$

Kada s operatorom translacije djelujemo na svojstveno stanje, dobijemo:

$$T^m|k\rangle = e^{ikma}|k\rangle.$$
⁽⁵⁾

Spektar takvoga hamiltonijana dan je s

$$H|k\rangle = \epsilon(k)|k\rangle \tag{6}$$

$$\epsilon(k) = -\sum_{n} t_n e^{-ikna} \tag{7}$$

Pošto uzimamo u obzir samo međudjelovanje prvih susjeda: $t_1 = t$ a svi drugi t_n su 0. Iz toga slijedi kosinusna relacija: $\epsilon(k) = -2tcos(ka)$. Važno je naglasiti kako je ovo disperzija za lanac identičnih atoma povezanih jednako jakim vezama. Uz to pretpostavilo se da elektroni međusobno ne interagiraju. Ako svaki atom ima po jedan slabo vezani elektron tada je formirana vrpca polupuna kako je i prikazano na slici (3).

U fizici čvrstog stanja energije su uvijek mjerene relativno prema Fermijevoj energiji. Zato je zgodno postaviti da nam fermijeva energija bude nulta energija. Kako postoje stanja za proizvoljno malene energije iznad fermijeve ovakav sistem predstavlja vodič.



Slika 4: 1D lanac, konstante rešetke a zbog Peierls nestabilnosti prelazi u rešetku konstante 2a. Smeđa boja označava elektronsku gustoću.



Slika 5: Zbog poremećaja u rešetci, konstanta rešetke postaje 2a, a Brillouinova zona dobija granice na $k = \pm \frac{\pi}{2a}$

3 Peierls-ova nestabilnost i Berry faza

3.1 Peierls-ova nestabilnost

U ovom odjeljku iznjet će se rezultati koji će nam biti presudni u daljnjem rješavanju SSH modela te interpretaciji konačnih rezultata. Za poćetak bitno je istaknuti da model iz odjeljka (2) nije stabilan (Peierls-ova nestabilnost). Na slici 4, prikazani su sustavi ekvidistantnih atoma te ravnotežni sustav ne ekvidistantnih atoma.

U normalnom slučaju kod konstante rešetke a elektronska gustoća je konstantna. Uzmemo li slučaj kada se dva po dva atoma grupiraju tada je konstanta rešetke 2a a elektronska gustoća više nije konstantna. Ona postaje periodički modulirana. Tada će ukupna energija biti veća a Brillouinova će se zona poduplati (slika 5). Tada dobivamo nove band gap-ove unutar Brillouinove zone a sustav će imati smanjenu energiju u blizinu novih band gapova. Otvara se nova šupljina koja razdvaja popunjena stanja od praznih stanja i time sustav zapravo postaje izolator umjesto vodiča.

3.2 Berry faza

Jedna od osnovnih topoloških veličina jest Berryjeva faza. Uzmimo hamiltonijan $H(\vec{R})$ koji je funkcija više parametara označenih s vektorom $\vec{R} = (R_1, R_2, ...)$. U bilo kojem trenutku za fiksan \vec{R} vrijedi vremenski neovisna Schroedingereova jednadžba:

$$H(\vec{R})|n(\vec{R})\rangle = E_n(\vec{R})|n(\vec{R})\rangle.$$
 (8)

Kako se \vec{R} mijenja u prostoru parametara duž neke putanje C nas zanima kako se mijenja stanje sustava. Postoji vrlo koristan - adijabatski teorem koji kaže da se za hamiltonijan koji se sporo mijenja sustav koji se nalazio u jednom od svojstvenih stanja, uvijek ostaje u nekom od svojstvenih stanja. Ostaje za provjeriti što se točno događa s fazom. Može se pisati: $|\psi(t)\rangle = e^{-i\theta(t)}|n(\vec{R}(t))\rangle$. Za takvo stanje vrijedi Schroedingereova jednadžba:

$$H(\vec{R}(t))|\psi(t)\rangle = i\hbar \frac{d}{dt}|\psi(t)\rangle.$$
(9)

To lako pretvorimo u diferencijalnu jednadžbu:

$$E_n(\vec{R}(t))|n(\vec{R}(t))\rangle = \hbar(\frac{d}{dt}\theta(t))|n(\vec{R}(t))\rangle + i\hbar\frac{d}{dt}|n(\vec{R}(t))\rangle$$
(10)

Iz toga slijedi:

$$E_n(\vec{R}(t)) - i\hbar < n(\vec{R}(t)) | \frac{d}{dt} | n(\vec{R}(t)) \rangle = \hbar(\frac{d}{dt}\theta(t)).$$
(11)

Za $\theta(t)$ dobijemo integral:

$$\theta(t) = \frac{1}{\hbar} \int_0^t E_n(\vec{R}(t')) dt'$$

$$-i \int_0^t < n(\vec{R}(t')) \frac{d}{dt'} |n(\vec{R}(t')) > dt'.$$
 (12)

Prvi član faze je obična dinamička faza. Negativni drugi član jest Berry faza.

$$\gamma_n = i \int_0^t < n(\vec{R}(t')) \frac{d}{dt'} | n(\vec{R}(t')) > dt'.$$
(13)

Za Berry fazu se dobija:

$$\gamma_n = i \int_0^t < n(\vec{R}(t') | \nabla_{\vec{R}} | n(\vec{R}(t')) > \frac{d\vec{R}}{dt'} dt' =$$
(14)

$$= i \int_{\vec{R}_0}^{R_t} < n(\vec{R}) |\nabla_R| n(\vec{R}) > d\vec{R}$$
 (15)

$$= \int_{\vec{R}_0}^{\vec{R}_t} \vec{A}_n(\vec{R}) d\vec{R},$$
 (16)



Slika 6: Lanac s 2 atoma u jediničnoj ćeliji, s prikazanom jediničnom ćelijom i s prikazanom konstantom rešetke 2a.

gdje je Berry potencijal dan s:

$$\vec{A}_n(\vec{R}) = i < n(\vec{R}) | \nabla_R | n(\vec{R}) > .$$
 (17)

Pomnožimo li stanja globalnom fazom, dinamika sustava se ne mijenja-baždarna invarijantnost. Berry potencijal nije baždarno invarijantan:

$$\vec{A}_n(\vec{R}) \to \vec{A}_n(\vec{R}) - \frac{\partial}{\partial \vec{R}} \chi(\vec{R}).$$
 (18)

Kao posljedica, Berry faza se mijenja:

$$-\int_{C} \frac{\partial}{\partial \vec{R}} \chi(\vec{R}) d\vec{R} = \chi(\vec{R_0}) - \chi(\vec{R_t}).$$
(19)

Iz ovoga se vidi da je Berry faza baždarno invarijantna dok je putanja C zatvorena. Ta veličina očituje se u mnogim poglavljima fizike kao što je Aharonov-Bohm efekt.

4 SSH model u 1D i 2D

4.1 Beskonačni SSH lanac

U ovom poglavlju uvodi se SSH (Su-Schrieffer-Heeger) model. Prvo se postavlja model u 1D i 2D. dobiva se energetski spektar a potom se diskutira kako SSH model daje različite rezultate za različite topološke verzije lanca istog sastava. SSH model primjenjuje se na 1D rešetku, odnosno lanac s dva jednaka atoma po ćeliji. Dva atoma označavamo s A i B. Konstanta rešetke dana je s 2a, a mi odabiremo 2a=1 zbog jednostavnijeg računa (Pogotovo što se numeričkog rješenja tiče).

U SSH modelu elektroni nemaju spin i radi se s jednim elektronom po jediničnoj ćeliji. Iz toga se vidi da su jedini stupnjevi slobode elektrona skok s atoma na atom unutar jedne ćelije te skok s atoma na atom između susjednih ćelija. Potencijal skoka za skokove unutar ćelije označava se s v. Potencijal skoka među ćelijama označava se s w. Hamiltonijan čvrste veze dan je s:

$$H = \sum_{n=1}^{N} (|n, B| > < n, A| + h.c.)$$

+ $w \sum_{n=1}^{N} (|n+1, A| > < n, B| + h.c.).$ (20)



Slika 7: Disperzijske relacije za različite vrijednosti parametara v i w.

h.c. označava hermitski konjugirani član ispred sebe, n označava broj ćelije a A odnosno B o kojem se atomu unutar ćelije radi. Prvo će se iznjeti disperzijska relacija ovakvog materijala u bulku, odnosno u rješavanju će se pretpostaviti da se lanac savija u prsten odnosno da je beskonačan kako bi se izbjegli rubni uvjeti. Radi se u Hilbertovom prostoru koji je sazdan od dva dijela - $H_{vanjsko} \otimes H_{unutarnje}$. Kako je sustav translacijski invarijantan možemo uraditi Fourierov transformat pa raditi u prostoru impulsa:

$$|n\rangle \otimes |A(iliB)\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k} e^{ikn} |k\rangle \otimes |A(iliB)\rangle.$$
(21)

Taj se izraz uvrsti u hamiltonijan i nakon razdvajanja unutarnjeg i vanjskog djela dobije se:

$$H = |k| < k| \otimes [(v + e^{ik}w)|B| < A| + (v + e^{-ik}w)|A| < B|].$$
(22)

Napiše li se to kompaktno $H = \sum_{k} |k > H(k) < k|$, izraz (22) može se kompaktnije zapisati:

$$H(k) = \begin{pmatrix} 0 & v + e^{ik}w \\ v + e^{-ik}w & 0 \end{pmatrix}.$$
 (23)

To je unutarnji hamiltonijan. Puni hamiltonijan možemo blok-dijagonalizirati u N takvih malih hamiltonijana. Kada se dijagonalizira ta 2X2 matrica dobije se disperzijska relacija koja ovisi o k te o parametrima v i w:

$$E(k) = \pm \sqrt{v^2 + w^2 + 2vw\cos(k)}.$$
 (24)

Svojstvena stanja dana su s:

$$|\pm k\rangle = \left(\begin{array}{c} \pm e^{-i\phi(k)} \\ 1 \end{array}\right) \tag{25}$$

gdje je $\phi(k)$ dan s:

$$\phi = tan^{-1} \left(\frac{wsink}{v + wcosk}\right). \tag{26}$$

Na slici 7 prikazane su disperzije za različite vrijednosti parametara v i w. Kada su v i w različiti procjep je otvoren pa se radi o izolatoru, a kada su v



Slika 8: Putanje vektora $\vec{h}(k)$ za različite vrijednosti parametara v i w.

i w jednaki ako je Fermi nivo na 0, radi se o metalu odnosno vodiču. Čini se da je problem simetričan u odnosu na zamjenu v i w. No topološki aspekt ovoga problema skriven je u svojstvenim stanjima. Hamiltonijan izražen preko Paulijevih matrica:

$$H(k) = \vec{h} \cdot \vec{\sigma}. \tag{27}$$

Dobijamo sljedeće izraze:

$$h_x(k) = v + w \cos k \tag{28}$$

$$h_y = wsink \tag{29}$$

$$h_z(k) = 0 \tag{30}$$

Skica $h_x, h_y i h_z$ prikazana je na slici (8). Pogledajmo sada odnos između ovih zatvorenih putanja i točke ishodišta odnosno sredine. Za w > v putanja prolazi oko ishodišta koordinatnog sustava, za w = v putanja prolazi kroz ishodište a za w < vputanja ne obilazi ishodište. Brillouinova zona je periodična i ima topologiju prstena. Pošto je periodična integracijom Berry potencijala preko Brillouinove zone odgovara zatvorenoj krivulji u parametarskom prostoru i te će odgovarati baždarno invarijantnoj Berry fazi. Berry faza dana je s:

$$A(k) = i < -(k) \left| \frac{d}{dk} \right| - (k) > = -\frac{1}{2} \frac{d\phi}{dk}.$$
 (31)

Integrira li se Berry faza po Brillouineovoj zoni dobije se:

$$\frac{-1}{\pi} \oint A(k)dk = 1, v < w.$$
(32)

$$\frac{-1}{\pi} \oint A(k)dk = 0, v > w. \tag{33}$$

$$\frac{-1}{\pi} \oint A(k)dk = nedefinirano, v = w.$$
(34)

Ovaj rezultat zapravo dovodi vezu s brojem namatanja ν . Jednadžbe (32)-(34) slične su jednadžbi (1). Analogija se povlači između Gaussove krivulje i Berry potencijala, a uloga višestrukosti analogna je Brillouinovoj zoni. Topološka invarijantna g odgovara broju namatanja. Malene promjene Berry potencijala ili hamiltonijana neće unjeti velike promjene u integral po cijeloj zoni pa je broj namatanja nepromjenjen. Dakle po definiciji faze iz uvoda



ovoga rada ostaje se u istoj fazi. A kada se prelazi iz sustava v > w preko v = w u v < w dolazi do faznog prijelaza. Ovo je savršen primjer topološkog faznog prijelaza.

4.2 Konačni SSH lanac

Da se pogleda kakve točno fizikalne posljedice ima drugačiji broj namatanja za dvije različite faze valja promotriti konačni SSH lanac. Na slikama 9 i 10 prikazani su konačni SSH lanci u ekstremnim slučajevima v = 0 i w = 0.

U tom ekstremnom slučaju lanac se dimerizira. Iz toga odmahmožemo pretpostaviti da takvi lanci uopće neće biti vodljivi. Naime lanac je prekinut. U slučaju v = 0 na svakom rubu imamo po jedan izolirani lokalizirani atom.

Kako nema translacijske invarijantnosti, rješavanje konačnog hamiltonijana bitno se komplicira. Egzaktan hamiltonijan

unosi se u python te računalo izračunava energijski spektar. Spektri za različite parametre v i w prikazani su na slikama (11) i (12). Odavde se vidi da su se očekivanja obistinila, za W = 0 nema stanja nulte energije, dok za v = 0 imamo stanja nulte energije - lokalizirane valne funkcije izoliranih atoma. Stanja nulte energije (tj. lokalizirana) ne postoje samo za granicu kada je v = 0. Ona postoje čak i za stanja kada je v nešto malo veći od 0. Postavi li se Fermi energija na nulu, sustav ima procijep za w = 0 te je izolator. Kako za slučaj v = 0



Slika 11: w=1



Slika 12: v=1

imamo nulto energetska stanja, ne možemo biti sigurni u izoliranost toga slučaja. Našli smo fizikalnu posljedicu različitih topologija - postojanje rubnih stanja. Izolator bez rubnih stanja nazivamo trivijalnim izolatorom dok izolator s rubnim stanjima nazivamo ne trivijalni izolator. Ova dva stanja povezana su topološkim faznim prijelazom zatvaranja procjepa. Iz ovoga slijedi da gledajuči bulk materijala, te računajući broj namatanja dobivamo podatak o postojanju rubnih vodljivih stanja.

4.3 Beskonačna 2D rešetka s izmjenjivim vezama

U ovom poglavlju izlažu se rezultati za 2D sustav. Sustav se može zamisliti tako da postavimo beskonačno mnogo beskonačnih lanaca jedan ispod drugoga. Tada jedinična ćelija ima 4 atoma. Hamiltonijan se dobija na isti način kao i u 1D samo u









Slika 14: v=3, w=2



Slika 16: v=2, w=3

2D slučaju imamo 4X4 matrice za pojedinu ćeliju:

$$\begin{pmatrix}
0 & v + we^{ik_x} & v + we^{-ik_y} & 0 \\
v + we^{-ik_x} & 0 & 0 & v + we^{-ik_y} \\
v + we^{ik_y} & 0 & 0 & v + we^{ik_x} \\
0 & v + we^{ik_y} & v & v + we^{-ik_x} \\
& (36)
\end{pmatrix}$$

Za disperzijske relacije dobije se:

$$E_{1,2,3,4} = \pm \sqrt{2} [(s^2 + t^2 + st(cosk_x + cosk_y)) + \sqrt{s^2 + t^2 + st(cosk_x + cosk_y)^2 - s^2 t^2 (cosk_x - cosk_y)^2}]^{1/2} H = (37)$$

Na slikama (13), (14), (15), (16), (17) prikazane su disperzijske relacije za različite vrijednosti parametara v i w. Ponovno se vidi da su disperzijske relacije simetrične na zamjenu jakosti preskoka v odnosno w. Osim toga vidi se da u ovom slučaju nemamo rascjepljenje za slučaje v < w i v > w pa ovisno o sustavu ako vi Fermijeva energija bila na razini 0 imali bismo vodič i u ta dva slučaja i za slučaj kada je $v\,=\,w$ tako da se zasada ne može naslutiti da bi se radilo o topološkom faznom prijelazu. Unatoč tome, Problem se rješava i za konačan sustav. Odabere li se rešetka od samo 6X6 atoma,

dobije se matrica od 36 stupaca i 36 redaka. Dio matrice (koliko stane) jest:

1	0	v	0	0	0	0	v	0	0	0 \	
[v	0	w	0	0	0	0	v	0	0	
	0	w	0	v	0	0	0	0	v	0	
	0	0	v	0	w	0	0	0	0	v	
	0	0	0	w	0	v	0	0	0	0	
	0	0	0	0	v	0	0	0	0	0	
	v	0	0	0	0	0	0	v	0	0	
	0	v	0	0	0	0	v	0	w	0	
	0	0	v	0	0	0	0	w	0	v	
ĺ	0	0	0	v	0	0	0	0	v	0 /	
										(38	;)

Matrica se unosi u python te se dobija ovisnost energije o parametrima v i w. Na slikama (18) i (19) prikazane su ovisnosti energije o parametrima viw. U oba se slučaja vidi postojanje nulte energije i za v=0 i za w=0, tako da u oba slučaja imamo vezana rubna izolirana stanja. Ovaj nam rezultat i dalje ne govori ništa o tome postoji li u 2D slučaju naizmjenične snage preskoka topološki fazni prijelaz.



Slika 18: w=1

1.5

2.0

2.5

3.0

1.0

5 Zaključak

0.0

0.5

Rješio se SSH model za periodički i neperiodički slučaj. U 1D se prekrasno vide topološki fazni prijelazi dok se u 2D u ovom slučaju to ne vidi. u 1D postoje dva različita rješenja. Vodljivo za v=w i nevodljivo za $v \neq w$. Dvije nevodljive faze čine se iste po disperzijskoj relaciji. No pokaže se da prava razlika dolazi proučavanjem broja namatanja koji se izračunava iz svojstvenih stanja. Broj namatanja se povezao s postojanjem rubnih vodljivih stanja na rubovima konačnog SSH lanca. Pokaže se da su faze za v > w i v < W različite jer jedna ima vodljive rubove a druga ne. Dakle pokaže se da različiti brojevi namatanja izračunati u bulku materijala određuju postojanje (netrivijalni slučaj) odnosno nepostojanje (trivijalni slučaj) rubnih vodljivih stanja na rubu.



Slika 19: v=1

Literatura

- Navketan Batra and Goutam Sheet Understanding Basic Concepts of Topological Insulators Through Su-Schrieffer-Heeger (SSH) Model
- [2] Li-Yang Zheng, Vassos Achilleos Observation of edge waves in a two-dimensional Su-Schrieffer-Heeger acoustic network
- [3] John Michael Kosterlitz Topological Defects and Phase Transitions Nobel Lecture, December 8, 2016
- [4] Robert B. Laughlin Fractional Quantization, Nobel Lecture, December 8, 1998