Топологические явления в физике. Цепочка SSH

Антоненко Даниил

25 марта 2017

На этом занятии речь пойдет о примерах того, каким образом симметрия и топология проявляют себя в физических системах.

Цепочка Su-Schrieffer-Heeger

Рассмотрим одномерную модель сильной связи, которая представляет собой цепочку из $2N$ узлов, на которых могут находиться электроны (оператор рождения c_i^+ , $\{c_i, c_j^+\} = \delta_{ij}$), с гамильтонианом, представляющим собой прыжки между ближайшими соседями с чередующимися амплитудами¹.

$$\mathcal{H} = \sum_i t_1 c_{2i+1}^+ c_{2i} + t_2 c_{2i+1}^+ c_{2i+2} + \text{h.c.}$$

Будем считать t_1 и t_2 вещественными для простоты.

Элементарная ячейка состоит из двух узлов, поэтому введем для них индивидуальные буквы и новый индекс, нумерующий не узлы, а ячейки: $a_l = c_{2i}$, $b_l = c_{2i+1}$. Тогда гамильтониан запишется в виде:

$$\mathcal{H} = \sum_l t_1 b_l^+ a_l + t_2 b_l^+ a_{l+1} + \text{h.c.} = \begin{pmatrix} a_1^+ & a_2^+ & \dots & b_1^+ & b_2^+ & \dots \end{pmatrix} H \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ b_1 \\ b_2 \\ \vdots \end{pmatrix},$$

$$H = \begin{pmatrix} 0 & B \\ B^+ & 0 \end{pmatrix}_{SL}.$$

В последней записи явно выделено пространство подрешеток (SubLattices), в котором Гамильтониан имеет блочный вид с нулевыми матрицами вдоль основной диагонали. В этом пространстве можно ввести обычные матрицы Паули σ_i .

Киральная симметрия

Легко видеть, что матрица гамильтониана имеет компоненты пропорциональные только σ_x и σ_y , а это означает, что он антикоммутирует с σ_z :

$$\sigma_z H \sigma_z = -H$$

Последнее утверждение называется *киральной симметрией*. То, что она реализуется именно матрицей σ_z — свойство базиса, в других базисах мы бы имели

$$\boxed{CHC = -H}$$

с некоторой матрицей C , такой, что $C^+C = 1$, $C^2 = 1$.

Заметим, что она является приближенной, так как в реальной физической задаче не запрещены прыжки между соседями, следующими за ближайшими, а также сдвиги энергии электрона на узле, что приводит к появлению в гамильтониане членов, диагональных в пространстве SL и нарушает киральную симметрию.

Из симметрии следует, что если имеется уровень с энергией E :

$$H\psi = E\psi,$$

¹Такая модель может служить для описания молекулы полиацетилена, точнее, подсистемы его π -электронов

то есть и уровень $\mathcal{C}\psi$ с энергией $-E$:

$$H\mathcal{C}\psi = \mathcal{C} \cdot \mathcal{C}H\mathcal{C} \cdot \psi = -\mathcal{C}H\psi = -E\mathcal{C}\psi. \quad (1)$$

Таким образом, у киральных систем спектр симметричен по отношению к преобразованию $E \rightarrow -E$.

Диагонализация гамильтониана

Наложим периодические граничные условия, отождествив $2N + 1$ и 1 узлы.

Так как в системе имеется трансляционная симметрия, выполним каноническое преобразование к состояниям, собственным для оператора трансляции, то есть сделаем преобразование Фурье:

$$a_l = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k \tilde{a}_k e^{ikl}, \quad a_l^+ = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k \tilde{a}_k^+ e^{-ikl}, \quad k = \frac{2\pi n}{L} \in [-\pi, \pi].$$

и аналогично для операторов b_l .

Легко видеть, что коммутационные соотношения для новых операторов $\tilde{a}_k, \tilde{b}_k$ имеют правильный вид $\{\tilde{a}_k, \tilde{a}_{k'}^+\} = \delta_{kk'}$, $\{\tilde{b}_k, \tilde{b}_{k'}^+\} = \delta_{kk'}$, то есть преобразование действительно является каноническим.

Гамильтониан преобразуется к виду:

$$\mathcal{H} = \sum_k t_1 \left(\tilde{a}_k^+ \tilde{b}_k + \tilde{b}_k^+ \tilde{a}_k \right) + t_2 \left(\tilde{b}_k^+ \tilde{a}_k e^{ik} + \tilde{a}_k^+ \tilde{b}_k e^{-ik} \right) = \sum_k \begin{pmatrix} \tilde{a}_k^+ & \tilde{b}_k^+ \end{pmatrix} H_k \begin{pmatrix} \tilde{a}_k \\ \tilde{b}_k \end{pmatrix}.$$

матрица Блоховского гамильтониана имеет вид:

$$H_k = \begin{pmatrix} 0 & t_1 + t_2 e^{-ik} \\ t_1 + t_2 e^{ik} & 0 \end{pmatrix}_{SL} = (t_1 + t_2 \cos k) \sigma_x + t_2 \sin k \sigma_y.$$

Осталось выполнить диагонализацию блока 2×2 при каждом k . Для нахождения уровней энергии достаточно решить уравнение $\det(H_k - \epsilon_k) = 0$, которое дает

$$\epsilon_k = \pm \sqrt{(t_1 + t_2 \cos k)^2 + t_2^2 \sin^2 k} = \pm \sqrt{t_1^2 + t_2^2 + 2t_1 t_2 \cos k}.$$

Видно, что самые близкие к нулю уровни соответствуют $k = \pi$ если $t_1 t_2 > 0$ и $k = 0$, если $t_1 t_2 < 0$. В обоих случаях щель в спектре равна $E_{\text{gap}} = 2\sqrt{t_1^2 + t_2^2 - 2|t_1 t_2|}$. При $|t_1| = |t_2|$ E_{gap} обращается в ноль и щель закрывается.

Топологические фазы объемной задачи в термодинамическом пределе

Рассмотрим термодинамический предел $N \rightarrow \infty$, в котором k принимает произвольные значения из отрезка $[-\pi, \pi]$.

Точки закрытия щели в спектре $|t_1| = |t_2|$ разделяют пространство параметров гамильтониана (t_1, t_2) на две области $|t_1| < |t_2|$ и $|t_1| > |t_2|$, в обеих цепочка имеет щель в спектре и является изолятором. Попробуем найти некоторое *топологическое свойство*, отличающее эти области друг от друга. На уровне спектра существенных различий не видно!

Общий Блоховский гамильтониан в пространстве 2×2 определяется требованием унитарности и раскладывается по матрицам Паули и единичной матрице (если коэффициент перед последней — константа, то от нее можно избавиться сдвигом энергии):

$$H_k = h_0(k) + \mathbf{d}(k) \cdot \boldsymbol{\sigma} = h_0(k) + d_x(k)\sigma_x + d_y(k)\sigma_y + d_z(k)\sigma_z.$$

В нашем случае киральная симметрия накладывает дополнительное ограничение $h_0 = d_z = 0$ и

$$H_k = d_x(k)\sigma_x + d_y(k)\sigma_y,$$

Так как мы исследуем зашеченные области, имеется условие $\mathbf{d} \neq 0$ для любых k .

В нашей задаче зона Бриллюэна представляет собой окружность S^1 (отрезок $[-\pi, \pi]$ с отождествленными концами). Блоховский гамильтониан отображает окружность на плоскость (d_x, d_y) с выколотой точкой $(0, 0)$:

$$H : S^1 \rightarrow \mathbb{R}^2 \setminus \{0\}.$$

Легко видеть, что можно ввести *топологическое число* w , принимающее целые значения — количество оборотов образа окружности вокруг нуля². Все гамильтонианы разбиваются на счетное число топологических фаз, соответствующих различным значениям w , поэтому такая система называется топологическим $\mathbb{Z}$ -изолятором. По соображениям непрерывности

²Классификация отображений S^1 в целевое пространство с точностью до непрерывных деформаций называется *первой гомотопической группой* π_1 . Это действительно группа, так как отображения можно складывать (последовательное прохождение двух траекторий) и брать обратное; также имеется единичное отображение. В нашем случае $\pi_1(\mathbb{R}^2 \setminus \{0\}) = \mathbb{Z}$.

невозможно перевести гамильтониан из одной фазы в другую непрерывной деформацией (без закрытия щели!). В одном топологической фазе гамильтонианы друг в друга деформируются.

Конкретно в нашей задаче

$$d_x = t_1 + t_2 \cos k, \quad d_y = t_2 \sin k.$$

и реализуются два значения чисел намотки: $w = 1$ при $|t_1| < |t_2|$ и $w = 0$ при $|t_1| > |t_2|$.

Как правило, принадлежность к одному из топологических классов проявляется в ряде физических свойств, которые устойчивы по отношению к непрерывным изменениям параметров гамильтониана, не закрывающим щель и сохраняющим симметрию.

Топологический класс — это семейство систем с заданными симметриями. В нашем случае имеется киральная симметрия и (в случае вещественных t_1 и t_2) симметрия по отношению к обращению времени, такой класс называется по историческим причинам *BDI*.³⁾ В каждом классе может существовать определенное количество топологических фаз. Если их количество отлично от единицы, то такой класс называется топологическим. Имеется классификация топологических изоляторов, записанная в виде таблицы. Сейчас мы установили, что топологическая группа класса *BDI* в 1D есть $\mathbb{Z}$.

Краевые моды

Оказывается, что нетривиальные топологические фазы в 1D (в нашем случае при $|t_1| < |t_2|$) характеризуются тем, что в них обязательно присутствуют *краевые состояния*⁴ с *нулевой энергией*⁵. Они локализованы на краях провода (или на границе с другой топологической фазой, если менять параметры гамильтониана в пространстве). Покажем это явно в исходной параметризации через c_i . Пусть полубесконечная цепочка начинается с 0-ого узла, а оператор уничтожения нулевой моды имеет вид

$$\hat{\psi}_0 = \sum_i f_i \hat{c}_i.$$

Действие соответствующим оператором рождения не должно менять энергию системы: $\mathcal{H}\psi_0^+ |\text{state}\rangle = E_{\text{state}}\psi_0^+ |\text{state}\rangle = \psi_0^+ \mathcal{H} |\text{state}\rangle$, то есть

$$[\mathcal{H}, \psi_0^+] = 0.$$

Это уравнение, как и следовало ожидать, сводится к классическим уравнениям

$$\begin{pmatrix} & t_1 & & & \\ t_1 & & t_2 & & \\ & t_2 & & t_1 & \\ & & t_1 & & \ddots \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \\ f_3 \\ f_4 \\ \vdots \end{pmatrix} = 0. \quad (2)$$

Для облегчения вчисления вспомним про (1). Так как сейчас $E = 0$, то проекции $(1 \pm \mathcal{C})\psi_0$ либо зануляются либо также являются нулевой модой. Они содержат либо только четные f_i , либо только нечетные. В таком виде и будем искать решения. Из первого уравнение в (2) следует, что это должны быть нечетные f_i . Тогда получаем

$$f_3 = -\frac{t_1}{t_2} f_1, \quad f_5 = \left(\frac{t_1}{t_2}\right)^2 f_1, \dots$$

$$f_{2j+1} = f_1 \left(-\frac{t_1}{t_2}\right)^j.$$

Для нормируемости нужно, чтобы коэффициенты f_i не возрастали по модулю по мере удаления от края, что позволяет записать условие существования нулевой моды в виде

$$\left|\frac{t_1}{t_2}\right| < 1,$$

что совпадает с фазой, в которой гамильтониан для системы на кольце имеет топологическое число 1. Это представляет собой пример того, как топологические свойства в объеме вещества определяют наличие топологических мод на границе (bulk-boundary correspondence).

³⁾Эти названия восходят к Картановой классификации симметрических пространств, которые являются пространствами, на которых определяется эффективная теория поля (сигма-модель), описывающая соответствующие системы при наличии беспорядка.

⁴⁾В некоторых сверхпроводящих системах (отличных от тех, что рассматриваются здесь) они представляют собой *Майорановские фермионы*, что является довольно экзотичным и интересным явлением. Два Майорановских фермиона соответствуют гильбертову пространству одного обычного фермиона.

⁵⁾Их энергия строго равна нулю лишь в пределе образца бесконечной длины; для конечного образца они имеют энергию $\sim \exp(-N/\xi)$.

Краевые моды в непрерывном пределе (состояния Jackiw-Rebby)

Поучительно показать наличие краевых мод в непрерывном пределе. Рассмотрим систему, в которой сила связи *плавно* меняется от значения t_{1l} при больших отрицательных значениях пространственной координаты $x < 0$ до t_{1r} при больших положительных значениях координаты, причем $|t_{1l}| < |t_2|$, а $|t_{1r}| > |t_2|$. Таким образом, мы имеем дело с плавным переходом от топологической фазы слева к тривиальному изолятору справа. В соответствии с общим принципом ожидается наличие нулевой граничной моды, причем ее волновая функция, скорее всего, медленно меняется в пространстве в связи с плавностью изменения параметра. Поэтому ее Фурье-образ содержит преимущественно малые импульсы, что позволяет разложить Гамильтониан H_k по k , получив его низкоэнергетический предел:

$$H_k \sim (t_1 + t_2) \sigma_x + t_2 k \sigma_y.$$

Запишем уравнение Шредингера для нулевой моды в этом пределе в координатном представлении ($k \rightarrow i\partial/\partial x$):

$$(t_1(x) + t_2) \sigma_x \psi + t_2 i \sigma_y \frac{\partial \psi}{\partial x} = 0,$$

$$\frac{\partial \psi}{\partial x} = \frac{t_1(x) + t_2}{t_2} \sigma_z \psi.$$

$$\psi = \exp\left(\sigma_z \int \frac{t_1(x) + t_2}{t_2} dx\right) \xi, \quad (3)$$

где ξ — некоторый постоянный столбец.

Если так оказалось, что t_2 и t_1 разного знака (возьмем для определенности $t_2 > 0$, $t_1 < 0$), то (3) является хорошо нормированным решением при $\xi = \begin{pmatrix} 1 & 0 \end{pmatrix}^T$:

$$\psi = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \exp\left(\int \frac{t_1(x) + t_2}{t_2} dx\right).$$

Действительно, асимптотика написанного решения ведет себя, как $\exp(-|t_{1r}| + t_2)x/t_2$ при $x \rightarrow \infty$ и $\exp(-|t_{1l}| + t_2)x/t_2$ при $x \rightarrow -\infty$ и обе экспоненты затухают вследствие смены знака у $-|t_1| + t_2$.

Что же делать в случае, когда t_1 и t_2 одинакового знака? Тогда, как мы знаем из предыдущего раздела, коэффициенты f_i имеют чередующийся знак, поэтому разложение по малым импульсам в непосредственном виде несправедливо, но становится возможным после соответствующего переобозначения операторов.

Подобного рода решения возникают при решении одномерного уравнения Дирака в случае, когда масса меняет знак в зависимости от координаты (как кинк). Имеет место и более общая закономерность о наличии нулевых фермионных мод на инстантонных решениях.

Симметрично-защищенные краевые моды

Зачастую говорят о том, что краевые моды *защищены симметрией* (*symmetry-protected boundary states*). Смысл этого утверждения заключается в следующем. Представим себе, что имеются в наличии краевые моды, а в объемном спектре есть щель. Будем немного изменять гамильтониан, сохраняя симметрии. Краевые состояния могли бы при это гибридизоваться с состояниями объема и получить конечную энергию, но это бы нарушило симметрию $E \rightarrow -E$. Следовательно, они должны гибридизоваться друг с другом, однако это невозможно до тех, пор объем зашелем.

Заметим, что при предельном переходе $t_1/t_2 \rightarrow 0$ самый левый узел полубесконечной цепочки является изолированным и, собственно, и является нулевой граничной модой. Применяв изложенный аргумент, можно сделать вывод

Обобщение на большее число типов связей

Можно заметить, что для наличия киральной симметрии непринципально то, что имеется всего два типа связей и, соответственно, элементарная ячейка состоит из двух узлов. Важным является то, что прыжки осуществляются только между ближайшими соседями. Поэтому можно обобщить задачу на элементарную ячейку произвольного размера. Более того, общий анализ, проведенный на основе (2) показывает, что можно ввести произвольные прыжковые амплитуды вблизи края цепочки (выходящие на периодическую зависимость в ее глубине), тогда наличие краевой моды будет зависеть от четности числа таких дополнительных связей.