

Топологические изоляторы. Модель Su-Schrieffer-Heeger

Побойко Игорь

19 марта 2018

Симметрии в квантовой механике

«Обычные» преобразования симметрии (поворот, трансляция, отражение, и т.п.) в квантовой механике реализуются различными унитарными операторами \hat{U} : $\hat{U}^\dagger \hat{U} = 1$. Тот факт, что система обладает симметрией, означает следующее: если $|\psi\rangle$ является собственным вектором $\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$, то непременно $\hat{U}|\psi\rangle$ тоже должен обладать этим свойством: $\hat{H}\hat{U}|\psi\rangle = E\hat{U}|\psi\rangle$ — отсюда следует $\hat{U}^{-1}\hat{H}\hat{U} = \hat{H} \Leftrightarrow [\hat{H}, \hat{U}] = 0$. Наличие симметрий, как правило, позволяет упростить задачу — последнее условие означает, что гамильтониан имеет блочно-диагональный вид в базисе собственных векторов оператора \hat{U} .

Симметрия по отношению к обращению времени

Важную роль в топологии играет особый вид симметрии — симметрия по отношению к обращению времени. Он не сводится к описанному выше классу «обычных» симметрий, поскольку невозможно предоставить унитарный оператор, соответствующий этой симметрии — как мы увидим ниже, такая симметрия непременно включает в себя операцию комплексного сопряжения, и операция обращения времени \hat{T} в действительности представляет собой анти-унитарный оператор.

Определяется она следующим образом: если волновая функция $|\psi(t)\rangle$ удовлетворяет нестационарному уравнению Шрёдингера, то $\hat{T}|\psi(t)\rangle$ должна удовлетворять такому же уравнению но «в обратном времени»:

$$i\frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = \hat{H}|\psi(t)\rangle \Rightarrow -i\frac{\partial}{\partial t}\hat{T}|\psi(t)\rangle = \hat{H}\hat{T}|\psi(t)\rangle \quad (1)$$

По аналогии, мы будем говорить, что гамильтониан удовлетворяет этой симметрии, если $\hat{T}^{-1}\hat{H}\hat{T} = \hat{H} \Leftrightarrow [\hat{H}, \hat{T}] = 0$; в таком случае, мы видим, что $\hat{T}^{-1}i\hat{T} = -i$, что и показывает, что такая операция должна содержать комплексное сопряжение \hat{K} . В частности, это означает, что \hat{T} — не обычный линейный оператор, поскольку $\hat{T}(a|\psi\rangle + b|\chi\rangle) = a^*\hat{T}|\psi\rangle + b^*\hat{T}|\chi\rangle$.

В общем виде операция обращения времени может содержать ещё некоторый унитарный оператор \hat{U} , так что общий вид — следующий:

$$\hat{T} = \hat{U}\hat{K}. \quad (2)$$

Выбор оператора \hat{U} обусловлен физическими соображениями о том, как ведут себя различные физические величины по отношению к обращению времени:

1. Оператор координаты не меняет знака при обращении времени, $\hat{T}^{-1}\hat{x}\hat{T} = \hat{x}$ — поэтому в координатном базисе оператор \hat{T} действует тривиально.
2. Оператор импульса должен менять знак $\hat{T}^{-1}\hat{p}\hat{T} = -\hat{p}$. Это достигается уже приведённой операцией комплексного сопряжения и тем, что $\hat{p} = -i\frac{\partial}{\partial x}$. Поэтому если этим исчерпываются все степени свободы, то $\hat{U} = \hat{1}$.
3. Однако существенно, что если система обладает спином¹ \hat{S} , то комплексным сопряжением всё не исчерпывается — спин тоже должен менять знак при обращении времени, $\hat{T}^{-1}\hat{S}\hat{T} = -\hat{S}$. Для того, чтобы это условие выполнялось, уже необходим выбор оператора \hat{U} — в качестве него можно выбрать оператор поворота спина на угол π вокруг произвольной оси, скажем $\hat{U} = \exp(i\pi\hat{S}_y)$.

Выбор оси y при обращении времени не случаен — он связан с тем, в стандартном представлении спиновой алгебры в базисе собственных состояний \hat{S}_z , оператор \hat{S}_x всегда чисто вещественный, а \hat{S}_y — чисто мнимый; поэтому оператор \hat{U} оказывается чисто вещественным — что удобно, поскольку в таком случае $[\hat{U}, \hat{K}] = 0$. Отметим, что в частном случае спина-1/2, оператор спина выражается через матрицы Паули и $\hat{U} = \exp(i\pi\hat{\sigma}_y/2) = i\hat{\sigma}_y$.

Обычные унитарные операторы хороши тем, что для них хотя бы определены собственные вектора и собственные числа, представляющие собой фазовые множители $e^{i\varphi}$ — чего не скажешь про антиунитарные операторы. Оператор $\hat{T}^2 = \hat{U}\hat{K}\hat{U}\hat{K}$,

¹Это может быть как спин электронов, для которых мы пишем уравнение Шрёдингера (и волновая функция в таком случае представляет спинор, $\psi(x) = (\psi_\uparrow(x), \psi_\downarrow(x))$), так и буквально какой-то чисто спиновый гамильтониан, описывающий спиновую подсистему магнетика (тогда волновая функция описывает чисто спиновые степени свободы)

однако, содержит две операции комплексного сопряжения и является хорошим унитарным оператором — поэтому можно поднять вопрос о его собственных числах. Оказывается, что все собственные числа исчерпываются ± 1 — и продемонстрировать это достаточно просто, перейдя к базису, где \hat{T}^2 диагонален:

$$\hat{T}^2 = \hat{\Lambda} = \text{diag}(\Lambda_1, \Lambda_2, \dots) = \hat{U}\hat{K}\hat{U}\hat{K} = \hat{U}\hat{U}^* = \hat{U}(\hat{U}^T)^{-1} \Rightarrow \hat{U} = \hat{\Lambda}\hat{U}^T \quad (3)$$

Транспонируя ещё раз это тождество, и пользуясь тем, что $\hat{\Lambda}^T = \hat{\Lambda}$, мы получаем $\hat{U}^T = \hat{U}\hat{\Lambda} \Rightarrow \hat{U} = \hat{\Lambda}\hat{U}\hat{\Lambda}$. Последнее возможно только если $\Lambda_i^2 = 1 \Rightarrow \Lambda_i = \pm 1$. Наконец, заметим, что, как было обсуждено выше, для бесспиновых частиц $\hat{T} = \hat{K} \Rightarrow \hat{T}^2 = \hat{1}$; а если частицы обладают спином, то $\hat{T}^2 = \exp(2\pi i \hat{S}_y)$ — и для частиц с **полуцелым** спином², $\hat{T}^2 = -1$. Последнее утверждение имеет важные следствия, одно из которых — это теорема Крамерса, которая будет обсуждена выше.

Обсудим, наконец, случаи, когда \hat{T} -симметрия присутствует или нарушается. Как правило, нарушается при наличии каких-либо источников магнитного поля (это может быть как буквально внешнее магнитное поле, так и, скажем, «магнитные» примеси в системе) — как известно из курса теории поля и общей физики, магнитное поле при обращении времени тоже должно менять знак. В обобщённом смысле эта симметрия записывается как $\hat{T}^{-1}\hat{H}(B)\hat{T} = \hat{H}(-B)$, но буквально симметрией она является только при $B = 0$.

Теорема Крамерса Пусть имеется система частиц с полуцелым спином, так что $\hat{T}^2 = -1$, а гамильтониан обладает симметрией по отношению к обращению времени $[\hat{H}, \hat{T}] = 0$. Теорема Крамерса гласит, что в таком случае все уровни энергии должны быть хотя бы двукратно вырожденными³.

Действительно, во-первых, заметим, что если $\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$, то $\hat{H}(\hat{T}|\psi\rangle) = E(\hat{T}|\psi\rangle)$. Поэтому единственная возможность отсутствия двукратного вырождения — это если $\hat{T}|\psi\rangle = c|\psi\rangle$. Однако в таком случае, $\hat{T}^2|\psi\rangle = \hat{T}(c|\psi\rangle) = c^*\hat{T}|\psi\rangle = |c|^2|\psi\rangle$; с другой стороны, мы предположили что $\hat{T}^2 = -1 \Rightarrow |c|^2 = -1$ — получаем явное противоречие.

Киральная симметрия

Другой важный пример симметрии, важность которого будет обсуждена на конкретном примере модели SSH — это так называемая киральная симметрия, которая реализуется каким-то унитарным оператором $\hat{\Xi}$. Мы будем говорить, что система обладает киральной симметрией, если гамильтониан **антикоммутирует** с $\hat{\Xi}$:

$$\hat{\Xi}\hat{H}\hat{\Xi} = -\hat{H} \Leftrightarrow \{\hat{\Xi}, \hat{H}\} = 0 \quad (4)$$

Наличие киральной симметрии сразу же диктует определённые свойства спектра; в частности, если $\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$, то $\hat{H}\hat{\Xi}|\psi\rangle = -E\hat{\Xi}|\psi\rangle$, то есть спектр зеркально симметричен относительно $E = 0$.

Предположим теперь, что все «обычные» симметрии мы учли, сузив гамильтониан на соответствующий блок в блочно-диагональном представлении. В таком случае можно сделать несколько дополнительных утверждений.

1. Во-первых, киральная симметрия единственная. Действительно, если их две $\hat{\Xi}_1$ и $\hat{\Xi}_2$, то несложно убедиться, что их произведение $\hat{\Xi}_1\hat{\Xi}_2$ реализует обычную симметрию $[\hat{\Xi}_1\hat{\Xi}_2, \hat{H}] = 0$, от которых мы по предположению уже избавились.
2. Отсюда же следует, что $\hat{\Xi}^2 = 1$. Действительно, ровно по тому же рассуждению, $[\hat{\Xi}^2, \hat{H}] = 0$ — поэтому единственный способ удовлетворить предположению — это потребовать чтобы $\hat{\Xi}^2$ было тривиально⁴.

Цепочка Su-Schrieffer-Heeger

Перейдём теперь к обсуждению конкретной модели, на примере которой мы продемонстрируем некоторые из топологических рассуждений. Модель эта будет описывать бесспиновые фермионы, поэтому для неё роль Т-инвариантности тривиальна, и говорить о ней мы не будем; однако, модель эта обладает киральной симметрией, которая существенно будет влиять на топологические свойства модели.

Рассмотрим одномерную модель сильной связи с прыжками между ближайшими соседями — цепочку из $2N$ узлов, на которых могут находиться электроны. Прыжки же между ближайшими соседями будут чередоваться⁵ как t_1 и t_2 — которые мы будем для простоты считать вещественными:

²В частности, несложно видеть что для частиц со спином-1/2, $\hat{T}^2 = (i\hat{\sigma}_y)^2 = -1$

³Это утверждение тривиально, если от спина в гамильтониане зависимости нет — а для обычных электронов, как правило, она появляется только при включении магнитного поля в виде Зеемановского члена $\hat{S} \cdot \mathbf{B}$, которое нарушает симметрию по отношению к обращению времени. Тем не менее, этим всё не исчерпывается — в системе может присутствовать спин-орбитальное взаимодействие вида $\lambda_{ij}\hat{S}_i\hat{p}_j$, которое сохраняет симметрию и вводит явную зависимость от спина

⁴Разумеется, не исключён случай когда $\hat{\Xi}^2$ равно произвольному комплексному числу $e^{i\theta}$; в таком случае $\hat{\Xi}$ можно переопределить как $\hat{\Xi} \mapsto e^{-i\theta/2}\hat{\Xi}$

⁵Такая модель может служить для описания молекулы полиацетилена $(CH)_N$, точнее, подсистемы его π -электронов

$$\hat{H} = \sum_i (t_1 |2i-1\rangle \langle 2i| + t_2 |2i\rangle \langle 2i+1| + \text{h.c.}) = \begin{pmatrix} 0 & t_1 & 0 & 0 & 0 \\ t_1 & 0 & t_2 & 0 & 0 \\ 0 & t_2 & 0 & t_1 & 0 \\ 0 & 0 & t_1 & 0 & \ddots \\ 0 & 0 & 0 & \ddots & \ddots \end{pmatrix} \quad (5)$$

Свойства «объёма»

Для топологии будет важно наличие у цепочки границ; однако начнём мы обсуждение со свойств «объёма» — части системы вдали от границ. Как обычно, для этого достаточно наложить периодические граничные условия, и в таком случае достаточно просто диагонализировать этот гамильтониан, используя преобразование Фурье. Заметим, что элементарная ячейка содержит два атома, поэтому мы введём индекс n , нумерующий *элементарные ячейки* (по которому будет дальше делаться преобразование Фурье), и индекс $\alpha = 1, 2$, нумерующий атомы в элементарной ячейке: $|n, 1\rangle \equiv |2n-1\rangle$ и $|n, 2\rangle \equiv |2n\rangle$. В таком случае, гамильтониан переписывается в следующем виде:

$$\hat{H} = \sum_n (t_1 |n, 1\rangle \langle n, 2| + t_2 |n, 2\rangle \langle n+1, 1| + \text{h.c.}) \quad (6)$$

Проведём теперь преобразование Фурье, введя вектора

$$|k, \alpha\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_n |n, \alpha\rangle e^{-ikna} \Leftrightarrow |n, \alpha\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k |k, \alpha\rangle e^{ikna} \quad (7)$$

(здесь a — длина элементарной ячейки, $L = Na$ — длина цепочки; и как обычно, импульс k пробегает первую зону Бриллюэна $k \in [-\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}]$ так что $\frac{kL}{2\pi} \in \mathbb{Z}$ в силу периодических граничных условий). Непосредственной подстановкой убеждаемся, что гамильтониан принимает блочно-диагональный вид из блоков размера 2×2 :

$$\hat{H} = \sum_k (t_1 |k, 1\rangle \langle k, 2| + t_2 e^{-ika} |k, 2\rangle \langle k, 1| + \text{h.c.}) \equiv \sum_k \begin{pmatrix} |k, 1\rangle & |k, 2\rangle \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & t_1 + t_2 e^{-ika} \\ t_1 + t_2 e^{ika} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \langle k, 1| \\ \langle k, 2| \end{pmatrix} \quad (8)$$

поэтому для решения задачи нам достаточно диагонализировать матрицу

$$\hat{H}(k) = \begin{pmatrix} 0 & t_1 + t_2 e^{-ika} \\ t_1 + t_2 e^{ika} & 0 \end{pmatrix} = (t_1 + t_2 \cos ka) \hat{\sigma}_x + t_2 \sin ka \cdot \hat{\sigma}_y \equiv \mathbf{d}(k) \hat{\boldsymbol{\sigma}}, \quad \mathbf{d}(k) = \begin{pmatrix} t_1 + t_2 \cos ka \\ t_2 \sin ka \end{pmatrix} \quad (9)$$

Введённые тут матрицы Паули $\hat{\sigma}_{x,y}$ не имеют никакого отношения к спину (в задаче такой степени свободы вообще нет), а действуют на пространстве **подрешёток** (которые как раз нумеруются индексом $\alpha = 1, 2$). Тем не менее, по формальной аналогии со «спином в магнитном поле» мы знаем, что спектр гамильтониана вида $\hat{H} = \mathbf{B} \hat{\boldsymbol{\sigma}}$ представляет собой пару чисел $\pm |\mathbf{B}|$. В нашем случае это даёт две ветви закона дисперсии квазичастиц:

$$\boxed{\varepsilon(k) = \pm |\mathbf{d}(k)| = \pm \sqrt{t_1^2 + t_2^2 + 2t_1 t_2 \cos ka}} \quad (10)$$

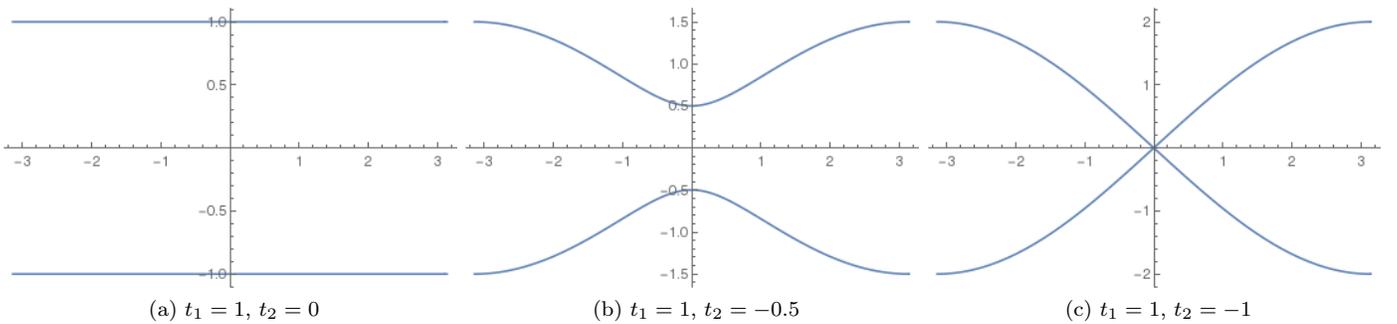


Рис. 1: Закон дисперсии $\pm \varepsilon(k)$

Такая симметрия спектра является проявлением киральной симметрии исходной задачи — несложно видеть, что $\{\hat{\sigma}_z, \hat{H}\} = 0$. В свою очередь киральная симметрия тут возникает из-за того, что «прыжки» происходят только между узлами из различных подрешёток; добавление прыжков вида $t' |2i\rangle \langle 2i+2|$ её нарушат, в то время как добавление прыжков вида

$t'' |2i\rangle \langle 2i + 3|$ — нет. Отметим также, что киральная симметрия устойчива к беспорядку в значениях самых прыжков t_1 и t_2 — для неё вовсе не обязательно наличие трансляционной симметрии, и исходный гамильтониан антикоммутирует с $\hat{\sigma}_z$ при произвольных значениях прыжков (в таком случае оператор $\hat{\sigma}_z$ нужно воспринимать как тензорное произведение $(\hat{\sigma}_z)_{SL} \otimes \hat{\mathbb{I}} = \text{diag}(1, -1, 1, -1, \dots)$; SL тут означает SubLattices — подрешётки). Повторимся, это верно только если отсутствуют прыжки между атомами из одной подрешётки.

Между двумя ветвями спектра имеется щель, $\Delta = ||t_1| - |t_2||$, достигается при $k = \pm \frac{\pi}{a}$ если t_1 и t_2 одного знака, и при $ka = 0$ если знаки противоположны. Мы будем обсуждать многоэлектронную задачу в случае, когда химический потенциал находится в щели, так что нижняя зона полностью заполнена, а верхняя — пустая; в таком случае наличие щели делает систему изолятором. Это — пример **топологического изолятора**, поскольку, как мы увидим дальше, данная модель демонстрирует некоторые топологических свойств.

Топологические фазы объёмной задачи в термодинамическом пределе

Важнейшую роль в топологической науке играет понятие **адиабатической связности** на пространстве гамильтонианов — последнее параметризуется значениями прыжков (t_1, t_2) . Мы будем говорить, что точки (t_1, t_2) и (t'_1, t'_2) адиабатически связаны, если можно совершить адиабатическое изменение параметров гамильтониана, которое переводит одно в другое. В топологической науке адиабатичность важна, поскольку **топологические инварианты**, о которых мы дальше будем говорить, как правило принимают какой-то дискретный набор значений и, как следствие, не могут измениться при плавном изменении параметров гамильтониана.

Чтобы адиабатичность имела место, необходимо, чтобы система в процессе всегда оставалась изолятором — ведь в случае закрытия щели расстояние между соседними уровнями энергии многочастичной задачи ведёт себя как $\propto \frac{1}{N}$ и в термодинамическом пределе пропадает, из-за чего условию адиабатичности оказывается невозможно удовлетворить. Поэтому топологические фазы должны быть разделены поверхностями, на которых щель закрывается; в нашем случае, это линии $|t_1| = |t_2|$.

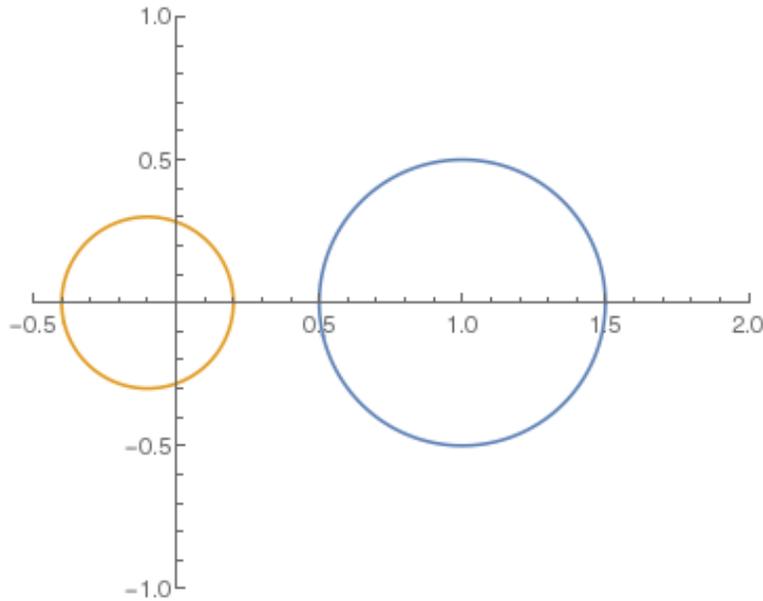


Рис. 2: Параметрические кривые вектора $\mathbf{d}(k)$ при $k \in [-\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}]$. Синяя — $t_1 = 1, t_2 = -0.5$; оранжевая — $t_1 = -0.1, t_2 = -0.3$

Оказывается достаточно просто увидеть, чему соответствуют топологические фазы чисто геометрически. Действительно, для гамильтониана вида $\hat{H} = \mathbf{d}(k) \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}$ можно построить параметрическую двумерную кривую $\mathbf{d}(k)$ (см. рис.); и адиабатическое изменение параметров гамильтониана соответствует непрерывной деформации кривой⁶. Поскольку, как было сказано выше, при такой деформации мы не должны пересекать точку $(0, 0)$, то геометрически мы можем заметить, что кривые, «обхватывающие» начало координат деформировать в не обхватывающие непрерывным образом не пересекая начало координат невозможно. Сохранение киральной симметрии тут критично — её нарушение соответствует появлению компоненты d_z и «выход в трёхмерие». Разумеется, через трёхмерное пространство эти окружности можно непрерывно перевести одну через другую.

Это же условие можно сформулировать более формально. Величина $\mathbf{d}(k)$ представляет отображение зоны Бриллюэна — окружности S^1 (отрезок $[-\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}]$ с отождествлёнными концами) — на плоскость с выколотой точкой:

⁶Разумеется, пока мы работаем в двухпараметрической модели (t_1, t_2) , то мы можем менять не всю кривую, а только её положение и радиус. Однако можно рассмотреть более широкий набор гамильтонианов, включающих в себя дальние прыжки (но, повторимся, сохраняющих киральную симметрию!) — и в таком случае кривую $\mathbf{d}(k)$ мы действительно можем изменять произвольным образом

$$\mathbf{d}(k) : S^1 \rightarrow \mathbb{R}^2/\{0\} \quad (11)$$

Для такого вида отображений можно ввести **топологический инвариант** w — число намотки (winding number), число оборотов образа окружности вокруг нуля⁷:

$$w = \int_{BZ} \frac{dk}{2\pi} \cdot \frac{d}{dk} \arg(d_x(k) + id_y(k)) \in \mathbb{Z} \quad (12)$$

Все гамильтонианы разбиваются на счетное число топологических фаз, соответствующих различным значениям w , поэтому такая система называется топологическим \mathbb{Z} -изолятором. По соображениям непрерывности невозможно перевести гамильтониан из одной фазы в другую непрерывной деформацией (без закрытия щели!). В одной топологической фазе гамильтонианы друг в друга деформируются. В конкретно нашей задаче 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 причинам⁸ *BDI*. В каждом классе может существовать определённое количество топологических фаз. Если их количество отлично от единицы, то такой класс называется топологическим. Наконец, существует полная классификация топологических изоляторов, записанная в виде таблицы; и сейчас мы установили, что топологическая группа класса *BDI* в 1D есть \mathbb{Z} .

Краевые моды

Ко всему вышесказанному можно поставить вполне закономерный вопрос. Ведь для бесконечной цепочки выбор элементарной ячейки произволен, и в этом смысле t_1 и t_2 совершенно взаимозаменяемы. Как же мы в таком случае вообще можем отличить одну фазу от другой? Ответ на этот вопрос прост: никак. Это становится возможным в двух следующих случаях: если мы рассматриваем **границу** между двумя топологическими фазами; либо если мы рассматриваем край образца — и в таком случае выбор элементарной ячейки диктуется тем, какой из атомов располагается на границе. Вторым случаем мы сейчас и займёмся.

Оказывается, что нетривиальные топологические фазы в 1D (в нашем случае при $|t_1| < |t_2|$) характеризуются тем, что в них обязательно присутствуют **краевые состояния с нулевой энергией**⁹. Они топологически защищены: если имеется одно состояние на нулевой энергии, то киральная симметрия запрещает ему уйти с нулевой энергии: должен возникнуть «киральный двойник» с энергией $-E$. Если цепочка не полубесконечная, но имеет конечную длину, то такой «двойник» может возникнуть из второго локализованного состояния на другом краю провода. Однако для того, чтобы состояния ушли с нулевой энергии им нужно гибридизоваться (напомним, что в объёме в районе нулевой энергии состояний нет — мы имеем дело с изолятором!), что в силу экспоненциально слабого перекрытия волновых функций краевых состояний приводит только к незначительному (а в термодинамическом пределе — к нулевому) расщеплению нулевых мод.

Построим явно краевую нулевую моду в полубесконечной цепочке. Для этого нам нужно решить одночастичное уравнение Шрёдингера:

$$\begin{pmatrix} 0 & t_1 & 0 & 0 & 0 \\ t_1 & 0 & t_2 & 0 & 0 \\ 0 & t_2 & 0 & t_1 & 0 \\ 0 & 0 & t_1 & 0 & \ddots \\ 0 & 0 & 0 & \ddots & \ddots \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \\ \vdots \end{pmatrix} = 0. \quad (13)$$

Для решения этого уравнения мы можем воспользоваться киральной симметрией — действительно, как мы знаем, если $|\psi\rangle$ является решением, то $\hat{\Xi}|\psi\rangle$ — тоже. Поэтому искать решение можно в виде $\frac{1}{2}(1 \pm \hat{\Xi})|\psi\rangle$ — операторы $\frac{1}{2}(1 \pm \hat{\Xi})$ представляют собой проекторы на одну из подрешёток, поэтому у соответствующей волновой функции половина коэффициентов (все чётные или нечётные) равны нулю. С учётом вышесказанного, получаем:

$$\begin{cases} t_1\psi_1 + t_2\psi_3 = 0 \\ t_1\psi_3 + t_2\psi_5 = 0 \\ \dots \end{cases} \Rightarrow \psi_{2k+1} = \left(-\frac{t_1}{t_2}\right)\psi_{2k-1} = \left(-\frac{t_1}{t_2}\right)^k \psi_1 \quad (14)$$

⁷Классификация отображений S^1 в целое 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 $\pi_1(\mathbb{R}^2/\{0\}) = \mathbb{Z}$.

⁸Эти названия восходят к Картановой классификации симметрических пространств, которые являются пространствами, на которых определяется эффективная теория поля (сигма-модель), описывающая соответствующие системы при наличии беспорядка.

⁹Их энергия строго равна нулю лишь в пределе образца бесконечной длины; для конечного образца они имеют энергию $\sim \exp(-N/\xi)$.

Полученная волновая функция экспоненциально затухает в объём при $|t_1| < |t_2|$, и тем самым действительно реализует краевое состояние в одной из топологических фаз — как раз в той, в которой топологический инвариант, число намотки $w = 1$. Приведённое тут вычисление на самом деле совершенно не чувствительно к детальной структуре границы; в частности, где-то возле края прыжковые матричные элементы могут отличаться от t_1 и t_2 — и тем не менее, если в объёме в конечном итоге они «выходят» на t_1 и t_2 , приведённая выше аргументация по-прежнему действует.

Ещё раз подчеркнём, что же сейчас произошло. Топологический инвариант и классификация топологических фаз — это свойство объёма. Это свойство, тем не менее, определяет некоторые физические свойства края образца. Это — пример так называемого «соответствие объёма и границы» (bulk-boundary correspondence), общего свойства топологических изоляторов.

Предел «плоской зоны» Есть ещё один из способов продемонстрировать наличие краевых мод, не строя их явно. Дело в том, что, как было обсуждено выше, количество краевых мод тоже является топологическим инвариантом, и в результате адиабатического изменения параметров гамильтониана, измениться не может. Поэтому чтобы выяснить, имеются ли в той или иной фазе краевые состояния, достаточно выяснить это для какой-нибудь точки, принадлежащей соответствующей фазе, и для которой это сделать проще всего.

Для нашей модели самые простые точки для обеих фаз — это точки $(t_1, t_2) = (0, t)$ (для нетривиальной фазы) и $(t_1, t_2) = (t, 0)$ (для тривиальной). При этом закон дисперсии объёма — $\varepsilon(k) = \pm|t|$ — не зависит от k , чем и вызвано название предела, вынесенное в заголовок (flat band limit). Групповая скорость возбуждений при этом $v(k) = \frac{\partial \varepsilon}{\partial k} = 0$, и возбуждения по системе не распространяются. В обоих случаях, цепочка разбивается на димеры — пары узлов, связанных туннельным матричным элементом t — для которых собственные состояния представляют собой симметричные и антисимметричные комбинации $\frac{1}{\sqrt{2}}(|n\rangle \pm |n+1\rangle)$, а собственные значения — $\pm|t|$. Однако, в нетривиальной фазе $t_1 = 0$ самый крайний атом оказывается изолированным, не связан ни с кем, и на нём существует локализованное краевое состояние с нулевой энергией.

Граница между двумя топологическими фазами (состояния Jackiw-Rebbi)

Рассмотрим теперь не край образца, но границу двух топологических фаз. Поучительно будет изучить этот вопрос в непрерывном пределе — вместо резкой границы мы теперь предположим, что, например, туннельный матричный элемент t_1 плавно меняется от значения $t_1(x \rightarrow -\infty) = t_1^{(L)}$ до значения $t_1(x \rightarrow +\infty) = t_1^{(R)}$, причём $|t_1^{(L)}| > |t_2|$, а $|t_1^{(R)}| < |t_2|$ — так что имеет место плавная граница между парой топологических фаз.

Зададим модельно следующую координатную зависимость:

$$\begin{cases} t_1(x) = -t + \delta t(x) \\ t_2(x) = t = \text{const} \end{cases}, \quad \begin{cases} \delta t(x) < 0, & x < 0 \\ \delta t(x) > 0, & x > 0 \end{cases} \quad (15)$$

(мы предположили, что t_1 и t_2 различных знаков, поскольку только при этом волновая функция $\psi(x)$ будет плавно меняться в пространстве — как мы выдели выше, в противном случае она будет знакопеременна на соседних узлах; однако, от заданной проблемы достаточно легко избавиться, просто сделав замену $\psi_n \mapsto (-1)^n \psi_n$). Длинноволновое разложение мы сделаем по следующему рецепту: возьмём гамильтониан в представлении Фурье для постоянных t_1, t_2 , разложим его по $ka \ll 1$; а в полученном выражении положим $k \mapsto -i \frac{\partial}{\partial x}$ и, наконец, восстановим координатную зависимость матричных элементов:

$$\hat{\mathcal{H}}(k) = \begin{pmatrix} 0 & t_1 + t_2 e^{-ika} \\ t_1 + t_2 e^{ika} & 0 \end{pmatrix} \approx \begin{pmatrix} 0 & t_1 + t_2(1 - ika) \\ t_1 + t_2(1 + ika) & 0 \end{pmatrix} = (t_1 + t_2) \hat{\sigma}_x + t_2 a \cdot \hat{\sigma}_y k \quad (16)$$

$$\hat{\mathcal{H}} = \delta t(x) \cdot \hat{\sigma}_x + ta \hat{\sigma}_y (-i \partial_x) \quad (17)$$

$$\hat{\mathcal{H}}|\psi\rangle = 0 \Leftrightarrow \begin{pmatrix} 0 & \delta t(x) - ta \partial_x \\ \delta t(x) + ta \partial_x & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_1(x) \\ \psi_2(x) \end{pmatrix} = 0 \Rightarrow \begin{cases} \partial_x \psi_2 = \frac{\delta t(x)}{ta} \psi_2 \\ \partial_x \psi_1 = -\frac{\delta t(x)}{ta} \psi_1 \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} \psi_1(x) = \xi_1 \exp\left(-\frac{1}{ta} \int_0^x \delta t(x) dx\right) \\ \psi_2(x) = \xi_2 \exp\left(\frac{1}{ta} \int_0^x \delta t(x) dx\right) \end{cases} \quad (18)$$

Поэтому для исследуемого тут случая $\delta t(+\infty) > 0$ и $\delta t(-\infty) < 0$, полученное решение будет экспоненциально затухать при $x \rightarrow \pm\infty$ при $\xi_1 = 1, \xi_2 = 0$. Напротив, если знаки будут иными, то затухающее решение опять будет существовать, но на этот раз это будет $\xi_1 = 0, \xi_2 = 1$.