

ΕΛΛΗΝΙΚΗ ΔΗΜΟΚΡΑΤΙΑ Εθνικόν και Καποδιστριακόν Πανεπιστήμιον Αθηνών

—ΙΔΡΥΘΕΝ ΤΟ 1837——

Σχολή Θετικών Επιστημών Τμήμα Φυσικής Τομέας Πυρηνικής Φυσικής και Φυσικής Στοιχειωδών Σωματιδίων

Εντοπισμένες Καταστάσεις σε Αλυσίδες τύπου SSH

Διπλωματική Εργασία

Ανδρέας Κάτσαρης

Αριθμός Μητρώου : 2019215

Επιβλέπων : Φώτιος Διάχονος

Αναπληρωτής Καθηγητής

Αθήνα, Αύγουστος 2021

Τίτλος : Εντοπισμένες Καταστάσεις σε Αλυσίδες τύπου SSH

Περίληψη

Το Su-Schrieffer-Heeger ή SSH μοντέλο αποτελεί ένα απλό tight-binding μοντέλο το οποίο προτάθηκε για την περιγραφή αλυσίδων πολύ-ακετυλενίου (poly-acetylene). Αποτελεί το απλούστερο 1-D μοντέλο με χαρακτηριστικά τοπολογικού μονωτή, υπό την έννοια ότι μπορεί να υποστηρίξει τις λεγόμενες καταστάσεις άκρων (edge states), δηλαδή καταστάσεις οι οποίες βρίσκονται εντοπισμένες στα άκρα της αλυσίδας ενώ ταυτόχρονα είναι ανθεκτικές κάτω από αδιαβατικές παραμορφώσεις των παραμέτρων του συστήματος που τις φιλοξενεί, γεγονός που τις καθιστά ικανές να χρησιμοποιηθούν σε εφαρμογές μεταφοράς κβαντικών καταστάσεων. Στη συγκεκριμένη εργασία παρουσιάζουμε συνοπτικά την ιδέα που οδήγησε στη δημιουργία του ερευνητικού κλάδου των Τοπολογικών Μονωτών. Συνεχίζουμε αναλύοντας τα γενικά χαρακτηριστικά του SSH μοντέλου στην ερμιτιανή εκδοχή του, καθώς επίσης αναφέρουμε τη μη ερμιτιανή (\mathcal{PT}) επέκτασή του, η οποία προτάθηκε ώστε να περιγραφούν φωτονικά πλέγματα και κρύσταλλοι. Τέλος, αναδεικνύουμε την ύπαρξη εντοπισμένων καταστάσεων σε αλυσίδες τύπου SSH, όχι στα σύνορα της αλυσίδας, αλλά γύρω από κάποια ατέλεια την οποία εμφυτεύουμε σε αυτή.

Τριμελής Εξεταστική Επιτροπή :

Φώτιος Διάκονος, Αναπληρωτής Καθηγητής Τμήματος Φυσικής ΕΚΠΑ Φοίβος Μαυρόπουλος, Καθηγητής Τμήματος Φυσικής ΕΚΠΑ Αλέξανδρος Καρανίκας, Αφυπηρετήσας Καθηγητής Τμήματος Φυσικής ΕΚΠΑ

Title : Localised States in SSH type Chains

Abstract

The Su-Schrieffer-Heeger or SSH model is a simple tight-binding model, which was proposed in order to describe chains of poly-acetylene. It is the simplest possible 1-D model that can have the characteristics of a topological insulator, in the sense that it can support the so-called *edge states*, namely states that are localised around the edges of the chain, while they are robust in adiabatic changes of their system, which made them ideal candidates for quantum state transport applications. In this thesis we present in short the idea that led to the creation of the scientific area of Topological Insulators. We then continue by giving the general characteristics of the hermitian SSH model, and proceed to its non hermitian (\mathcal{PT}) extension, which was proposed in order to describe realistic photonic lattices and crystals. Finally, we illustrate the existence of localised states in SSH type chains, not around the edges of the chain, but instead around a defect that we have planted in it.

Evaluation Committee :

Fotios Diakonos, Associate Professor Physics Department NKUA Phivos Mavropoulos, Professor Physics Department NKUA Alexandros Karanikas, Retired Professor Physics Department NKUA

Περιεχόμενα

	Πρόλογος	1
1	Εισαγωγή	3
2	Βασικές Γνώσεις 2.1 Η έννοια της Berry Phase 2.2 <i>ΡΤ</i> Συμμετρία και Κβαντομηχανική	8 8 14
3	 To Su – Schrieffer – Heeger (SSH) μοντέλο 3.1 Ερμιτιανή Εκδοχή	 18 18 21 26 29 34 37 37 43
4	Κώδιχες για περιγραφή SSH μοντέλων 4.1 Ερμιτιανό SSH μοντέλο	 45 46 54 61 63 65
	Διρκιογραφια	00

Πρόλογος

Η συγκεκριμένη εργασία έγινε στα πλαίσια του Προγράμματος Μεταπτυχιαχών Σπουδών "Φυσική" με ειδίκευση στην Πυρηνική Φυσική και Φυσική Στοιχειωδών Σωματιδίων του Τμήματος Φυσικής της Σχολής Θετικών Επιστημών του Εθνικού Καποδιστριαχού Πανεπιστημίου Αθηνών. Σκοπός της εργασίας είναι η κατανόηση βασικών εννοιών που αφορούν το γενικότερο αντικείμενο των Τοπολογικών Μονωτών (*Topological Insulators*), μέσω της μελέτης του toy model για αλυσίδες πολύ-ακετυλένιου¹(*poly-acetylene*) το οποίο είναι γνωστό ως Su-Schrieffer-Heeger μοντέλο ή SSH model. Θα διερευνήσουμε την ερμιτιανή εκδοχή του SSH μοντέλου, καθώς επίσης και την επέκταση αυτού στη μη ερμιτιανή (\mathcal{PT}) εκδοχή του.

Η εργασία διαρθρώνεται σε τέσσερα βασικά Κεφάλαια. Ξεκινάμε με μια συνοπτική αναφορά στο 10 Κεφάλαιο: Εισαγωγή, της πορείας του ερευνητικού κλάδου των Τοπολογικών Μονωτών μέχρι και το σήμερα. Στο 20 Κεφάλαιο: Βασικές Έννοιες παραθέτουμε αναλυτικά την έννοια της Berry Phase, η οποία έχει συνδεθεί άρρηκτα με την έννοια των Τοπολογικών Αναλλοίωτων για τα φυσικά συστήματα. Επίσης κάνουμε μια συνοπτική αναφορά στο ρόλο της *PT* συμμετρίας στην κβαντομηχανική περιγραφή συστημάτων. Στη συνέχεια της εργασίας, στο **30** Κεφάλαιο: Το Su-Shrieffer-Heeger (SSH) μοντέλο προσπαθούμε να παρουσιάσουμε το SSH μοντέλο με τον απλούστερο δυνατό τρόπο, σε ό,τι αφορά τις βασικές υποθέσεις του, τον τρόπο περιγραφής του, και τέλος την ξεχωριστή συμπεριφορά του αναφορικά με τα φυσικά χαρακτηριστικά που μπορούν να καταστήσουν ένα σύστημα που περιγράφεται από αυτό το μοντέλο Τοπολογικόν Μονωτή. Κατόπιν, περνάμε σε μια επέκταση, όπου αναπτύσσουμε μια μη ερμιτιανή *PT* εκδοχή του SSH μοντέλου, στην οποία κάνουμε αναφορά σε κάποια λεπτά θεωρητικά σημεία. Στο τέλος του κεφαλαίου αναπαράγουμε κάποιες ιδέες οι οποίες υπάρχουν στο paper των Schomerus et al. [10], και αφορούν την εμφύτευση ατέλειας σε μια αλυσίδα τύπου SSH, με σκοπό τη δημιουργία εντοπισμένων λύσεων γύρω της.

Γενικά αν μπορούσαμε να περιγράψουμε την εργασία με δύο προτάσεις θα ήταν οι ακόλουθες :

- Επαφή με τις βασικές έννοιες που σχετίζονται με Τοπολογικές Αλυσίδες, μέσω της κατανόησης του SSH μοντέλου.
- Διερεύνηση ύπαρξης εντοπισμένων λύσεων σε μονοδιάστατες αλυσίδες τύπου SSH.

Τέλος το 4ο Κεφάλαιο : Κώδικες για την περιγραφή SSH μοντέλων εμπεριέχει κομμάτια από δύο κώδικες οι οποίοι αναπαράγουν όλα τα υπολογιστικά αποτελέσματα της εργασίας ώστε να φανούν κάποια σημεία στα οποία η μετάβαση από τον καθαρά αναλυτικό φορμαλισμό στον υπολογιστικό κρύβει κάποιες ιδιαιτερότητες. Καταλήγουμε με μια σύνοψη της εργασίας και πιθανών επεκτάσεων της, στον Επίλογο.

¹Το πρώτο συνθετικό (πολύ-) προκύπτει από την λέξη πολυμερισμός όπου στην οργανική Χημεία είναι η συνοπτική ονομασία που χρησιμοποιείται για τις χημικές ενώσεις που δημιουργούν πολυμερείς ενώσεις, δηλαδή ενώσεις με μακρομόρια, ενώ το δεύτερο συνθετικό (Ακετυλένιο ή Αιθίνιο) είναι η οργανική ένωση που περιέχει άνθρακα και υδρογόνο με μοριακό τύπο C₂H₂.

Ευχαριστίες

Σε αυτό το σημείο θα ήθελα να ευχαριστήσω για το χρόνο τους, τους καθηγητές οι οποίοι συμμετείχαν στην εξεταστική επιτροπή μου, τους κυρίους Αλέξανδρο Καρανίκα και Φοίβο Μαυρόπουλο.

Εν συνεχεία θα ήθελα να ευχαριστήσω τους ανθρώπους που με βοήθησαν σε όλη τη διάρχεια της ενασχόλησης μου με την διπλωματική εργασία αναφορικά με βιβλιογραφικές πήγες, κατευθυντήριες οδηγίες, συμβουλές και πάνω από όλα για το χρόνο τους, τους κυρίους Παναγιώτη Καλοζούμη, Γιώργο Θεοχάρη, Γιώργο Στυλίαρη, Βάσο Αχιλλέως, Νικόλα Παλαιοδημόπουλο, Διαμαντή Αναστασιάδη.

Ειδικές ευχαριστίες οφείλω να αποδώσω, για την έμπνευση, την καθοδήγηση και την εμπιστοσύνη που μου έχει δείξει σε όλα τα χρόνια της συνεργασίας μας, στον επιβλέποντα καθηγητή μου, κύριο Φώτιο Διάκονο.

Τέλος είναι σημαντικό να αναφερθούν ευχαριστίες στην οικογένεια μου, καθώς επίσης και στους κοντινούς μου ανθρώπους οι οποίοι στηρίζουν την προσπάθεια μου ο καθένας με το δικό του ξεχωριστό τρόπο.

Κεφάλαιο 1

Εισαγωγή

Μια ιδιαίτερη κατηγορία υλικών : Οι Τοπολογικοί Μονωτές

Γνωρίζουμε πως ένας κοινός μονωτής, έχει την ιδιότητα να μην επιτρέπει την ελεύθερη διέλευση του ηλεκτρικού φορτίου, σε όλη την έκταση του. Αυτό που καθιστά ένα υλικό τοπολογικό μονωτή είναι η ιδιότητά του να εμφανίζει μεταλλικά σύνορα¹, όταν τοποθετηθεί δίπλα στο κενό ή σε κοινό μονωτή, ενώ ταυτόχρονα σε όλη την υπόλοιπη έκτασή του να παραμένει μονωτής. Αυτή η εξωτική ιδιότητα έχει συνδεθεί άμεσα με την έννοια των Τοπολογικών Αναλλοίωτων (από την οποία έχουν πάρει και το όνομα τους αυτά τα υλικά).

Η Τοπολογία αποτελεί έναν αρχετά ενδιαφέρον χλάδο των Μαθηματικών, ο οποίος μελετά και κατηγοριοποιεί τα αντικείμενα με γνώμονα το κατά πόσο οι ιδιότητές τους παραμένουν αμετάβλητες όταν αυτά υποστούν κάποια συνεχή παραμόρφωση. Ένα απλό παράδειγμα είναι πως για την Τοπολογία, το σχήμα της μπάλας του μπάσκετ, και της μπάλας του ράγκμπι είναι ισοδύναμα, αφού με κατάλληλες δράσεις μπορούμε να μεταβούμε από το ένα σχήμα στο άλλο χωρίς να χρειαστεί να δημιουργήσουμε κάποια τομή κατά την διαδικασία. Από την άλλη μεριά το σχήμα της μπάλας του μπάσκετ με το σχήμα ενός ντόνατ δεν είναι ισοδύναμα, αφού με κανένα συνεχή τρόπο δεν μπορούμε να δημιουργήσουμε το ένα από το άλλο. Αυτό που καθιστά τα σχήματα που περιγράψαμε διαφορετικά είναι οι οπές οι οποίες έχουν. Καταλαβαίνουμε λοιπόν, πως μπορούμε να ταξινομήσουμε τα αντικείμενα βάση των ακέραιων αριθμών των οπών τις οποίες αυτά κατέχουν. Γενικότερα ένας ακέραιος αριθμός ο οποίος χαρακτηρίζει ένα αντικείμενο και παραμένει σταθερός σε μια συνεχή παραμόρφωση.

Η παραπάνω κατηγοριοποίηση αν και αποτελεί μια καθαρά μαθηματική προσέγγιση των πραγμάτων, σαν ιδέα μπορεί να έχει άμεσες επεκτάσεις και εφαρμογές στην επιστήμη της Φυσικής. Αρκετές φορές ο ορισμός κατηγοριών ή κλάσεων για τα φυσικά συστήματα βάση των ιδιοτήτων τις οποίες κατέχουν, μας παρέχει μια καλύτερη κατανόηση της συμπεριφοράς τους, αλλά και της Φύσης γενικότερα. Η Τοπολογία δίνει έναν κομψό τρόπο να καταφέρουμε αυτή την ταξινόμηση μέσω των τοπολογικών αναλλοίωτων. Συγκεκριμένα αν είναι εφικτός ο ορισμός μιας ακέραιας ποσότητας για μια κατηγορία φυσικών συστημάτων, η οποία αναλόγως με την τιμή της θα σχετίζεται με διαφορετικές ιδιότητες αυτών, και αυτή η τιμή θα παραμένει σταθερή σε συνεχείς παραμορφώσεις τους, τότε μπορούμε να ταξινομούμε τις διαφορετικές αυτές φάσεις τους, βάση αυτής ακριβώς της ποσότητας.

Τα ηλεκτρόνια ενός μέσου περιγράφονται στην κβαντομηχανική μέσω των κυματοσυναρτήσεων τους. Μπορούμε να εκφράσουμε τις κυματοσυναρτήσεις αυτές στο χώρο των ορμών και βάση αυτών να ορίσουμε ολοκληρώματα τα οποία αποτελούν τα τοπολογικά αναλλοίωτα για το σύστημα που περιγράφουμε, και μέσω αυτών αν γνωρίζουμε πως ένα υλικό είναι μονωτής να καθορίσουμε αν είναι κοινός ή τοπολογικός.

¹Δηλαδή στο σύνορο του υλιχού το ηλεχτριχό φορτίο να μπορεί να διέρχεται ελεύθερο.

Το Κβαντικό Φαινόμενο Hall

Ο κόσμος που περιγράφει η Κβαντομηχανική έχει ιδιαίτερο ενδιαφέρον για τους Φυσικούς, αφού οι διεργασίες που μπορεί να προκύψουν στη μικροσκοπική κλίμακα είναι πολλές φορές απροσδόκητες. Το Κβαντικό Φαινόμενο Hall (*Quantum Hall Effect* ή *QHE*) περιγράφει ένα σύνολο από τέτοιες διεργασίες, και είναι αυτό που η ερμηνεία του συνδέθηκε για πρώτη φορά με την έννοια της Τοπολογιάς. Η αγωγιμότητα Hall (*Hall conductivity*),

$$\sigma_{xy} = \frac{e^2}{h}\nu\tag{1.1}$$

η οποία μπορεί να εμφανιστεί όταν έχουμε ηλεκτρόνια περιορισμένα σε μια 2-D επιφάνεια και εφαρμόσουμε σε αυτή σταθερό κάθετο εξωτερικό μαγνητικό πεδίο, είναι η πιο άμεσα παρατηρήσιμη ποσότητα που προκύπτει από το QHE, και αυτός είναι ο λόγος που έχει πάρει το φαίνομενο το ονομά του από αυτή. Η εξίσωση (1.1) αποτελείται από τρεις μεταβλητές, δύο φυσικές σταθερές, το στοιχειώδες ηλεκτρικό φορτίο e και τη σταθερά του Planck h, και έναν αριθμό ν. Αυτός ο αριθμός μπορεί να είναι είτε ακέραιος οπότε έχουμε το Integer Quantum Hall Effect, είτε ρητός οπότε έχουμε το Fractional Quantum Hall Effect. Οι ακέραιοι αριθμοί που εμφανίζονται στο QHE είναι ένα παράδειγμα τοπολογικών αναλλοίωτων, και είναι γνωστοί στην επιστήμη των Μαθηματικών ως πρώτοι αριθμοί Chern (first Chern numbers).

Τα πρώτα βήματα στον κλάδο των Τοπολογικών Μονωτών

Η πρώτη νύξη για την ύπαρξη των τοπολογικών μονωτών προέκυψε από την ιδέα πως το QHE θα μπορούσε να εμφανιστεί χωρίς την παρουσία σταθερού εξωτερικού μαγνητικού πεδίου, σε μια εργασία που γράφτηκε από τον F. D. M. Haldane [1]. Η ουσία της παραπάνω υπόθεσης βασίζεται στο ότι, θεωρητικά τουλάχιστον θα ήταν πιθανό τα ηλεκτρόνια να εμφανίσουν μια Κβαντική κατάσταση Hall μέσω δυνάμεων, που τους ασκούνται όχι από κάποιο εξωτερικό παράγοντα αλλά από ιδιότητες που αφορούν την εσωτερική δομή και διάταξη τους. Συγκεκριμένα μια ερμηνεία της παραπάνω υπόθεσης είναι πως στη σχετιστική κβαντομηχανική τα ηλεκτρόνια που κινούνται σε μια χρυσταλλιχή δομή μπορούν να δέχονται δυνάμεις οι οποίες συνδέονται με τη σύζευξη του χβαντιχού βαθμού ελευθερίας spin και της τροχιαχής στροφορμής τους, αχόμη και σε μη μαγντιχά υλικά. Αυτές οι δυνάμεις μάλιστα όπως προτάθηκε σε ένα απλουστευμένο μοντέλο από τους S. Murakami, N. Nagaosa και S.C. Zhang [2], θα μπορούσαν να δημιουργήσουν ρεύματα αντίθετων κατευθύνσεων στα άκρα 2-D διάταξης, τα οποία θα αποτελούνταν το καθένα αποκλειστικά από ηλεκτρόνια με ίδιο spin (πάνω και κάτω αντίστοιχα). Το πρόβλημα όμως σε αυτά τα μοντέλα ήταν πως εν γένει τα ηλεκτρόνια σε ένα υλικό δεν έχουν καθορισμένο spin, και χωρίς την ύπαρξη εξωτερικού μαγνητικού πεδίου, ο διαχωρισμός και η προσανατολισμένη κίνησή τους με βάση το spin, δεν έμοιαζε τόσο ρεαλιστική.

Τη χρονιά 2005 μια εργασία των C. L. Kane και E. J. Mele [3], η οποία χρημοποίησε μοντέλα χωρίς την απαίτηση ρευμάτων σταθερού spin, έβαλε τα θεμέλια για να μπορέσουν οι θεωρητικές προβλέψεις για την ύπαρξη τέτοιων υλικών να γίνουν πιο πιθανές. Η σημαντική συνεισφορά της εν λόγω εργασίας ήταν ο ορισμός ενός καινούργιου Z_2 τοπολογικού αναλλοίωτου, το οποίο θα μπορούσε να ξεχωρίσει έναν κοινό μονωτή από έναν άλλο ο οποίος θα εμφάνιζε το QHE χωρίς την ύπαρξη εξωτερικού μαγνητικού πεδίου. Μάλιστα η συγκεκριμένη διαδικασία, δηλαδή ένα ρεύμα spin το οποίο υπάρχει αυθόρμητα σε ένα υλικό συνδέεται με την έννοια του spin Hall Effect το οποίο έχει ομοιότητες με το anomalous Hall effect.

Η ιδιαιτερότητα της αντιστοίχης χύριου μέρους και συνόρου (bulk-boundary correspondence)

Ο βασικός διαχωρισμός μεταξύ ενός κοινού μονωτή από έναν τοπολογικό μονωτή είναι η υποστήριξη μεταλλικών καταστάσεων του δεύτερου στα άκρα του. Γενικά ο τρόπος που ακολουθεί χανείς ώστε να χαραχτηρίσει ένα υλιχό ως προς την αγωγιμότητά του είναι μέσω της λεγόμενης Band Theory of Solids. Η συγκεκριμένη θεωρία καταφέρνει να περιγράψει την ηλεκτρονιακή δομή σε κάποιο υλικό. Συγκεκριμένα με χρήση της συμμετρίας μετάθεσης που υπάρχει σε μια κρυσταλλική δομή, μπορεί κανείς να μεταβεί σε αυτό που ονομάζουμε Ανάστροφο Χώρο. Με τη βοήθεια του Θεωρήματος Bloch αυτός ο χώρος ορίζεται από τα χυματανύσματα k, τα οποία πραχτιχά εχφράζουν τις επιτρεπτές τιμές της ορμής μέσα στον κρύσταλλο. Εκφράζοντας τη Χαμιλτονιανή του συστήματος στο χώρο των χυματανυσμάτων Bloch (δηλαδή έχοντας H(k)), και λύνοντας το πρόβλημα ιδιοτιμών και ιδιοκαταστάσεων βρίσκει κανείς m καταστάσεις με $E_m(k)$ ιδιοτιμές. Αυτές οι ιδιοτιμές ορίζουν τις Ενεργειαχές Ζώνες (Energy Bands). Οι ενεργειαχές ζώνες χωρίζονται μεταξύ τους, με κάποια ενεργειακά κενά (band gaps). Αναλόγως τον αριθμό κατάληψης, δηλαδή το πόσα ηλεκτρόνια μπορούν να χωρέσουν στην κάθε ενεργειακή ζώνη, αλλά και το πόσο μεγάλο είναι το ενεργειακό κενό μεταξύ των ζωνών, συνηθίζεται να γίνεται ο διαχωρισμός μεταξύ αγωγών, ημιαγωγών και μονωτών. Σε ένα μονωτή αυτό που συμβαίνει είναι πως τα τελευταία ηλεκτρόνια χαταλαμβάνουν πλήρως την τελευταία ενεργειαχή ζώνη που διαθέτουν, χαι έτσι δεν υπάρχουν κοντά τους (λόγω του ενεργειακού κενού) διεγερμένες καταστάσεις που να υποστηρίζει το υλικό, τις οποίες μπορούν να καταλάβουν με ελάχιστη παροχή ενέργειας.

Από την πλευρά των ενεργειακών ζωνών, δηλαδή από την διερεύνηση της σχέσης διασποράς $(E_m(k))$, δεν είναι εφικτό να φανεί το ιδιαίτερο χαρακτηριστικό που εμφανίζουν οι τοπολογικοί μονωτές. Σε αυτά τα υλικά αυτό που συμβαίνει είναι πως υποστηρίζουν καταστάσεις στις οποίες κλείνει το ενεργειακό κενό, και έτσι ένα ηλεκτρόνιο μπορεί να μεταβεί με ελάχιστη ενέργεια από τη μια ενεργειακή ζώνη στην άλλη. Αυτές οι καταστάσεις όμως συμβαίνουν μόνο στα σύνορα του υλικού (*Edge States*). Για να μπορέσει κανείς να προβλέψει αυτές τις καταστάσεις είναι υποχρεωμένος να μεταβεί σε κάτι διαφορετικό.

Μια σημαντική παρατήρηση που αξίζει να σημειωθεί σε αυτό το σημείο είναι οι θεωρητικές υποθέσεις που χρειάζονται να γίνουν για να περιγραφεί ένα φυσικό σύστημα μέσω της Θεωρίας Ενεργειακών Ζωνών. Τα συστήματα αρχικά διαχωρίζονται στο κύριο μέρος τους (bulk) και στα άκρα τους (edges). Όλη η περιγραφή γίνεται για το κύριο μέρος των συστημάτων κάνοντας την υπόθεση πως αυτό είναι άπειρο, περιοδικό μέσο, του οποίου η συμπεριφορά δεν εξαρτάται από τα άκρα του. Τα πραγματικά συστήματα ωστόσο είναι πεπερασμένα και έτσι θα πρέπει να μπορεί να γίνει η μετάβαση από την θεωρία ενός άπειρου μέσου σε ένα με πεπερασμένες διαστάσεις.

Το εξαιρετικό αποτέλεσμα που έχει προκύψει είναι πως ο υπολογισμός ενός τοπολογικού αναλλοίωτου στο κύριο μέρος του συστήματος, μπορεί να μας δώσει πληροφορία για τη συμπεριφορά των άκρων του. Μάλιστα αυτό που ονομάζεται *bulk-boundary correspondence* εκφράζει ακριβώς αυτή την ιδιότητα.

Το 1-D Su-Schrieffer-Heeger και οι Τοπολογικοί Μονωτές

Σε όλα όσα αναφέραμε παραπάνω, υπήρχε νοερά η υπόθεση πως αναφερόμαστε σε 2-D συστήματα, αφού σε αυτά είναι που εμφανίζεται το QHE, και πάνω σε αυτό βασίστηκε όλη η ιδέα των τοπολογικών μονωτών. Εντούτοις η σχέση της Τοπολογίας και των καταστάσεων που βρίσκονται εντοπισμένες σε σύνορα μπορούν να εμφανιστούν ακόμη και σε απλούστερα συστήματα που υπάρχουν στη μια διάσταση (1-D μοντέλα). Μια τέτοια περίπτωση είναι και αυτή του toy model για αλυσίδες πολύ-ακετυλένιου (poly-acetylene) γνωστό ως Su-Schrieffer-Heeger ή SSH model [4].

Θα πρέπει να είναι σαφές πως στην 1-D περίπτωση το σύστημα που περιγράφεται είναι επί της ουσίας μια αλυσίδα. Το ενδιαφέρον που παρουσιάζει το SSH μοντέλο είναι πως παρόλη την

απλότητα του, αφού επί της ουσίας πρόχειται για ένα tight-binding μοντέλο το οποίο επιτρέπει μεταβάσεις μόνο σε πρώτους γείτονες, αναδειχνύει όλα τα ενδιαφέροντα χαραχτηριστικά που εμφανίζονται σε ένα τοπολογικό μονωτή. Μια πρόσφατη εργασία των Nevketan Batra και Goutam Sheet [5] περιγράφει συνοπτικά όλα τα βασικά στοιχεία τα οποία καθιστούν το SSH μοντέλο μια εξαίρετη αρχή για τον κόσμο των τοπολογικών μονωτών. Σημαντική συνεισφορά στην ταχέα ανάπτυξη του κλάδου αυτού προς την κατέυθυνση του SSH μοντέλου συνετέλεσαν και οι Lectures Notes από τους János K. Asbóth, László Oroszlány and András Pályi Pályi [6]. Στο παρόν εγχειρίδιο σκιαγραφούν με τον καλύτερο δυνατό τρόπο την ισχύ του μοντέλου αυτού.

Για να γίνουμε πιο συγκεκριμένοι, το SSH μοντέλο περιγράφει μια αλυσίδα από κυψελίδες, εκ των οποίων κάθε μια έχει δύο σημεία που ανήκουν σε διαφορετικά sublattices. Η απλότητα του μοντέλου έγκειται στο γεγονός πως έχει μόνο δύο βασικές παραμέτρους που σχετίζονται με τα πλάτη εσωτερικής και εξωτερικής μετάβασης ενός σωματιδίου από το ένα σημείο της αλυσίδας σε κάποιο γειτονικό του. Λόγω του ότι δεν θεωρείται πουθενά onsite δυναμικό, το σύστημα κατέχει Χειραλική Συμμετρία. Έτσι κάθε κατάστασή του έχει το χειραλικό της ζεύγος. Κατάλληλες τιμές των παραμέτρων επιτρέπουν σε πεπερασμένη αλυσίδα που περιγράφεται από το SSH μοντέλο, να υποστηρίζει δύο καταστάσεις (χειραλικό ζεύγος) οι οποίες είναι εντοπισμένες στα άκρα της (οι Edge States για 1-D προβλήματα).

Μια αρχετά ενδιαφέρουσα επέχταση του SSH μοντέλου είναι αυτή στη μη ερμιτιανή εχδοχή του. Τα τελευταία χρόνια έχουν γίνει αρχετές προσπάθειες να γίνει αυτή η μετάβαση αφού η ανάγχη για πιο ρεαλιστιχή περιγραφή συστημάτων, επιτάσσει την επέχταση σε μοντέλα τα οποία δεν περιορίζονται στην χαθαρά μαθηματιχή απαίτηση της ερμιτιανότητας. Μια αρχετά χαλή σύνοψη όλων των βασιχών χαραχτηριστιχών που προχύπτουν από αυτή την επέχταση γίνεται στην εργασία από την Anaya Ghatak χαι τον Tanmoy Das [7].

Στόχοι της παρούσας εργασίας

Η ύπαρξη εντοπισμένων λύσεων στα σύνορα αλυσίδων τύπου SSH, αποτελεί το θεμέλιο για τη χρήση τους σε πραχτικές εφαρμογές. Μια φιλόδοξη κατεύθυνση τέτοιων εφαρμογών είναι αυτή της μεταφοράς κβαντικών καταστάσεων (quantum state transfer ή QST), αφού οι καταστάσεις αυτές πέρα από εντοπισμένες είναι και ανθεκτικές κάτω από αδιαβατικές παραμορφώσεις, μια ιδιότητα που είναι απαραίτητη για την QST. Μια πρόσφατη εργασία των P. Boross et al. [8] προς αυτή την κατεύθυνση κάνει λόγο για μια τοπολογικά προστατευμένη κβαντική πύλη (topologically protected quantum gate) βασισμένη ακριβώς σε SSH αλυσίδα. Θα πρέπει να γίνει σαφές ωστόσο από την αρχή, πως στην παρούσα εργασία θα ασχοληθούμε με την ύπαρξη (και όχι με την μεταφορά) των εντοπισμένων καταστάσεων σε αλυσίδες τύπου SSH τόσο στα άκρα τους όσο και γύρω από κάποια ατέλεια την οποία εμφυτεύουμε σε αυτές.

Σε αυτή την εργασία γίνεται μια εκτενής ανάλυση στα βασικά χαρακτηριστικά του SSH μοντέλου, με σκοπό να γίνουν αντιληπτά όλα εκείνα τα στοιχεία που το καθιστούν μια καλή βάση για περαιτέρω εφαρμογές. Συγκεκριμένα, παρουσιάζεται όλη η πορεία προς την εξαγωγή των Edge States στο μοντέλο. Σημαντικό κομμάτι της περιγραφής αποτελούν οι έννοιες της Συμμετρίας και της Τοπολογίας εφαρμοσμένες ειδικά για το SSH μοντέλο, αφού η χειραλική συμμετρία που παρουσιάζει, το καθιστά ικανό να εμφανίζει τοπολογικά διαχωρίσιμες φάσεις, υπό την έννοια πως το συγκεκριμένο μοντέλο μπορεί να περιγράφει έναν κοινό ή έναν τοπολογικό μονωτή αναλόγα με τις τιμές των παραμέτρων του, και αυτές οι δύο καταστάσεις να διαφέρουν μέσω της κατηγοριοποίησής τους από ένα τοπολογικό αναλλοίωτο.

Κατόπιν, περνάμε σε μια επέκταση του μοντέλου στην περίπτωση της μη ερμιτιανής \mathcal{PT} εκδοχής του, η οποία προτάθηκε από τον Henning Schomerus [9] το 2013, και άνοιξε το δρόμο για τη μελέτη τέτοιου είδους μη ερμιτιανών συστημάτων, μέσω μιας μιγαδικής αλυσίδας τύπου SSH. Για να μπορέσουν να περιγραφούν ρεαλιστικές φωτονικές διατάξεις με gain και loss, προστίθεται στο απλό SSH μοντέλο ένας όρος καθαρά φανταστιχού staggered onsite δυναμιχού. Η συγχεχριμένη προσθήχη σπάει τη χειραλιχή συμμετρία του συστήματος, το οποίο γενιχά επιφέρει προβλήματα στη συνήθη συμπεριφορά χαι ερμηνεία του bulk-boundary correspondence. Ωστόσο στην [9], δείχνεται πως ένα τέτοιο φωτονιχό σύστημα μπορεί να υποστηρίξει εχθετιχά εντοπισμένες χαι τοπολογιχά ανθεχτιχές χαταστάσεις, των οποίων η σταθερότητα μπορεί να ελεγχθεί μέσω της παραμέτρου που ρυθμίζει το gain χαι loss στην αλυσίδα. Στην παρούσα εργασία εξερευνούμε λεπτομερώς μια πιο πρόσφατη εργασία του 2020 από τον Henning Schomerus et al. [10], στην οποία αναδείχθηκε η ιδέα της ύπαρξης εντοπισμένων λύσεων όχι στα άχρα 1-D αλυσίδας τύπου SSH αλλά σε χάποιο σημείο ατέλειας. Μάλιστα η ύπαρξη ατέλειας, δημιουργεί εντοπισμένες χαταστάσεις σε συστήματα τα οποία χωρίς αυτή δεν υποστηρίζουν χαθόλου τέτοιου είδους λύσεις, δεδομένου ότι τα συστήματα υπό μελέτη θεωρούνται περιοδιχά, χαι χατά σύμβαση οι εντοπισμένες χαταστάσεις που αναφέραμε μέχρι τώρα βρίσχονταν στα άχρα της αλυσίδας. Ο εντοπισμός των χαταστάσεων γύρω από οποιοδήποτε μέρος της αλυσίδας (λόγω της ατέλειας) αποτελεί ένα χαινοτόμο αποτέλεσμα, το οποίο μπορεί χρήσιμο σε πολλές εφαρμογές, όπως για παράδειγμα στο σχεδιασμό συμβατιχών φωτονιχών χρυστάλλων lasers.

Κλείνοντας την εισαγωγή, είναι σημαντικό να αναφέρουμε δύο εργασίες οι οποίες σχετίζονται με πειραματικές επιβεβαιώσεις των θεωρητικά προβλεπόμενων τοπολογικά προστατευμένων καταστάσεων σε φωτονικούς κρυστάλλους. Η πρώτη είναι μια εργασία του 2016 των S.Weimann et al. [11], και η δεύτερη του 2018 των Mingsen Pan et al. [12]. Για να αντιληφθούμε τη σημασία των εργασιών αυτών θα πρέπει να θυμηθούμε πως στην αρχή της εισαγωγής αναφέραμε πως ένας τοπολογικός μονωτής εμφανίζει μεταλλικά σύνορα όταν βρεθεί δίπλα σε έναν κοινό μονωτή ή στο κενό. Αυτό πρακτικά συμβαίνει διότι το σύστημα υπόκειται σε μια τοπολογική αλλαγή φάσης. Στις εργασίες [11], [12] δείχνεται πως μπορεί να εμφανιστούν τέτοιες εντοπισμένες καταστάσεις στα σύνορα κρυστάλλου, όταν φέρουμε σε διεπαφή αλυσίδες που βρίσκοντα στην *PT* broken και unbroken φάση τους, το οποίο αποτελεί ισχυρή ένδειξη πως η *PT* αλλαγή φάσης μπορεί να θεωρηθεί ως τοπολογική αλλαγή φάσης.

Κεφάλαιο 2

Βασικές Γνώσεις

2.1 Η έννοια της Berry Phase

Το 1984 ο M.V. Berry στην εργασία του "Quantal Phase factors accompanying adiabatic changes" [13], ανέδειξε την ιδιότητα που έχει η κατάσταση ενός κβαντικού συστήματος, το οποίο εξαρτάται από κάποιες παραμέτρους, να αποκτά έναν παράγοντα φάσης, όταν αυτές οι παράμετροι αλλάζουν με αργό και κυκλικό τρόπο. Αυτός ο παράγοντας που ονομάστηκε Berry Phase, συνδέθηκε αργότερα με την έννοια του τοπολογικού αναλλοίωτου. Σε μια μεταγενέστερη εργασία [14], ο R. Resta, συνοψίζει με απλό και σαφή τρόπο την εφαρμογή της Berry Phase σε προβλήματα που αφορούν τη Φυσική Συμπυκνωμένη Ύλης, συμπεριλαμβάνοντας μέσα και την έννοια του Zak Phase, μιας ειδικής κατηγορίας Berry Phase εφαρμοσμένη ειδικά για τη Θεωρία των Ενεργειακών Ζωνών στα Στερέα, η οποία προτάθηκε στο 1989 από τον J. Zak [15]. Μια ακόμη ενδιαφέρουσα βιβλιογραφική αναφορά είναι αυτή του βιβλίου από το συγγραφέα David Vanderbilt [16], ο οποίος εξερευνεί τη συμπεριφορά της Berry Phase και σε πιο πολύπλοκα συστήματα ηλεκτρονιακών δομών. Σημαντική συνεισφορά της συγκεκριμένης εργασίας αποτελεί η ανάπτυξη προγραμμάτων στη γλώσσα προγραμματισμού Python με απλό και σαφή τρόπο, μέσω της βιβλιοθήκης ΡythTB.

Σε αυτή την ενότητα βασιζόμαστε χυρίως στις εργασίες [14] και [16], σε μια προσπάθεια να φανεί η βασική συλλογιστική πορεία ως προς τον υπολογισμό της Berry Phase για γενικά συστήματα.

Διακριτός Φορμαλισμός

Στην Κβαντομηχανική η κατάσταση ενός συστήματος περιγράφεται μέσω ανυσμάτων τα οποία ανήκουν σε κάποιο χώρο Hilbert. Μια από τις πιο βασικές ιδιότητες που έχουν τα ανύσματα αυτά, είναι πως μπορούμε να τα "στρίψουμε" κατά μια γωνία, δηλαδή να τα πολλαπλασιάσουμε επί έναν παράγοντα φάσης (phase factor) χωρίς να αλλάξει το φυσικό νόημα το οποίο οι καταστάσεις περιγράφουν.

Αυτό προχύπτει επειδή γενιχά στην Κβαντομηχανιχή αυτό που παίζει συνήθως ρόλο στις παρατηρούμενες ποσότητες είναι το μέτρο της χατάστασης χαι όχι η ίδια η χατάσταση αχριβώς.

 Δ ηλαδή έστω η κατάσταση $|\Psi
angle$ και η κατάσταση $| ilde{\Psi}
angle,$ που συνδέονται μέσω της σχέσης :

$$|\Psi\rangle \longrightarrow |\tilde{\Psi}\rangle = e^{i\alpha} |\Psi\rangle \qquad \alpha \in [0, 2\pi)$$
 (2.1)

Αυτές οι καταστάσεις θα περιγράφουν το ίδιο φυσικό σύστημα, αφού :

$$\langle \tilde{\Psi} | \tilde{\Psi} \rangle = \langle \Psi | e^{-i\alpha} e^{i\alpha} | \Psi \rangle = \langle \Psi | \Psi \rangle \tag{2.2}$$

Κατά μια έννοια μπορούμε να πούμε πως η φάση ενός ανύσματος δεν έχει φυσική σημασία. Αυτό θα ήταν αρκετό αν είχαμε ένα σύστημα το οποίο βρίσκεται σε μια μοναδική σταθερή κατάσταση. Ορίζουμε τη σχετική φάση μεταξύ δύο μη ορθογώνιων καταστάσεων $|\Psi_1
angle$ και $|\Psi_2
angle$ ως εξής :

$$\gamma_{12} = -\arg \left\langle \Psi_1 | \Psi_2 \right\rangle \tag{2.3}$$

όπου η συνάρτηση $\arg(z)$ είναι ακριβώς το όρισμα (φάση) του μιγαδικού αριθμού z.

Γενικά αν γράψουμε σε πολική μορφή το εσωτερικό γινόμενο $\langle \Psi_1 | \Psi_2 \rangle$, μπορούμε να πάρουμε για τη σχετική φάση των καταστάσεων τη σχέση :

$$\langle \Psi_1 | \Psi_2 \rangle = \| \langle \Psi_1 | \Psi_2 \rangle \| e^{-i\gamma_{12}} \Rightarrow e^{-i\gamma_{12}} = \frac{\langle \Psi_1 | \Psi_2 \rangle}{\| \langle \Psi_1 | \Psi_2 \rangle \|}$$
(2.4)

Θα πρέπει να παρατηρήσουμε εδώ πως η σχετική φάση δύο καταστάσεων δεν είναι ανεξάρτητη ενός gauge μετασχηματισμού¹, υπό την έννοια πως αν κάνουμε τις αλλαγές φάσης που η Κβαντομηχανική μας επιτρέπει στις καταστάσεις :

$$|\Psi_1\rangle \to e^{i\alpha_1} |\Psi_1\rangle \quad ; \quad |\Psi_2\rangle \to e^{i\alpha_2} |\Psi_2\rangle$$
 (2.5)

τότε θα πάρουμε πως η σχετική φάση αλλάζει ως εξής :

$$e^{-i\gamma_{12}} \to e^{-i\gamma_{12}+i(\alpha_2-\alpha_1)} \tag{2.6}$$

Ας φανταστούμε τώρα πως έχουμε ένα σύνολο $N \ge 3$ καταστάσεων ενός χώρου Hilbert. Επίσης ας θεωρήσουμε πως οι καταστάσεις είναι διατεταγμένες πάνω σε έναν κλειστό βρόγχο, και μας ενδιαφέρει να υπολογίσουμε τη σχετική φάση πάνω σε όλο το βρόγχο. Αυτό σημαίνει πως ξεκινάμε από κάποια αρχική κατάσταση, περνάμε από όλες τις καταστάσεις διαδοχικά με συγκεκριμένη σειρά, και καταλήγουμε ξανά στην αρχική κατάσταση. Σε κάθε βήμα μπορούμε να ορίζουμε τη σχετική φάση από την προηγούμενη στην επόμενη κατάσταση, και αν αυτό το κάνουμε για όλο το βρόγχο τότε θα έχουμε τη σχετική φάση για όλο το βρόγχο.

Μαθηματικά ο παραπάνω συλλογισμός μπορεί να γραφεί με απλό τρόπο, αφού για καταστάσεις $|\Psi_j\rangle$ με $j=1,2,\ldots,N$ σε μια διατεταγμένη λίστα $L=(1,2,\ldots,N)$ μπορούμε να ορίσουμε :

$$\gamma_L = -\arg e^{-i(\gamma_{12} + \gamma_{23} + \dots + \gamma_{N1})} = -\arg \left(\langle \Psi_1 | \Psi_2 \rangle \langle \Psi_2 | \Psi_3 \rangle \dots \langle \Psi_N | \Psi_1 \rangle \right)$$
(2.7)

Αυτή η σχετική φάση σε όλο το βρόγχο είναι ακριβώς αυτό που ονομάζουμε Berry Phase στο διακριτό φορμαλισμό. Αν παρατηρήσουμε την παραπάνω σχέση θα δούμε πως η Berry Phase αν και δεν είναι η μέση (αναμενόμενη) τιμή κάποιου τελεστή παρατηρήσιμης ποσότητας, η gauge αναλλοιώτητα της αποτελεί ισχυρή ένδειξη πως μπορεί να έχει φυσική σημασία.

Συνεχής Φορμαλισμός

Η διαδικασία που κάναμε στη διακριτή περίπτωση, έχει μια αρκετά αφηρημένη και γενική προσέγγιση. Θα προσπαθήσουμε να γίνουμε πιο συγκεκριμένοι ώστε να μπορέσουμε να χρησιμοποιήσουμε το μέγεθος της Berry Phase.

Έστω μια γενική Χαμιλτονιανή η οποία εξαρτάται από κάποια παραμέτρο **R**, υπό την έννοια πως το άνυσμα **R** εμπεριέχει συνιστώστες από τις οποίες εξαρτάται η Χαμιλτονιανή, μπορούμε να γράψουμε το πρόβλημα ιδιοτιμών και ιδιοκαταστάσεων :

$$H(\mathbf{R}) |\psi(\mathbf{R})\rangle = E(\mathbf{R}) |\psi(\mathbf{R})\rangle$$
(2.8)

¹Την ονομασία gauge η οποία σχετίζεται με την τοπικότητα του μετασχηματισμού τη χρησιμοποιούμε σε αυτό το πλαίσιο ώστε να δώσουμε έμφαση πως κάθε κατάσταση "τοπικά" αλλάζει με κάποια δική της φάση.

Σημαντική παρατήρηση είναι πως θεωρούμε τις καταστάσεις $|\psi(\mathbf{R})\rangle$ να ανήκουν στον ίδιο χώρο Hilbert, το οποίο σημαίνει πως οι κυματοσυναρτήσεις υποθέτουμε πως ικανοποιούν όλες τις ίδιες, ανεξάρτητες από το \mathbf{R} , συνοριακές συνθήκες.

Μπορούμε να φανταστούμε, πως το σύνολο των χυματοσυναρτήσεων για όλες τις διαφορετικές τιμές του **R** αντιστοιχούν στη θεμελιώδη κατάτασταση του συστήματος, δηλαδή καθώς το **R** αλλάζει το σύστημα παραμένει πάντα στην βασική του κατάσταση. Τότε αν θεωρήσουμε το όριο της προηγούμενης διαδικασίας που ακολουθήσαμε στην διακριτή περίπτωση, έχουμε διαδοχικά :

$$e^{-i\Delta\gamma} = \frac{\langle \psi(\mathbf{R}) | \Psi(\mathbf{R} + \Delta \mathbf{R}) \rangle}{\|\langle \psi(\mathbf{R}) | \Psi(\mathbf{R} + \Delta \mathbf{R}) \rangle\|}$$
(2.9)

όπου πραχτιχά θεωρούμε πως το R παίρνει συνεχείς τιμές πάνω σε ένα συνεχή βρόγχο.

Έχουμε φτάσει σε ένα κρίσιμο σημείο για τον μαθηματικό φορμαλισμό μας. Μέχρι στιγμής έχουμε αποφύγει να κάνουμε αυστηρές μαθηματικές υποθέσεις. Από δω και πέρα λοιπόν θα θεωρούμε ότι η βαθμίδα που έχουμε διαλέξει (δηλαδή η τοπική φάση που έχει κάθε κατάσταση) είναι τέτοια ώστε η φάση από κατάσταση σε κατάσταση να αλλάζει με διαφορίσιμο τρόπο, οπότε και μπορούμε να γράψουμε :

$$-i\Delta\gamma \simeq \langle \psi(\mathbf{R}) | \nabla_{\mathbf{R}} \psi(\mathbf{R}) \rangle \cdot \Delta \mathbf{R}$$
(2.10)

Αν θεωρήσουμε πως η ολική φάση για έναν κλειστό συνεχή βρόγχο είναι το άθροισμα των επιμέρους, με την ίδια λογική που ορίσαμε την Berry Phase στη διακριτή περίπτωση, μπορούμε να πάρουμε :

$$\gamma = \sum_{s=1}^{M} \Delta \gamma_{s,s+1} = \oint_{C} d\gamma \tag{2.11}$$

όπου προφανώς θεωρούμε,

$$d\gamma = i \langle \psi(\mathbf{R}) | \nabla_{\mathbf{R}} \psi(\mathbf{R}) \rangle \cdot d\mathbf{R}$$
(2.12)

Έχουμε λοιπόν την Berry Phase στο συνεχή φορμαλισμό :

$$\gamma = i \int_C \langle \psi(\mathbf{R}) | \nabla_{\mathbf{R}} \psi(\mathbf{R}) \rangle \cdot d\mathbf{R}$$
(2.13)

Η ποσότητα υπό ολοκλήρωση αναφέρεται ως Berry Connection, επειδή κατά μια έννοια "συνδέει" τις καταστάσεις, και τη συμβολίζουμε ως **A**(**R**),

$$\mathbf{A}(\mathbf{R}) = \langle \psi(\mathbf{R}) | \nabla_{\mathbf{R}} \psi(\mathbf{R}) \rangle \tag{2.14}$$

Γενικά μπορεί να οριστεί και η λεγόμενη Berry Curvature ως εξής :

$$\Omega_{\mu\nu}(\mathbf{R}) = \partial_{\mu}A_{\nu}(\mathbf{R}) - \partial_{\nu}A_{\mu}(\mathbf{R})$$
(2.15)

η οποία έχει νόημα σε περιπτώσεις όπου μπορεί να εφαρμοστεί το θεώρημα Stokes, αν σχεφτούμε πως το επιφανειαχό ολοχλήρωμα της Berry Connection σε μια χλειστή διαδρομή (βρόγχο) μπορεί να μετατραπεί σε επιφανειαχό ολοχλήρωμα σε όλο το χώρο που περιχλύει η διαδρομή,

$$\gamma = \oint_C \mathbf{A} \cdot d\mathbf{R} = \int_V \mathbf{\Omega} \cdot \hat{\mathbf{n}} dS \tag{2.16}$$

όπου \hat{n} το μοναδιαίο άνυσμα κάθετο στη συνοριακή επιφάνεια με κατεύθυνση προς τα έξω.

Berry Phase και Αδιαβατική Δυναμική

Ας θεωρήσουμε ένα σύστημα το οποίο περιγράφεται από μια Χαμιλτονιανή που εξαρτάται από μια παράμετρο $\lambda(t)$, η οποία εξελίσσεται αργά με το χρόνο.

Για δεδομένη τιμή της παραμέτρου λ έχουμε :

$$H(\lambda) |n(\lambda)\rangle = E_n |n(\lambda)\rangle \tag{2.17}$$

όπου οι καταστάσεις $|n(\lambda)\rangle$ είναι όλες οι καταστάσεις του συστήματος για τιμή της παραμέτρου ίση με λ . Θεωρούμε πως το σύστημα ξεκινάει από μια κατάσταση $|n(\lambda)\rangle$ τη χρονική στιγμή t = 0 και στη συνέχεια έχουμε την εξέλιξή του στο χρόνο.

Αν η παράμετρος $\lambda(t)$ δεν είχε χαμία εξάρτηση από το χρόνο, τότε :

$$|\psi(t)\rangle = e^{-iE_n t/\hbar} |n\rangle \tag{2.18}$$

Αν επιτρέψουμε στην παράμετρο λ να αλλάζει αργά με το χρόνο, και προσεγγιστικά θεωρήσουμε πως η τιμή της παραμένει σταθερή σε κάθε μικρό διαδοχικό χρονικό βήμα Δt , μπορούμε να θεωρήσουμε πως η φάση εξελίσσεται ως :

$$\prod e^{-iE_n(t)\Delta t/\hbar} = e^{-i\sum E_n(t)\Delta t/\hbar}$$

Στο όριο που το παραπάνω άθροισμα γίνεται ολοχλήρωμα μπορούμε να γράψουμε :

$$|\psi(t)\rangle = e^{-i\theta(t)} |n(t)\rangle$$

όπου προφανώς :

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

Αν τώρα θεωρήσουμε το εξής ansatz :

$$|\psi(t)\rangle = c(t)e^{-i\theta(t)}|n(t)\rangle$$
(2.19)

με,

$$\left|n(t)\right\rangle = \left|n\left(\lambda\left(t\right)\right)\right\rangle$$

και $|n(\lambda)\rangle$ η ιδιοκατάσταση του χρονοανεξάρτητου προβλήματος υπολογισμένη στο $\lambda = \lambda(t)$.

Βάζοντας τη σχέση (2.19) στην (2.17) παίρνουμε :

$$[i\hbar\partial_t - H(t)] |\psi(t)\rangle = 0$$

$$\dot{c}(t) |n(t)\rangle + c(t)\partial_t |n(t)\rangle = 0$$

$$\dot{c}(t) = ic(t)A_n(t)$$

$$A_n(t) = \langle n(t)|i\partial_t n(t) \rangle$$
(2.20)

όπου έχουμε θέσει,

Αν θυμηθούμε τον ορισμό της Berry Connection από την προηγούμενη υποενότητα τότε η παραπάνω είναι μια "Berry Connection στο χρόνο". Προφανώς η λύση της (2.20), είναι το εκθετικό
2 $e^{i\phi(t)}$ με :

$$\phi(t) = \int_0^t A_n(t')dt'$$

Η φάση αυτή μπορεί να θεωρηθεί ως Berry Phase υπολογισμένη σε ανοικτή διαδρομή. Μπορούμε να εκφράσουμε την παραπάνω Berry Phase ως συνάρτηση της παραμέτρου λ, βάση του κανόνα της αλυσίδας. Συγκεκριμένα έχουμε :

$$\partial_t |n(t)\rangle = \lambda \partial_\lambda |n(\lambda)\rangle \longrightarrow A_n(t) = \lambda A_n(\lambda)$$

όπου :

$$A_n(\lambda) = \langle n(\lambda) | i \partial_\lambda n(\lambda) \rangle$$

Με χρήση του ότι $d\lambda = \dot{\lambda} dt$, άμεσα καταλήγουμε :

$$\phi(t) = \int_{\lambda(0)}^{\lambda(t)} A_n(\lambda) d\lambda$$

Το παραπάνω αποτέλεσμα, δείχνει πως η Berry Phase που εισάγεται στην χρονικά εξελισσόμενη κυματοσυνάρτηση, είναι συνάρτηση μόνο της διαδρομής της οποίας διαγράφει το σύστημα στον παραμετρικό χώρο, και ανεξάρτητη από το ρυθμό με τον οποίο αυτό συμβαίνει, δεδομένου ότι η εξέλιξη της παραμέτρου είναι αρκούντως αργή.

Καταλήγουμε λοιπόν πως προσεγγιστικά η λύση μας είναι :

$$|\psi(t)\rangle = e^{i\phi(\lambda(t))}e^{-i\theta(t)} |n(t)\rangle$$

όπου $e^{-i\theta(t)}$ η δυναμική φάση και $e^{i\phi(\lambda(t))}$ η Berry Phase.

Μια ειδική περίπτωση Berry Phase : Zak Phase

Ξεκινήσαμε από μια πολύ γενική ανάλυση στη διακριτή περίπτωση της Berry Phase, και στη συνέχεια αναπτύξαμε ένα μαθηματικό φορμαλισμό που μας οδήγησε σε κάποιους αρκετά πιο σαφείς ορισμούς. Κατόπιν, δείξαμε πως μια Berry Phase μπορεί να εμφανιστεί κατά την αδιαβατική εξέλιξη των παραμέτρων ενός συστήματος.

Για να ορίσουμε μια Berry Phase, καταλαβαίνουμε πως χρειαζόμαστε μια Χαμιλτονιανή η οποία να εξαρτάται από κάποιες παραμέτρους, έτσι ώστε να μπορούμε να έχουμε έναν παραμετρικό χώρο, στον οποίο θα την ορίσουμε και θα μπορέσουμε να κάνουμε υπολογισμούς. Η φύση του προβλήματος και άρα οι πιθανές τιμές των παραμέτρων καθώς επίσης και των λύσεων του συστήματος επηρεάζουν σε μεγάλο βαθμό το αν αυτή η Berry Phase μπορεί να προκύπτει από μια κλειστή διαδρομή στον παραμετρικό χώρο. Υπάρχει μια ευρέως διαδεδομένη εξάρτηση των Χαμιλτονιανών στη Φυσική Στερεάς Κατάστασης, και αυτή είναι από τα κυματάνυσματα του Bloch k.

Συγκεκριμένα, στις κρυσταλλικές δομές εμφανίζονται περιοδικά (άπειρα) συστήματα. Αυτό σημαίνει πως αν έχουμε ένα σύστημα στον ευθύ χώρο, δηλαδή στον χώρο που ορίζουν τα διανύσματα βάσης (πλέγμα Bravais), τότε μπορούμε να το ορίσουμε στον ανάστροφο χώρο ο οποίος και αυτός θα παρουσιάζει παρόμοια γεωμετρία και άρα συμμετρίες με τον ευθύ χώρο. Ο ανάστροφος χώρος είναι αυτός στον οποίο υπάρχουν τα κυματανύσματα Bloch k. Η περιοδικότητα επιτρέπει την εφαρμογή του Θεωρήματος Bloch, ενώ το μέγεθος του ευθέος πλέγματος τις επιτρεπτές τιμές των κυματανυσμάτων Bloch. Έχοντας λοιπόν μια Χαμιλτονιανή στον ευθύ χώρο μπορούμε να την προβάλουμε στον χώρο των k και άρα να την παραμετροποιήσουμε βάση αυτού.

²Υπόθεση : c(t=0) = 1

Αν περιοριστούμε σε μια μονοδιάστατη αλυσίδα τότε έχουμε για μια Χαμιλτονιανή στο χώρο τωνk :

$$H(k) |u_n(k)\rangle = E_n(k) |u_n(k)\rangle$$
(2.21)

όπου :

- Δείκτης n : Αριθμεί την ενεργειακή ζώνη που βρίσκεται το σύστημα.
- Δείκτης k : Το κυματάνυσμα Bloch.

Άρα μπορούμε να ορίσουμε την Berry Connection σε αυτό το χώρο ως :

$$A_n(k) = \langle u_n(k) | \,\partial_k \, | u_n(k) \rangle \tag{2.22}$$

και αντίστοιχα την Berry Phase ως :

$$\gamma_n = i \oint_{\mathcal{C}} \langle u_n(k) | \,\partial_k \, | u_n(k) \rangle \, dk \tag{2.23}$$

Θα πρέπει όμως τώρα να θυμηθούμε πως το σύστημά μας παρουσιάζει περιοδικότητα και άρα αυτή η διαδρομή C στον παραμετρικό χώρο, δεν χρειάζεται να είναι άλλη παρά η πρώτη ζώνη Brillouin, και έτσι έχουμε :

$$\gamma_n = i \int_{-\pi}^{\pi} \langle u_n(k) | \,\partial_k \, | u_n(k) \rangle \, dk \tag{2.24}$$

Η παραπάνω σχέση δίνει τη λεγόμενη Zak Phase.

Κάποια σχόλια είναι απαραίτητα σε αυτό το σημείο :

 Το Θεώρημα Bloch αναφέρει πως αν έχουμε ένα φυσικό σύστημα στο οποίο έχουμε ένα περιοδικό δυναμικό, τότε οι λύσεις της εξίσωσης Schrödinger έχουν τη μορφή επίπεδου κύματος (plane wave) επί μια περιοδική συνάρτηση. Δηλαδή,

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \tag{2.25}$$

όπου $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ η περιοδική συνάρτηση (η οποία παρουσιάζει την ίδια περιοδικότητα με το δυναμικό).

Στην περίπτωση της μονοδιάστα
της αλυσίδας και αν περιοριστούμε χωρίς βλάβη της γενικότητας στη διεύθυν
ση του άξονα x'xθα έχουμε,

$$\psi_k(x) = e^{ikx} u_k(x) \tag{2.26}$$

Η Zak Phase ορίζεται μέσω της περιοδικής συνάρτησης και όχι βάση όλης της λύσης της εξίσωσης Schrödinger.

 Θα δούμε πως η σχέση (2.24) και τελικά η Zak Phase σαν ποσότητα σχετίζεται άμεσα με την περιγραφή Τοπολογικών μοντέλων. Συγκεκριμένα, αφού ορίσουμε την έννοια του Τοπολογικού Αναλλοίωτου, θα δούμε πως η Zak Phase συνδέεται άμεσα με ένα τέτοιο.

2.2 ΡΤ Συμμετρία και Κβαντομηχανική

Σε αυτή την ενότητα θα προσπαθήσουμε συνοπτικά να παρουσιάσουμε τα βασικά χαρακτηριστικά των συστημάτων, τα οποία περιγράφονται από \mathcal{PT} συμμετρικές Χαμιλτονιανές, βασισμένοι στην εργασία του Carl M. Bebder [17], στην οποία έγινε η πρώτη ολοκληρωμένη προσπάθεια επικοινωνίας στην επιστημονική κοινότητα, της θεμελίωσης της περιγραφής συστημάτων τα οποία περιγράφονται από μη ερμιτιανές Χαμιλτονιανές.

Η ερμιτιανότητα τόσο της Χαμιλτονιανής ενός συστήματος, όσο και των τελεστών οι οποίοι περιγράφουν τα παρατηρήσιμα φυσικά μεγέθη, θεωρείται συνήθως ως αξίωμα στην κβαντομηχανική περιγραφή. Ωστόσο θα πρέπει να είναι σαφές πως η ερμιτιανότητα δεν αποτελεί μια απόλυτα φυσική απαίτηση των συστημάτων, αλλά μια μαθηματική ιδιότητα $(H = H^{\dagger})$ η οποία εξασφαλίζει τις δύο βασικές ιδιότητες που θέλουμε να έχει το σύστημα υπό περιγραφή :

- Πραγματικό φάσμα ιδιοτιμών : Κάθε παρατηρήσιμη ποσότητα όπως και η ενέργεια του συστήματος περιμένουμε πως θα έχει πραγματικές τιμές.
- Μοναδιαχή εξέλιξη στο χρόνο : Η πιθανότητα στην πάροδο του χρόνου θα πρέπει να παραμένει σταθερή για το σύστημα. Στην περίπτωση όπου η Χαμιλτονιανή είναι ερμητιανός τελεστής, ο τελεστής χρονικής εξέλιξης είναι μοναδιαχός και η παραπάνω απαίτηση ικανοποιείται τετριμμένα.

Θα πρέπει να είναι σαφές, πως ενώ η ερμιτιανότητα είναι μια ικανή συνθήκη για τα παραπάνω, δεν είναι απαραίτητο πως είναι και αναγκαία. Θεωρητικά μπορεί να υπάρξει μια μη ερμιτιανή Χαμιλτονιανή η οποία πληροί τις δύο αυτές βασικές προϋποθέσεις³.

Η ΡΤ συμμετρία ενός συστήματος

Γνωρίζουμε πως η Χαμιλτονιανή ενός συστήματος, συνδέεται άμεσα με τις συμμετρίες του. Πρακτικά κάθε τελεστής A ο οποίος μετατίθεται με τη Χαμιλτονιανή,

$$[A, H] = 0 (2.27)$$

λέμε πως αποτελεί συμμετρία του φυσικού συστήματος.

Οι συμμετρίες ενός συστήματος χωρίζονται σε διακριτές και συνεχείς. Δύο βασικοί τελεστές που περιγράφουν διακριτές συμμετρίες είναι :

Parity (P̂): Ο τελεστής αυτός ο οποίος ονομάζεται και Χωρική Ανάκλαση ορίζεται βάση της δράσης του στους τελεστές θέσης x̂ και ορμής p̂:

$$\hat{\mathcal{P}}\hat{x}\hat{\mathcal{P}} = -\hat{x} \quad ; \quad \hat{\mathcal{P}}\hat{p}\hat{\mathcal{P}} = -\hat{p} \tag{2.28}$$

και είναι γραμμικός.

 Time Reversal (Î): Ο τελεστής αυτός ο οποίος ονομάζεται Αναστροφή Χρόνου, ορίζεται βάση της δράσης του στους τελεστές θέσης x και ορμής p̂, καθώς και στη φανταστική μονάδα i:

$$\hat{\mathcal{T}}\hat{x}\hat{\mathcal{T}} = \hat{x} \quad ; \quad \hat{\mathcal{T}}\hat{p}\hat{\mathcal{T}} = -\hat{p} \quad ; \quad \hat{\mathcal{T}}\hat{i}\hat{\mathcal{T}} = -i \tag{2.29}$$

και είναι αντιγραμμικός. Προσέχουμε πως όταν ο τελεστής δρα, αλλάζει το πρόσιμο της φανταστικής μονάδας, διότι θα πρέπει να ισχύει πάντα η σχέση μετάθεσης $[\hat{x}, \hat{p}] = i$.

³Προφανώς υπάρχουν και άλλες ιδιότητες που πρέπει να υπάρχουν για ένα σύστημα, αλλά αυτές είναι ίσως οι δύο πιο θεμελιώδεις.

Βάση των δύο αυτών τελεστών ορίζεται ο τελεστής Parity-Time Reversal ($\hat{\mathcal{PT}}$), η δράση του οποίου εκφράζει τη διαδοχική ανάκλαση χώρου και αναστροφή χρόνου. Οι τελεστές $\hat{\mathcal{P}}$ και $\hat{\mathcal{T}}$, προφανώς μετατίθενται μεταξύ τους, ενώ το τετράγωνό τους είναι ίσο με τον ταυτοτικό τελεστή, και άρα εύκολα προκύπτει πως ($\hat{\mathcal{PT}}$)² = 1.

Η σημασία του τελεστή $\hat{\mathcal{PT}}$, έγκειται στην παρατήρηση του ότι υπάρχουν συστήματα που περιγράφονται από Χαμιλτονιανές όπως για παράδειγμα η

$$\hat{H} = \hat{p}^2 + i\hat{x}^3, \tag{2.30}$$

οι οποίες δεν είναι ερμιτιανές, είναι όμως \mathcal{PT} συμμετρικές και παρουσιάζουν πραγματικό φάσμα ιδιοτιμών. Αυτή είναι η αρχή της σκέψης πως θα μπορούσε σε κάποια συστήματα, η ερμιτιανότητα να αντικατασταθεί από την \mathcal{PT} συμμετρία.

PT Κβαντομηχανική : Ενεργειακό φάσμα συστήματος

Ξεκινάμε από την εξής αντικατάσταση της σχέσης ερμιτιανότητας :

$$H = H^{\dagger} \quad \to \quad H = H^{\mathcal{PT}} \tag{2.31}$$

όπου,

$$H^{\mathcal{PT}} = (\mathcal{PT})H(\mathcal{PT}) \tag{2.32}$$

Πρακτικά λοιπόν θέλουμε να ισχύει η σχέση,

$$[\mathcal{PT}, H] = 0 \quad \Rightarrow \quad (\mathcal{PT})H(\mathcal{PT}) = H \tag{2.33}$$

και τότε λέμε πως ο τελεστής \mathcal{PT} είναι πράγματι συμμετρία του συστήματος. Είναι σαφές πως η σχέση (2.33) δεν εξασφαλίζει πως το ενεργειακό φάσμα θα είναι πραγματικό, αφού εν γένει για ένα μη ερμιτιανό τελεστή το φάσμα ιδιοτιμών είναι μιγαδικό. Οι Χαμιλτονιανές οι οποίες μετατίθενται με τον τελεστή \mathcal{PT} λέμε πως έχουν δύο φάσεις, την unbroken και broken. Η unbroken φάση είναι αυτή στην οποία το ενεργειακό φάσμα είναι καθαρά πραγματικό, ενώ στην broken φάση μπορούν να εμφανιστούν και μιγαδικές ιδιοτιμές σε αυτό.

Μπορούμε να δείξουμε με απλό τρόπο πως όταν όλες οι ιδιοκαταστάσεις μιας Χαμιλτονιανής είναι και ιδιοκαταστάσεις του τελεστή \mathcal{PT} , τότε το φάσμα ιδιοτιμών ενέργειας θα είναι πραγματικό. Έστω ότι ισχύουν για κάθε κατάσταση ϕ οι σχέσεις :

$$H\phi = E\phi \qquad \& \qquad \mathcal{PT}\phi = \lambda\phi \tag{2.34}$$

Τότε διαδοχικά μπορούμε να δείξουμε πως :

$$H\phi = E\phi \quad \Rightarrow \quad \mathcal{PT}H\phi = \mathcal{PT}E\phi \quad \Rightarrow \quad H\mathcal{PT}\phi = (\mathcal{PT}E\mathcal{PT})\mathcal{PT}\phi$$

όπως έχουμε αναφέρει στη (2.29) είναι σαφές πως για ένα μιγαδικό αριθμό z = x + iy θα ισχύει :

$$\hat{\mathcal{T}}z\hat{\mathcal{T}} = x - iy = z^{\star}$$

οπότε έχουμε :

$$H\lambda\phi = E^{\star}\lambda\phi \quad \Rightarrow \quad E\lambda\phi = E^{\star}\lambda\phi \quad \Rightarrow \quad E = E^{\star}$$

δεδομένου ότι $\lambda \neq 0$. Η παράμετρος λ είναι πάντα διάφορη του μηδενός, αφού :

$$\mathcal{PT}\phi = \lambda\phi \quad \Rightarrow \quad \mathcal{PT}^2\phi = \mathcal{PT}\lambda\phi \quad \Rightarrow \quad \phi = (\mathcal{PT}\lambda\mathcal{PT})\mathcal{PT}\phi$$

άρα,

$$\phi = \lambda^* \lambda \phi \quad \Rightarrow \quad \|\lambda\|^2 = 1 \quad \Rightarrow \quad \lambda = e^{i\alpha} \neq 0$$

δηλαδή οι ιδιοτιμές του τελεστή PT είναι μια φάση, πάντα διάφορη του μηδενός.

Πλέον θα ονομάζουμε μια γενική Χαμιλτονιανή, \mathcal{PT} συμμετρική, όταν αυτή έχει για κατάλληλες τιμές των παραμέτρων της μια *unbroken* φάση, δηλαδή κάθε ιδιοκατάστασή της είναι και ιδιοκατάσταση του τελεστή \mathcal{PT} , με αποτέλεσμα το φάσμα της να είναι πραγματικό.

Για να διευχολύνουμε την υπόλοι
πη ανάλυσή μας, μπορούμε να στρίψουμε τις καταστάσει
ς ϕ κατά έναν παράγοντα $e^{-ia/2},$

$$\tilde{\phi} = e^{-ia/2}\phi \tag{2.35}$$

Αν θεωρήσουμε πως οι καταστάσεις $\tilde{\phi}$ έχουν την ιδιοτιμή e^{ia} , τότε

$$\mathcal{PT}\tilde{\phi} = e^{ia}\tilde{\phi} \quad \Rightarrow \quad \mathcal{PT}e^{-ia/2}\phi = e^{ia}e^{-ia/2}\phi \quad \Rightarrow \quad (\mathcal{PT}e^{-ia/2}\mathcal{PT})\mathcal{PT}\phi = e^{ia/2}\phi$$

και καταλήγουμε πως :

$$e^{ia/2}\mathcal{PT}\phi = e^{ia/2}\phi \quad \Rightarrow \quad \mathcal{PT}\phi = \phi$$

Βλέπουμε λοιπόν πως με τον κατάλληλο ορισμό μπορούμε να έχουμε καταστάσεις οι οποίες έχουν ιδιοτιμή του τελεστή \mathcal{PT} ίση με +1.

ΡΤ Κβαντομηχανική : Εσωτερικό Γινόμενο & Ορθογωνιότητα Καταστάσεων

Έστω μια Χαμιλτονιανή Hη οποία κατέχει \mathcal{PT} unbroken συμμετρία. Σκεπτόμενοι την περίπτωση του εσωτερικού γινομένου στο χώρο των θέσεων για τις καταστάσεις μιας ερμιτιανής Χαμιλτονιανής,

$$\langle \psi | \chi \rangle = \int dx [\psi(x)]^* \chi(x)$$

μπορούμε να ορίσουμε το αντίστοιχο εσωτερικό γινόμενο για την PT συμμετρική Χαμιλτονιανή,

$$\langle \psi | \chi \rangle^{\mathcal{PT}} = \int dx [\psi(x)]^{\mathcal{PT}} \chi(x) = \int dx [\psi(-x)]^* \chi(x)$$

Ωστόσο αυτός δεν είναι ο ορθός τρόπος ορισμού του εσωτερικού γινομένου για τις καταστάσεις, αφού αν υπολογίσουμε βάση αυτού το εσωτερικό γινόμενο μιας κατάστασης με τον εαυτό της, η ποσότητα που προκύπτει δεν είναι απαραίτητα θετικά ορισμένη.

Για να μπορέσουμε να ξεπεράσουμε αυτό το πρόβλημα θα πρέπει να ορίσουμε έναν τελεστή Cο οποίος να απορροφά το αρνητικό πρόσημο όποτε αυτό είναι απαραίτητο. Κανείς μπορεί να ορίσει έναν τέτοιο τελεστή για κάθε Χαμιλτονιανή με *unbroken* \mathcal{PT} συμμετρία και βάση αυτού να ορίσει το εσωτερικό γινόμενο :

$$\langle \psi | \chi \rangle^{CPT} = \int dx \psi^{CPT}(x) \chi(x)$$
 (2.36)

με :

$$\psi^{\mathcal{CPT}}(x) = \int dy \mathcal{C}(x, y) \psi^{\star}(-y).$$
(2.37)

και :

$$\mathcal{C}(x,y) = \sum_{n=0}^{\infty} \phi_n(x)\phi_n(y)$$
(2.38)

Αναφέρουμε σε αυτό το σημείο πως ο τελεστής C μετατίθεται ταυτόχρονα με την H και με τον τελεστή \mathcal{PT} . Επίσης, ακριβώς επειδή η H μετατίθεται συνολικά με τον τελεστή \mathcal{CPT} , μετατίθεται και με τον τελεστή χρονικής εξέλιξης e^{-iHt} . Καταλήγουμε πως ο ορισμός (2.36), παρέχει θετικά ορισμένο μέτρο για τις καταστάσεις, και ταυτόχρονα την χρονική ανεξαρτησία του, στην εξέλιξη τους.

ΡΤ Κβαντομηχανική : Σύστημα δύο καταστάσεων.

Για σύστημα δύο καταστάσεων μπορούμε να επιλέξουμε ο τελεστής $\mathcal P$ να έχει αναπαράσταση :

$$\mathcal{P} = \begin{pmatrix} 0 & 1\\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \sigma_x \tag{2.39}$$

όπου σ_x ο πίνακας του Pauli, ενώ η δράση του τελεστή \mathcal{T} να είναι απλώς το μιγαδικό συζυγές.

Θεωρούμε τη γενική Χαμιλτονιανή :

$$H = \begin{pmatrix} re^{i\theta} & s \\ s & re^{-i\theta} \end{pmatrix}$$
(2.40)

όπου s, r, $\theta \in \mathbb{R}$. Η H δεν είναι ερμιτιανή, για $\theta \neq 0$ ή π, όμως μετατίθεται με τον τελεστή \mathcal{PT} . Μπορούμε να δούμε πως το φάσμα ιδιοτιμών είναι :

$$E_{\pm} = s\cos\theta \pm \sqrt{s^2 - (r\sin\theta)^2} \tag{2.41}$$

Για να είναι πραγματικό το φάσμα ιδιοτιμών θα πρέπει να ισχύει προφανώς η σχέση :

$$s^2 \ge (r\sin\theta)^2 \tag{2.42}$$

Η ισότητα ορίζει ένα σύνορο στο επίπεδο s-r στο οποίο αλλάζει η φάση του συστήματος από \mathcal{PT} unbroken σε \mathcal{PT} broken, και αντίστροφα.

Οι ιδιοχαταστάσεις του συστήματος γράφονται :

$$+\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\cos\alpha}} \begin{pmatrix} e^{\frac{i\alpha}{2}} \\ e^{-\frac{i\alpha}{2}} \end{pmatrix} \quad ; \quad |-\rangle = \frac{i}{\sqrt{2\cos\alpha}} \begin{pmatrix} e^{-\frac{i\alpha}{2}} \\ -e^{\frac{i\alpha}{2}} \end{pmatrix}$$
(2.43)

όπου $\sin \alpha = \frac{r}{s} \sin \theta.$

Ο τελεστής $\mathcal C$ σε αυτή την περίπτωση είναι ίσος με :

$$C = \frac{1}{\cos \alpha} \begin{pmatrix} i \sin \alpha & 1\\ 1 & -i \sin \alpha \end{pmatrix}$$
(2.44)

Και αν υπολογίσουμε το CPT εσωτερικό γινόμενο προκύπτουν οι σχέσεις ορθογωνιότητας :

$$\langle \pm | \pm \rangle^{CPT} = 1 \quad ; \quad \langle \pm | \mp \rangle^{CPT} = 0$$
 (2.45)

ενώ έχουμε τη σχέση πληρότητας :

$$|+\rangle\langle+|+|-\rangle\langle-| = \begin{pmatrix} 1 & 0\\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$
(2.46)

έχοντας υπολογίσει τα $\langle \pm | \omega \zeta C \mathcal{PT} \sigma U \zeta U \gamma \eta \tau \omega v | \pm \rangle$.

 $\Sigma \chi \delta \lambda io$: Σε όλες τις παραπάνω σχέσεις πρέπει να βρισκόμαστε στην unbroken φάση του συστήματος, διαφορετικά το α γίνεται φανταστικό, και οι καταστάσεις $|\pm\rangle$ που έχουμε δείξει δεν είναι πλέον ιδιοκαταστάσεις του συστήματος. Τέλος, αν δεν είχαμε εισάγει τον τελεστή C, θα παρατηρούσαμε πως μόνο η δράση του \mathcal{PT} δίνει αρνητικό πρόσιμο στο εσωτερικό γινόμενο μιας εκ των καταστάσεων με τον εαυτό της, το οποίο είναι σαφές πως δε μπορεί να είναι αποδεκτό για την περιγραφή φυσικής κατάστασης συστήματος.

Κεφάλαιο 3

To Su-Schrieffer-Heeger (SSH) μοντέλο

Σε αυτό το κεφάλαιο θα ασχοληθούμε με το Su-Schrieffer-Heeger model (SSH-model). Όπως έχουμε ήδη αναφέρει στην εισαγωγή το συγκεκριμένο μοντέλο προτάθηκε ώστε να περιγράφει αλυσίδες πολύ-ακετυλένιου (*poly-acetylene*). Πρόκειται για ένα *tight-binding* μοντέλο το οποίο επιτρέπει μεταβάσεις μεταξύ πρώτων γειτόνων.

Ο δρόμος προς την κατανόηση των Τοπολογικών Μονωτών πλέον, περνάει σίγουρα μέσα από τη διερεύνηση των γενικών χαρακτηριστικών και ιδιοτήτων του SSH μοντέλου. Μέσα στην απλότητά του συνοψίζει όλες τις σημαντικές έννοιες που χρειάζεται κανείς για να καταλάβει πιο πολύπλοκα συστήματα, ενώ μπορεί με απλές προσθήκες να περιγράψει και πιο σύνθετα προβλήματα. Σε αυτό το κεφάλαιο θα ασχοληθούμε στην πρώτη ενότητα, σε μεγάλη έκταση με την ερμιτιανή εκδοχή του μοντέλου, ενώ στη δεύτερη ενότητα θα καλύψουμε τα βασικά της μη ερμιτιανής \mathcal{PT} εκδοχής του. Τέλος, στην τρίτη ενότητα αναπαράγουμε και σχολιάζουμε τα αποτελέσματα της εργασίας των Schomerus et al. [10].

3.1 SSH μοντέλο : Ερμιτιανή Εκδοχή

3.1.1 Η βασική περιγραφή του μοντέλου

Το Su-Schrieffer-Heeger (SSH) model είναι ένα μοντέλο που περιγράφει μια μονοδιάσταση διακριτή αλυσίδα *N*-κυψελίδων στην οποία ζουν σωματίδια χωρίς spin¹. Η αλυσίδα αποτελείται από δύο υποπλέγματα, ενώ κάθε κυψελίδα αποτελείται από δύο σημεία, ένα του ενός υποπλέγματος και ένα του άλλου. Οι επιτρεπτές μεταβάσεις για ένα σωματίδιο θεωρούνται μόνο αυτές μεταξύ πρώτων γειτόνων. Ένα απλό σχήμα όπως το παρακάτω βοηθάει στην καλύτερη κατανόηση του παραπάνω μοντέλου :



Ο σκοπός μας είναι να περιγράψουμε το σύστημα αυτό κατασκευάζοντας μια Χαμιλτονιανή η οποία θα εμπεριέχει τα βασικά χαρακτηριστικά του. Αφού κατασκευάσουμε τη Χαμιλτονιανή, θα

¹Αν θέλουμε να περιγράψουμε φερμιόνια (π.χ. ηλεκτρόνια) μέσω αυτού του μοντέλου θα πρέπει να θεωρήσουμε δύο πολωμένα αντίγραφα αυτού για να έχουμε μια πλήρη περιγραφή.

λύσουμε το πρόβλημα ιδιοτιμών και ιδιοκαταστάσεων και θα προσπαθήσουμε μέσω των αποτελεσμάτων μας να εξάγουμε τα φυσικά χαρακτηριστικά του συστήματος.

Συγκεκριμένα, θα δούμε πως η συμπεριφορά του ενεργειακού φάσματος (ιδιοτιμές) δεν είναι αρκετή ώστε το σύστημα να περιγραφεί πλήρως, και έτσι θα χρειαστεί να κοιτάξουμε την Zak Phase (δηλαδή την Berry Phase υπολογισμένη για 1-D αλυσίδα στην πρώτη ζώνη Brillouin) ή αλλιώς το Wilson Loop.

Οι γενικές μονοσωματιδιακές καταστάσεις του μοντέλου

Για ένα τέτοιο σύστημα, μπορούμε να ορίσουμε τις καταστάσεις μέσω Dirac braket συμβολισμού ως :

$$|m, \alpha\rangle \to |m\rangle \otimes |\alpha\rangle \in \mathcal{H}_{external} \otimes \mathcal{H}_{internal}$$
 (3.1)

όπου :

- m ∈ (1,2,...,N) : Δείκτης που αριθμεί την κυψελίδα στην οποία βρίσκεται το σωματίδιό μας, και ονομάζεται εξωτερικός βαθμός ελευθερίας.
- α ∈ (A, B) : Δείχτης που δείχνει σε ποιο υποπλέγμα μέσα στην κάθε χυψελίδα βρίσκεται το σωματίδιό μας, και ονομάζεται *εσωτερικός βαθμός* ελευθερίας. Προφανώς έχουμε συμβολίσει τα δύο υποπλέγματα με Α και Β αντίστοιχα.

Πραχτιχά κατασχευάζουμε τις καταστάσεις $|m,a\rangle$ ως μίξη καταστάσεων που ανήκουν σε ένα χώρο Hilbert που συμβολίζουμε με $\mathcal{H}_{external}$ και αφορούν τις κυψελίδες, και έναν χώρο Hilbert που συμβολίζουμε $\mathcal{H}_{external}$ και αφορούν τα υποπλέγματα. Η σχέση ορθογωνιότητας μεταξύ μιας κατάστασης στην κυψελίδα m, στο υποπλέγμα a, και μιας κατάστασης στην κυψελίδα n στο υποπλέγμα b είναι η προφανής :

$$\langle m, a | n, b \rangle = \delta_{mn} \delta_{ab} \tag{3.2}$$

Οι παράμετροι του μοντέλου

Σε ό,τι αφορά τις μεταβάσεις κάνουμε την εξής υπόθεση :

Εσωτερικές Μεταβάσεις : $P_{internal} = v$ Εξωτερικές Μεταβάσεις : $P_{external} = w$

Οι παράμετροι v, w παίζουν καθοριστικό ρόλο στη συμπεριφορά του μοντέλου μας αναφορικά με τα φυσικά χαρακτηριστικά του. Θα πρέπει να προσέξουμε εδώ πως δεν υπάρχει πιθανότητα ένα σωματίδιο να μείνει στην ίδια θέση, δηλαδή δεν υπάρχει αυτό που λέμε *on-site* δυναμικό. Οι εσωτερικές ή εξωτερικές μεταβάσεις αφορούν μεταβάσεις της μορφής $A \leftrightarrow B$ και όχι $A \to A$ ή $B \to B$.

Η Χαμιλτονιανή του μοντέλου στον ευθύ χώρο

Για μια αλυσίδα με N κυψελίδες, μπορούμε να γράψουμε τη Χαμιλτονιανή ως υπέρθεση ladder operators μονοσωματιδιακών καταστάσεων στο πλαίσιο του Dirac bracket συμβολισμού ως εξής :

$$\hat{H} = \sum_{m=1}^{N} \left(v \left| m, B \right\rangle \left\langle m, A \right| + v^{\star} \left| m, A \right\rangle \left\langle m, B \right| \right) + \sum_{m=1}^{N-1} \left(w \left| m+1, A \right\rangle \left\langle m, B \right| + w^{\star} \left| m, B \right\rangle \left\langle m+1, A \right| \right)$$

$$(3.3)$$

Η παραπάνω έκφραση μπορεί να απλουστευτεί αρκετά, αν παρατηρήσουμε πως οι εν γένει μιγαδικές παράμετροι v και w μπορούν να θεωρηθούν πραγματικές και μη-αρνητικές, αρκεί ταυτόχρονα να επαναορίσουμε τις καταστάσεις μας, ώστε να απορροφήσουμε τις φάσεις των μιγαδικών αυτών παραμέτρων.

Συγκεκριμένα, γράφοντας τις παραμέτρους σε πολική μορφή μιγαδικού αριθμού ως εξής :

$$v = \|v\|e^{i\phi_v}$$
 & $w = \|w\|e^{i\phi_v}$

και κάνοντας έναν gauge μετασχηματισμό στις καταστάσεις :

$$|m,A\rangle \to e^{-i(m-1)(\phi_v + \phi_w)} |m,A\rangle \qquad \& \quad |m,B\rangle \to e^{-i\phi_v} e^{-i(m-1)(\phi_v + \phi_w)} |m,B\rangle$$

βλέπουμε πως οι ποσότητες που εμφανίζονται στην (3.3) γίνονται :

$$\begin{array}{c} v \left| m, B \right\rangle \left\langle m, A \right| \to \left\| v \right\| \left| m, B \right\rangle \left\langle m, A \right| \\ v^{\star} \left| m, A \right\rangle \left\langle m, B \right| \to \left\| v \right\| \left| m, A \right\rangle \left\langle m, B \right| \\ w \left| m + 1, A \right\rangle \left\langle m, B \right| \to \left\| w \right\| \left| m + 1, A \right\rangle \left\langle m, B \\ w^{\star} \left| m, B \right\rangle \left\langle m + 1, A \right| \to \left\| w \right\| \left| m, B \right\rangle \left\langle m + 1, A \right\rangle \end{array}$$

και έτσι οι φάσεις των μιγαδικών παραμέτρων απορροφούνται πλήρως από τον gauge μετασχηματισμό στις καταστάσεις.

Η παραπάνω παρατήρηση μας επιτρέπει να γράψουμε τη Χαμιλτονιανή του συστήματος στη μορφή :

$$\hat{H} = v \sum_{m=1}^{N} \left(\left| m, B \right\rangle \left\langle m, A \right| + h.c \right) + w \sum_{m=1}^{N-1} \left(\left| m+1, A \right\rangle \left\langle m, B \right| + h.c \right)$$
(3.4)

όπου πλέον έχουμε θεωρήσει πως :

$$v, w \in \mathbb{R} \quad ; \quad v, w \ge 0 \tag{3.5}$$

Μπορούμε να κάνουμε μια ακόμη μετατροπή στον τρόπο που γράφουμε την παραπάνω Χαμιλτονιανή, αν σκεφτούμε πως ο εσωτερικός βαθμός ελευθερίας ζει σε έναν 2-D χώρο.

Κάθε πίνα
κας (και άρα κάθε αναπαράσταση τελεστή) στον 2-D χώρο μπορεί να γραφεί στη βάση των πινά
κων Pauli και του $\sigma_0=\mathbb{I}_2$:

$$\sigma_0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad ; \quad \sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad ; \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad ; \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$
(3.6)

Γράφοντας τις καταστάσεις για τον εσωτερικό βαθμό ελευθερίας στη μορφή :

$$|A\rangle = \begin{pmatrix} 1\\0 \end{pmatrix} \qquad \& \qquad |B\rangle = \begin{pmatrix} 0\\1 \end{pmatrix} \tag{3.7}$$

Μπορούμε άμεσα να δείξουμε πως :

$$|A\rangle\langle B| = \begin{pmatrix} 1\\0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0&1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0&1\\0&0 \end{pmatrix} = \frac{\sigma_x + i\sigma_y}{2}$$
(3.8)

$$|B\rangle\langle A| = \begin{pmatrix} 0\\1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1&0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0&0\\1&0 \end{pmatrix} = \frac{\sigma_x - i\sigma_y}{2}$$
(3.9)

Πρακτικά μπορούμε να σκεφτούμε τους τελεστές $|A\rangle \langle B|$ και $|B\rangle \langle A|$ ως τελεστές δημιουργίαςκαταστροφής για τον εσωτερικό βαθμό ελευθερίας.

Η Χαμιλτονιανή γράφεται τελικά στη μορφή :

$$\hat{H} = v \sum_{m=1}^{N} |m\rangle \langle m| \otimes \sigma_x + w \sum_{m=1}^{N-1} (|m+1\rangle \langle m| \otimes \frac{\sigma_x + i\sigma_y}{2} + h.c.)$$
(3.10)

Η παραπάνω γραφή πέρα από την χομψότητα και χρησιμότητα που έχει, αναδειχνύει και μια αχόμη ιδιαιτερότητα του συστήματος. Λόγω της ανεξαρτησίας του εσωτεριχού από τον εξωτεριχό βαθμό ελευθερίας, αν θεωρήσουμε ένα σύστημα το οποίο έχει \mathcal{N} εσωτεριχούς βαθμούς ελευθερίας τότε θα μπορούμε πάντα να γράφουμε τη Χαμιλτονιανή του συστήματος σε μια παρόμοια μορφή, με χρήση των γεννητόρων της $SU(\mathcal{N})$ ομάδας.

Η Χαμιλτονιανή του μοντέλου στον ευθύ χώρο σε μορφή πίνακα

Μπορούμε να θεωρήσουμε τις μονοσωματιδιαχές χαταστάσεις $|m,a\rangle$ ως χαταστάσεις ενός συνδυασμένου δείχτη $j = \{m,a\}$, μέσω της εξής διαδιχασίας,

$$m = 1, a = A \rightarrow j = 1$$

$$m = 1, a = B \rightarrow j = 2$$

$$m = 2, a = A \rightarrow j = 3$$

$$\vdots \qquad \vdots$$

$$m = N, a = B \rightarrow j = 2 \cdot N$$

δηλαδή επί της ουσίας θεωρούμε πως κάθε σημείο της αλυσίδας είναι ξεχωριστό και έχει το δικό του δείκτη. Έχοντας αυτές τις καταστάσεις και σκεπτόμενοι πως οι μόνες επιτρεπτές μεταβάσεις είναι αυτές πρώτων γειτόνων είναι αρκετά εύκολο να γράψουμε τη Χαμιλτονιανή του συστήματος σε μορφή $2N \times 2N$ πίνακα με στοιχεία της μορφής :

$$H_{ij} = \langle i | \hat{H} | j \rangle \tag{3.11}$$

Ένα απλό παράδειγμα του πίναχα αυτού, για σύστημα με 3 χυψελίδες, είναι το παραχάτω :

$$H = \begin{pmatrix} 0 & v & 0 & 0 & 0 & 0 \\ v & 0 & w & 0 & 0 & 0 \\ 0 & w & 0 & v & 0 & 0 \\ 0 & 0 & v & 0 & w & 0 \\ 0 & 0 & 0 & w & 0 & v \\ 0 & 0 & 0 & 0 & v & 0 \end{pmatrix}$$
(3.12)

Είναι σαφές πως αχόμη χαι στην απλή περίπτωση ενός συστήματος με 3 μόνο χυψελίδες η αναλυτιχή επίλυση του προβλήματος ιδιοτιμών χαι ιδιοχαταστάσεων αν χαι εφιχτή, είναι σίγουρα χρονοβόρα. Καταλαβαίνουμε πως αν θέλουμε να μελετήσουμε ένα ρεαλιστιχό σύστημα με περισσότερες χυψελίδες θα πρέπει να χαταφύγουμε στη χρήση υπολογιστιχής μηχανής για την επίλυσή του.

3.1.2 Η Χαμιλτονιανή του μοντέλου στο χύριο μέρος (bulk)

Η αλυσίδα που θεωρήσαμε αρχικά δεν έκανε καμία υπόθεση για το πλήθος των κυψελίδων αλλά ούτε για τις συνοριακές συνθήκες του προβλήματός μας. Για να μπορέσουμε να συνεχίσουμε στην

αναλυτική περιγραφή θα πρέπει να κάνουμε κάποιες υποθέσεις.

Ξεκινάμε λοιπόν κάνοντας τον πρώτο σημαντικό διαχωρισμό στην αλυσίδα μας μεταξύ του κύριου μέρους (bulk) και των άκρων (edges), σκεπτόμενοι πως η αλυσίδα ρεαλιστικά είναι αρκετά μεγάλη.

Θέλοντας να ασχοληθούμε πρώτα με το χύριο μέρος της αλυσίδας, μπορούμε να θεωρήσουμε το θερμοδυναμικό όριο όπου ο αριθμός των χυψελίδων $N \to \infty$. Επίσης κάνουμε τη λογική υπόθεση πως η φυσική που περιγράφει το χύριο μέρος της αλυσίδας, είναι ανεξάρτητη από το τι συμβαίνει στα άχρα, δεδομένου ότι έχουμε ένα αρχετά μεγάλο σύστημα, οπότε η πληροφορία του τι συμβαίνει στα άχρα δεν εισχωρεί προς το χύριο μέρος. Τέλος, θεωρούμε περιοδικές συνοριαχές συνθήχες τύπου B.v.K (Born von Karman).

 Δ ηλαδή διαδοχικά οι παραδοχές μας είναι οι εξής :

Θερμοδυναμικό όριο
$$N \to \infty$$
.
 \downarrow
Ανεξαρτησία από τα άχρα της αλυσίδας (edges).
 \downarrow
Περιοδικές (Born-von Karman) συνοριακές συνθήκες.²

Με τα παραπάνω έχουμε πρακτικά θεωρήσει πως το κύριο μέρος της αλυσίδας μας περιγράφεται πλέον από ένα κλειστό δαχτυλίδι. Μπορούμε λοιπόν να γράψουμε τη Χαμιλτονιανή του κύριου μέρους, στην οποία θα αναφερόμαστε από δω και πέρα ως *bulk-Hamiltonian*, στη μορφή :

$$\hat{H}_{bulk} = \sum_{m=1}^{N} \left(v \left| m, B \right\rangle \left\langle m, A \right| + w \left| (m \mod N) + 1, A \right\rangle \left\langle m, B \right| \right) + h.c$$
(3.13)

ή με χρήση της γραφής μέσω των πινάχων Pauli :

$$\hat{H}_{bulk} = v \sum_{m=1}^{N} |m\rangle \langle m| \otimes \sigma_x + w \sum_{m=1}^{N} (|(m \mod N) + 1\rangle \langle m| \otimes \frac{\sigma_x + i\sigma_y}{2} + h.c.)$$
(3.14)

όπου ο όρος $(m \mod N) + 1$ εξασφαλίζει ακριβώς την περιοδικότητα της Χαμιλτονιανής, αφού εξορισμού έχουμε :

$$(m \mod N) + 1 = \begin{cases} m+1 & m < N\\ 1 & m = N \end{cases}$$
 (3.15)

Το φυσικό σύστημα λοιπόν στο κύριο μέρος θα περιγράφεται από τις ιδιοκαταστάσεις της bulk-Hamiltonian. Θέλουμε λοιπόν να λύσουμε το πρόβλημα ιδιοτιμών και ιδιοκαταστάσεων :

$$\hat{H}_{bulk} |\Psi_n\rangle = E_n |\Psi_n\rangle \qquad \forall \ n \in (1, \dots, 2 \cdot N)$$
(3.16)

όπου γνωρίζουμε εκ των προτέρων πως το σύστημα θα έχει $2 \cdot N$ καταστάσεις αφού έχουμε N κυψελίδες και σε κάθε κυψελίδα δύο πιθανές καταστάσεις που μπορεί να βρεθεί το σωματίδιο μας.

Δεδομένου ότι θεωρούμε περιοδικό το σύστημά μας για το κύριο μέρος πλέον, έχουμε συμμετρία μετάθεσης στην αλυσίδα μας, και έτσι μπορούμε να μεταβούμε στον ανάστροφο χώρο μέσω των ιδιοκαταστάσεων Bloch. Συγκεκριμένα, η περιοδικότητα σχετίζεται με τον εξωτερικό βαθμό ελευθερίας και άρα μπορούμε να γράψουμε :

$$|k\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{m=1}^{N} e^{ikm} |m\rangle$$
(3.17)

²Η κυματοσυνάρτηση να είναι περιοδική.

όπου θεωρώντας πως όλη η πληροφορία για τον ανάστροφο χώρο εμπεριέχεται στην πρώτη ζώνη Brillouin μπορούμε με ασφάλεια να θεωρήσουμε πως για αλυσίδα με N χυψελίδες έχουμε τις επιτρεπτές τιμές του k να είναι :

$$k \in \{\delta_k, 2\delta_k, \dots, N\delta_k\}$$
; $\delta_k = \frac{2\pi}{N}$ (3.18)

Πλέον λοιπόν έχουμε τις καταστάσεις του συστήματος στον ανάστροφο χώρο (ή χώρο των κυματανυσμάτων Bloch) :

$$|\Psi_n(k)\rangle = |k\rangle \otimes |u_n(k)\rangle \qquad ; \qquad |u_n(k)\rangle = a_n(k) |A\rangle + b_n(k) |B\rangle \tag{3.19}$$

όπου τα ανύσματα $|u_n(k)\rangle$ είναι ιδιοκαταστάσεις της bulk-Hamiltonian, όπως αυτή έχει προβληθεί στο χώρο των ανυσμάτων $|k\rangle$, δηλαδή είναι ιδιοκαταστάσεις της :

$$\hat{H}(k) = \langle k | \, \hat{H}_{bulk} \, | k \rangle \tag{3.20}$$

Μπορούμε να γράψουμε την παραπάνω Χαμιλτονιανή ως 2×2 πίνα
κα 3 :

$$\hat{H}(k) = \begin{pmatrix} 0 & v + we^{-ik} \\ v + we^{ik} & 0 \end{pmatrix}$$
(3.21)

Η μορφή του πίναχα $\hat{H}(k)$ επιτρέπει την άμεση εύρεση των ιδιοτιμών του, δεδομένου ότι :

$$\hat{H}(k)^{2} = \left\| v + w e^{ik} \right\|^{2} \cdot \mathbb{I}_{2} = E(k)^{2} \mathbb{I}_{2}$$
(3.22)

και άρα έχουμε κατευθείαν τη σχέση διασποράς για την εν
έργεια, ως συνάρτηση του κυματανύσματος Blochk:

$$E(k) = \pm \left\| v + w e^{ik} \right\| = \pm \sqrt{v^2 + w^2 + 2v w cosk}$$
(3.23)

όπου είναι σαφές πως για κάθε τιμή του k έχουμε δύο συμμετρικές γύρω από το 0 ιδιοτιμές για την ενέργεια, όπως θα αναμέναμε δεδομένου ότι οι καταστάσεις του εσωτερικού βαθμού ελευθερίας είναι δύο. Πρακτικά το παραπάνω αναδεικνύει ακριβώς την ύπαρξη δύο ενεργειακών ζωνών (bands) για το σύστημά μας. Πιο συγκεκριμένα, μπορούμε να ξεχωρίσουμε τις δύο περιπτώσεις :

• Για $v \neq w$: Παρατηρούμε πως υπάρχει ένα κενό μεταξύ των ενεργειακών κενών της τάξης του 2Δ, όπου :

$$\Delta = \min_{k} E(k) = |v - w| \tag{3.24}$$

Καταλαβαίνουμε λοιπόν πως σε αυτή την περίπτωση το σύστημά μας περιγράφει ένα μονωτή, αφού υπάρχει το λεγόμενο ενεργειακό κενό μεταξύ των ενεργειακών ζωνών (band gap).

Για v = w είναι σαφές πως το κενό των ενεργειακών ζωνών μηδενίζεται, δηλαδή υπάρχει τιμή του k όπου Δ = 0. Αυτό σημαίνει επί της ουσίας πως υπάρχουν λύσεις επίπεδων κυμάτων στο κύριο μέρος της αλυσίδας όπου με απεριόριστα μικρή ενέργεια μπορούν να μεταφέρουν ένα σωματίδιο από τη μια ενεργειακή ζώνη στην άλλη, και άρα το σύστημά μας σε αυτή την περίπτωση θα περιγράφει αγωγό.

 $^{^3\}Sigma$ το Παράρτημα B1. δείχνουμε αναλυτικά τις πράξεις που οδηγούν σε αυτό το αποτέλεσμα.

Η σημαντική παρατήρηση σε αυτό το σημείο είναι πως η σχέση διασποράς δεν είναι ικανή να αποτυπώσει στο μέγιστο τα φυσικά χαρακτηριστικά του συστήματός μας, και αυτό συμβαίνει διότι αν δούμε τη μορφή της (3.23) σε σχέση με τις παραμέτρους v και w, παρατηρούμε πως μπορούμε να τις εναλλάξουμε και η εξίσωση δεν θα αλλάξει. Θα μπορούσαμε να πούμε πως η (3.23) είναι συμμετρική στην εναλλαγή $v \leftrightarrow w$. Ωστόσο οι παράμετροι v και w εκφράζουν διαφορετικές φυσικές διεργασίες για το σύστημά μας, αφού αποτελούν το εσωτερικό και εξωτερικό πλάτος μετάβασης αντίστοιχα για την αλυσίδα. Θα πρέπει να υπάρχει λοιπόν ένα άλλο μέγεθος του οποίου η τιμή θα επηρεάζεται από την τιμή και το ρόλο της κάθε παραμέτρου.

Στο Παράρτημα έχουμε κάνει μια εκτενή ανάλυση της περίπτωσης όπου έχουμε μια γενική Χαμιλτονιανή της μορφής :

$$\hat{H}(k) = d_0(k)\hat{\sigma}_0 + \mathbf{d}(k) \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} = \begin{pmatrix} d_0(k) + d_z(k) & d_x(k) - id_y(k) \\ d_x(k) + id_y(k) & d_0(k) - d_z(k) \end{pmatrix}$$
(3.25)

Αν συγκρίνουμε την περίπτωση του SSH-model με τη γενική, βλέπουμε πως παίρνουμε :

$$d_0(k) = d_z(k) = 0 \quad ; \quad d_x(k) = v + w \cos k \quad ; \quad d_y(k) = w \sin k \tag{3.26}$$

Είναι σαφές πως :

$$(d_x(k) - v)^2 + d_y^2(k) = w^2$$
(3.27)

Η οποία καθώς το k σαρώνει όλη την πρώτη ζώνη Brillouin, μας δίνει εξίσωση κύκλου στο επίπεδο $d_x - d_y$, με κέντρο το K(v, 0) και ακτίνα w.

Ας δούμε λοιπόν μερικά διαγράμματα της σχέσης διασποράς για την ενέργεια E(k), για διαφορετικές τιμές των παραμέτρων v, w στην πρώτη ζώνη Brillouin, και τον αντίστοιχο κύκλο στο επίπεδο $d_x - d_y$ που προκύπτει από την εξίσωση (3.27).



Σχήμα 3.1: Πάνω Διαγραμμάτα : E(k) vs k, Κάτω Διαγράμματα : Άνυσμα $\mathbf{d}(k)$ στο επίπεδο $d_x - d_y$ χαθώς το k σαρώνει την f.B.Z, για τιμές των παραμέτρων (α) v = 1.00, w = 0.00, (β) v = 1.00, w = 0.50, (γ) v = 1.00, w = 1.00, (δ) v = 0.50, w = 1.00, (ε) v = 0.00, w = 1.00

Παρατηρούμε λοιπόν πως αν και η σχέση διασποράς δε μπορεί να ξεχωρίσει τις καταστάσεις με συμμετρικά εναλλαγμένα v και w, ο κύκλος που σχηματίζεται στο επίπεδο $d_x - d_y$ εμφανίζει διαφορετικά χαρακτηριστικά τόσο ως προς τη θέση, αλλά και ως προς την ακτίνα του. Η σημαντικότερη παρατήρηση είναι το σημείο (0,0) του επιπέδου, και το αν εμπεριέχεται στον κύκλο ή όχι που σχηματίζεται. Συγκεκριμένα, είναι σαφές πως στο σημείο (0,0) το ενεργειακό κενό μεταξύ των ζωνών κλείνει και έτσι το σύστημα σε αυτό το σημείο θα περιγράφει αγωγό. Εύκολα βλέπουμε πως αν v > w το (0,0) δεν ζει μέσα στον κύκλο, ενώ για v < w το (0,0) ζει μέσα στον κύκλο. Επίσης υπάρχει και η ειδική κατηγορία όπου v = w όπου το μηδέν βρίσκεται στο σύνορο. Τα παραπάνω δεν είναι απλώς μαθηματικές παρατηρήσεις αλλά σχετίζονται άμεσα με τη Φυσική που περιγράφει η αλυσίδα μας :

- v > w : Περιγράφει μονωτή (τετριμμένη φάση)
- v = w : Περιγράφει αγωγό
- v < w: Περιγράφει μονωτή, ωστόσο επειδή αν προσπαθήσουμε να συρρίχνωσουμε τον χύχλο σε ένα σημείο, δεν υπάρχει τρόπος να αποφύγουμε το (0,0) χωρίς να σηχώσουμε τον χύχλο από το επίπεδο $d_x d_y$, λέμε πως αυτή η φάση ονομάζεται τοπολογιχή.

Ας μελετήσουμε σε αυτό το σημείο τις ακραίες περιπτώσεις για τις παραμέτρους όπου v = 1.00, w = 0.00 και v = 0.00, w = 1.00. Έχουμε αρχικά :

1η Περίπτωση : v = 1.00, w = 0.00 Επιτρεπτές μεταβάσεις : Μόνο εσωτερικές

2η Περίπτωση : v = 0.00, w = 1.00 Επιτρεπτές μεταβάσεις : Μόνο εξωτερικές

Στις δύο αυτές περιπτώσεις, η αλυσίδα ονομάζεται με την αγγλική ορολογία fully dimerized, διότι όπως μπορούμε να δούμε σχηματικά, δημιουργούνται οι εξής φάσεις της :



Γενικά στις δύο αυτές ακραίες περιπτώσεις έχουμε το λεγόμενο *flat band*, δηλαδή οι ενεργειακές ζώνες έχουν σταθερή τιμή για οποιαδήποτε τιμή του κυματανύσματος Bloch k. Το παραπάνω φαίνεται με άμεση αντικατάσταση στη σχέση (3.23) :

- $v = 1.00, w = 0.00 \longrightarrow E(k) = \pm ||1|| = \pm 1$
- $v = 0.00, w = 1.00 \longrightarrow E(k) = \pm ||e^{ik}|| = \pm 1$

Μπορούμε να δούμε πως για τις δύο περιπτώσεις και βάση των σχηματικών αναπαραστάσεων που έχουμε δώσει, προκύπτουν οι ιδιοκαταστάσεις για καθέ διμερές ξεχωριστά :

- 1η Περίπτωση : $\hat{H}(|m,A\rangle \pm |m,B\rangle) = \pm (|m,A\rangle \pm |m,B\rangle) \quad \forall m \in 1, 2, ..., N$
- 2η Περίπτωση : $\hat{H}(|m,B\rangle \pm |m+1,A\rangle) = \pm (|m,B\rangle \pm |m+1,A\rangle) \qquad \forall m \in 1, 2, \dots, N-1$

Αν σκεφτούμε λίγο τη 2η Περίπτωση θα παρατηρήσουμε πως η αλυσίδα θα πρέπει να υποστηρίζει δύο καταστάσεις της μορφής :

$$\hat{H}|1,A\rangle = \hat{H}|N,B\rangle = 0 \tag{3.28}$$

όπου αυτές οι καταστάσεις οφείλουν να έχουν μηδενική τιμή ενέργειας αφού στο μοντέλο μας δεν έχουμε onsite potentials. Θα πρέπει εδώ να κάνουμε μια αρκετά σημαντική παρατήρηση, χρησιμοποιήσαμε το φορμαλισμό για την bulk-Hamiltonian, κάνοντας κάποιες υποθέσεις, και είδαμε πως αν και η σχέση διασποράς δείχνει πως το σύστημα είναι συμμετρικό στις εναλλαγές των παραμέτρων v, w, η απεικόνιση του ανύσματος $\mathbf{d}(k)$ στο επίπεδο $d_x - d_y$ δεν είναι συμμετρική. Αν σκεφτούμε μια ρεαλιστική αλυσίδα με N κυψελίδες τότε στην 1η Περίπτωση που πλέον ονομάζουμε Trivial Case όλα τα σημεία της είναι μαζεμένα σε ζεύγη, ενώ στη 2η Περίπτωση που πλέον ονομάζουμε Topological Case τα δύο ακραία σημεία της δεν έχουν ζεύγος. Αυτές οι καταστάσεις στην Topological Case αποτελούν τις πιο απλές περιπτώσεις Edge States.

3.1.3 Η Χαμιλτονιανή του μοντέλου για πεπερασμένο αριθμό χυψελίδων (Finite Hamiltonian)

Για να καταλάβουμε τη συμπεριφορά ενός ρεαλιστικού συστήματος, θα πρέπει να περιγράψουμε μια αλυσίδα με πεπερασμένο αριθμό κυψελίδων χωρίς να θεωρήσουμε περιοδικές συνοριακές συνθήκες. Για να το πετύχουμε αυτό, στο Σχήμα 3.2 παραθέτουμε διαγράμματα τα οποία προκύπτουν από την επίλυση του προβλήματος ιδιοτιμών και ιδιοκαταστάσεων της Χαμιλτονιανής (3.11).

Πρώτη και σημαντική παρατήρηση μέσω των διαγραμμάτων είναι πως υπάρχουν καταστάσεις μηδενικής ενέργειας για πεπερασμένες τιμές της παραμέτρου v, αρκεί να ισχύει για αυτές τις τιμές πως v < w. Δηλαδή η θεωρητική ανάλυση που κάναμε προηγουμένως για την ακραία περίπτωση, της πλήρως διμερούς αλυσίδας, επιβεβαιώνεται και μέσω των διαγραμμάτων που έχουν αναπαραχθεί λύνοντας το πρόβλημα ιδιοτιμών και ιδιοκαταστάσεων, και στην περίπτωση όπου η v είναι πεπερασμένη. Επίσης από αυτά τα διαγράμματα είναι σαφές πως όσο μεγαλύτερη είναι η αλυσίδα :

- Τόσο πιο "γεμάτο" είναι το φάσμα των ενεργειών, αφού επιτρέπονται περισσότερες καταστάσεις για την αλυσίδα (ακριβώς 2 · N καταστάσεις κάθε φορά).
- Τόσο πιο κοντά στην τιμή για v < w υπάρχουν καταστάσεις με μηδενική ενέργεια. Για να είμαστε πιο συγκεκριμένοι, παρατηρούμε πως οι δύο καταστάσεις με μηδενική ιδιοτιμή ενέργειας υπάρχουν σε περιοχές όπου το v είναι μικρότερο όχι ακριβώς από το w αλλά για λίγο μικρότερες τιμές αυτού. Το συγκεκριμένο φαινόμενο προκύπτει, ακριβώς λόγω του



Σχήμα 3.2: Διαγράμματα ιδιοτιμών ενέργειας για ερμιτιανή αλυσίδα τύπου SSH : (α) Ιδιοτιμές ενέργειας για αλυσίδα N = 10 χυψελίδων με w = 1.00 και $v \in [0, 4)$. (β) Ιδιοτιμές ενέργειας για αλυσίδα N = 10 χυψελίδων με v = 1.00 και $w \in [0, 4)$. (γ), (δ) Όμοια με τα διάγραμματα (α), (β) αντίστοιχα, για αλυσίδα με N = 20 χυψελίδες.

πεπερασμένου αριθμού χυψελίδων. Όσο μεγαλύτερος είναι ο αριθμός χυψελίδων τόσο πιο χοντά φτάνουμε στην αχριβή απαίτηση η φάση να αλλάζει αχριβώς μετά την εναλλαγή της χατάστασης από v < w σε v > w.

Στο Σχήμα 3.3 παρουσιάζουμε τη μορφή των ιδιοκαταστάσεων για τιμές των παραμέτρων v = 1.00 και w = 0.50 και μηδενική ιδιοτιμή ενέργειας⁴, καθώς επίσης και για μια τυχαία τιμή ενέργειας ώστε να μπορέσουμε να συγκρίνουμε τις δύο περιπτώσεις (μηδενικής και πεπερασμένης τιμής ενέργειας).

Από τα διαγράμματα παρατηρούμε τα εξής :

⁴Πιο αχριβής θα ήταν η έχφραση τιμές πάρα πολύ χοντά στο μηδέν. Αφού σε πεπερασμένη αλυσίδα, χαι λόγω της υπολογιστιχής επίλυσης του προβλήματος δεν θα μπορέσουμε να δούμε ποτέ αχριβώς την τιμή μηδέν για τις ιδιοτιμές.



Σχήμα 3.3: Διαγράμματα Ιδιοχαταστάσεων για ερμιτιανή αλυσίδα τύπου SSH ως συνάρτηση σημείων της αλυσίδας. Τα σημεία τύπου A έχουν χρώμα darkcyan και τα σημεία τύπου B έχουν χρώμα cyan. (α), (β) Διαγράμματα Edge State για αλυσίδα με N = 10 κυψελίδες, v = 0.50 και w = 1.00. (γ) Διάγραμμα τυχαίας ιδιοκατάστασης μη μηδενικής ιδιοτιμής. (δ), (ε), (στ) Όμοια με τα διαγράμματα (α), (β), (γ) αντίστοιχα, για αλυσίδα με N = 20 κυψελίδες.

- Λόγω του ότι η αλυσίδα είναι πεπερασμένη οι ιδιοτιμές της που φαίνονται να έχουν μηδενική τιμή, έχουν για την ακρίβεια μια τιμή πολύ κοντά στο μηδέν. Επίσης είναι σαφές πως όσο μεγαλύτερη είναι η αλυσίδα μας, τόσο πιο κοντά στο μηδέν θα είναι αυτές οι ιδιοτιμές.
- Οι καταστάσεις με ιδιοτιμή ενέργειας πολύ κοντά στο μηδέν παρατηρούμε πως είναι εντοπισμένες στα άκρα της αλυσίδας ενώ αυτές με πεπερασμένη ιδιοτιμή ενέργειας έχουν μια μορφή που εισχωρεί σε όλη την αλυσίδα. Ακόμη και αν έχουμε επιλέξει τυχαία μια εκ των καταστάσεων πεπερασμένης τιμής ενέργειας, όλες οι υπόλοιπες καταστάσεις απλώνονται εξίσου σε όλη την αλυσίδα, και μόνο οι δύο καταστάσεις με τιμή πολύ κοντά στο μηδέν εμφανίζουν τέτοια συμπεριφορά. Δηλαδή αυτές είναι οι μόνες καταστάσεις που είναι εντοπισμένες στα άκρα της αλυσίδας. Για αυτό και ονομάζονται Edge States.

Σημαντικό είναι να αναφέρουμε εδώ πως για οποιεσδήποτε τιμές των παραμέτρων για τις οποίες ισχύει ότι v > w έχουμε καταστάσεις που απλώνονται σε όλη την αλυσίδα και δεν είναι εντοπισμένες.

Καταλήγουμε λοιπόν στο εξής εξαιρετικά σημαντικό συμπέρασμα : Η διαφορά μεταξύ της Trivial Case και της Topological Case παρόλο που και οι δύο περιγράφουν φάσεις μονωτή για την αλυσίδα, είναι ακριβώς στο ότι στην Topological Case το σύστημα μπορεί να υποστηρίξει καταστάσεις οι οποίες είναι εντοπισμένες στα άκρα της αλυσίδας (Edges States), ενώ στην Trivial Case κάτι τέτοιο δε μπορεί να συμβεί.

3.1.4 Συμμετρία και Τοπολογία για το μοντέλο

Σε αυτό το σημείο έχουμε περιγράψει με αρχετά ευθύ τρόπο το σύστημα της αλυσίδας τύπου SSH. Μπορούμε πλέον να δούμε τι ρόλο παίζει η Συμμετρία χαι η Τοπολογία στο συγχεχριμένο μοντέλο, υπό την έννοια πως όλα αυτά τα οποία παρατηρήσαμε προηγουμένως θα πρέπει με χάποιο τρόπο να σχετίζονται με τις συμμετρίες του συστήματος, ενώ θα γίνει σαφές γιατί ονομάσαμε τη μια περίπτωση Trivial χαι την άλλη Topological σε ό,τι αφορά τις φάσεις όπου το σύστημα περιγράφει μονωτή.

Συμμετρία και Χειραλική Συμμετρία (Chiral Symmetry)

Στην επιστήμη της Φυσικής γνωρίζουμε πόσο σημαντικό είναι για την περιγραφή ενός συστήματος να βρούμε τις συμμετρίες τις οποίες αυτό κατέχει. Στην Κβαντομηχανική συγκεκριμένα όταν αναφερόμαστε σε συμμετρίες του συστήματος, αυτό που εννοούμε συνήθως είναι τους τελεστές εκείνους που μετατίθενται με τη Χαμιλτονιανή (και άρα έχουνε κοινές ιδιοκαταστάσεις με αυτή). Αν θεωρήσουμε ένα μοναδιακό τελεστή \hat{U} ο οποίος αναπαριστά μια συμμετρία της Χαμιλτονιανής τότε για αυτόν θα ισχύει πως :

$$\left[\hat{H},\hat{U}\right] = 0 \quad \Rightarrow \quad \hat{U}\hat{H}\hat{U}^{\dagger} = \hat{H} \tag{3.29}$$

Υπάρχει μια μορφή συμμετρίας η οποία χρησιμοποιείται ευρέως στη Φυσική Συμπυκνωμένης Ύλης, η οποία ονομάζεται Χειραλική Συμμετρία (Chiral Symmetry). Αυτή η συμμετρία σχετίζεται όχι με το μεταθέτη αλλά με τον αντιμεταθέτη της Χαμιλτονιανής με ένα μοναδιακό τελεστή. Ας υποθέσουμε το μοναδιακό τελεστή $\hat{\Gamma}$ ο οποίος αποτελεί χειραλική συμμετρία για το σύστημά μας, τότε για αυτόν θα ισχύει πως :

$$\left\{\hat{H},\hat{\Gamma}\right\} = 0 \quad \Rightarrow \quad \hat{\Gamma}\hat{H}\hat{\Gamma}^{\dagger} = -\hat{H} \tag{3.30}$$

Για έναν τελεστή χειραλιχής συμμετρίας $\hat{\Gamma}$ θα πρέπει να ισχύουν εν γένει οι εξής ιδιότητες :

- Μοναδιαχός : $\hat{\Gamma}^{\dagger}\hat{\Gamma}=1$
- Ερμιτιανός : $\hat{\Gamma}^{\dagger} = \hat{\Gamma}$
- Μοναδιαχός και Ερμιτιανός : $\hat{\Gamma}^2=1$
- Τοπικός σε επίπεδο υποπλέγματος.

Στα πλαίσια του SSH μοντέλου η τοπικότητα δηλώνεται μέσω της σχέσης :

$$\langle m, \alpha | \hat{\Gamma} | m', \alpha' \rangle = 0$$
 yia $m \neq m'$ yai $\forall \alpha, \alpha' \in (A, B)$ (3.31)

Επίσης με την τοπικότητα του τελεστή $\hat{\Gamma}$, μπορούμε να τον ορίσουμε με τέτοιο τρόπο ώστε να δρα στους εσωτερικούς βαθμούς ελευθερίας της κάθε κυψελίδας της αλυσίδας με τον ίδιο τρόπο. Συγκεκριμένα, αν θεωρήσουμε ένα μοναδιακό τελεστή $\hat{\gamma}$ ο οποίος δρα στους εσωτερικούς βαθμούς ελευθερίας μόνο, τότε μπορούμε να ορίσουμε τον τελεστή $\hat{\Gamma}$ ως το ευθύ άθροισμα τελεστών $\hat{\gamma}$,

$$\hat{\Gamma} = \hat{\gamma} \oplus \hat{\gamma} \oplus \dots \oplus \hat{\gamma} = \bigoplus_{m=1}^{N} \hat{\gamma} \qquad N : \text{ arighting} (3.32)$$

Η χειραλική συμμετρία αναφέρεται και ως υποπλεγματική συμμετρία. Για δεδομένο τελεστή χειραλικής συμμετρίας Γ΄ μπορούμε να ορίσουμε ορθογώνιους υποπλεγματικούς προβολικούς τελεστές ως εξής :

$$\hat{P}_A = \frac{1}{2} \left(\hat{\mathbb{I}} + \hat{\Gamma} \right) \quad ; \quad \hat{P}_B = \frac{1}{2} \left(\hat{\mathbb{I}} - \hat{\Gamma} \right) \tag{3.33}$$

για τους οποίους ισχύουν (όπως και για κάθε ζεύγος προβολικών τελεστών) :

1.
$$\hat{P}_A + \hat{P}_B = \hat{\mathbb{I}}$$

2. $\hat{P}_A \hat{P}_B = \hat{P}_B \hat{P}_A = 0$

επειδή ισχύει $\{\hat{H},\hat{\Gamma}\}=0$ προχύπτουν οι σχέσεις :

$$\hat{P}_A \hat{H} \hat{P}_A = \hat{P}_B \hat{H} \hat{P}_B = 0 \quad ; \quad \hat{H} = \hat{P}_B \hat{H} \hat{P}_A + \hat{P}_A \hat{H} \hat{P}_B$$
(3.34)

Ένα σύστημα το οποίο έχει Χειραλική Συμμετρία έχει μια πολύ ενδιαφέρουσα ιδιότητα αναφορικά με το φάσμα του, το οποίο είναι συμμετρικό. Αυτό που εννοούμε με την παραπάνω δήλωση είναι πως για κάθε μια κατάσταση με ενέργεια Ε θα υπάρχει μια χειραλικά συμμετρική κατάσταση με ενέργεια -E. Εύκολα δείχνουμε :

$$\hat{H} |\psi_n\rangle = E_n |\psi_n\rangle \Rightarrow \hat{\Gamma}\hat{H} |\psi_n\rangle = E_n \hat{\Gamma} |\psi_n\rangle \Rightarrow \hat{H} \left(\hat{\Gamma} |\psi_n\rangle\right) = -E_n \left(\hat{\Gamma} |\psi_n\rangle\right)$$
(3.35)

Η συγκεκριμένη ιδιότητα πέρα από κομψή σημαίνει και κάτι πολύ σημαντικό για την αλυσίδα, αφού :

• Για $E_n \neq 0$ οι $|\psi_n\rangle$ και $\tilde{\psi}_n = \hat{\Gamma} |\psi_n\rangle$ είναι διαφορετικές ιδιοκαταστάσεις της Χαμιλτονιανής, και άρα πρέπει να είναι κάθετες μεταξύ τους :

$$\langle \psi_n | \tilde{\psi}_n \rangle = 0 \Rightarrow \langle \psi_n | \hat{\Gamma} | \psi_n \rangle = 0 \Rightarrow \langle \psi_n | \hat{P}_A | \psi_n \rangle = \langle \psi_n | \hat{P}_B | \psi_n \rangle$$
(3.36)

το οποίο σημαίνει πως κάθε κατάσταση μη μηδενικής ενέργειας μπορεί να βρεθεί στο πλέγμα Α "ισοδύναμα" με το πλέγμα Β.

• Για $E_n = 0$ μπορούμε να διαλέξουμε οι ιδιοκαταστάσεις να ανήκουν μόνο σε ένα από τα δύο πλέγματα :

$$\hat{H} |\psi_n\rangle = 0 \Rightarrow \hat{H} \hat{P}_{A/B} |\psi_n\rangle = \hat{H} \left(|\psi_n\rangle \pm \hat{\Gamma} |\psi_n\rangle \right) = 0$$
(3.37)

Οι καταστάσεις αυτές είναι ιδιοκαταστάσεις του $\hat{\Gamma}$, και κατά συνέπεια είναι οι ίδιες τα χειραλικά συμμετρικά ζεύγη του εαυτού τους.

Για το SSH μοντέλο μπορούμε να ορίσουμε τους προβολιχούς τελεστές :

$$\hat{P}_A = \sum_{m=1}^{N} |m, A\rangle \langle m, A| \quad \& \quad \hat{P}_B = \sum_{m=1}^{N} |m, B\rangle \langle m, B|$$
(3.38)

και με χρήση του γενικού ορισμού μπορούμε να γράψουμε για τον τελεστή χειραλικότητας :

$$\hat{\Sigma}_z = \hat{P}_A - \hat{P}_B \tag{3.39}$$

Μπορούμε τώρα να θυμηθούμε πως ένα μεγάλο κομμάτι της ανάλυσής μας αφορά το χώρο των κυματανυσμάτων Bloch k (επί της ουσίας το χώρο των ορμών). Είναι σημαντικό λοιπόν να καταλαβαίνουμε τις συμμετρίες του συστήματος και σε αυτό το χώρο. Ο τελεστής χειραλικής συμμετρίας ταυτίζεται με τον πίνακα σ_z του Pauli. Γενικά σε ένα σύστημα με δύο εσωτερικές καταστάσεις αν απαιτήσουμε χειραλική συμμετρία τότε με χρήση της γενικής Χαμιλτονιανής (Π.1), παίρνουμε :

$$\sigma_z \hat{H}(k) \sigma_z = -\hat{H}(k) \quad \Rightarrow \quad d_z(k) = 0 \quad \forall k \tag{3.40}$$

Βλέπουμε λοιπόν πως η απαίτηση το σύστημα να έχει τη χειραλική συμμετρία, αναγκάζει το άνυσμα $\mathbf{d}(k)$ να κείτεται στο επίπεδο $d_x - d_y$. Θα δούμε στη συνέχεια πως αυτή ακριβώς η ιδιότητα του συστήματος και κατ΄επέκταση του ανύσματος $\mathbf{d}(k)$ είναι που καθιστά τις δύο φάσεις μονωτή ξεχωριστές βάση της Τοπολογίας.

Τοπολογικά αναλλοίωτα

Πριν ξεκινήσουμε να ορίζουμε τοπολογικά αναλλοίωτα για το μοντέλο μας, θα πρέπει πρώτα να ορίσουμε τι καθιστά μια ποσότητα τοπολογικό αναλλοίωτο γενικά.

Αρχικά μια πολύ βασική έννοια που χρειαζόμαστε είναι αυτή της Αδιαβατικής Παραμόρφωσης μιας Χαμιλτονιανής. Για να θεωρηθεί μια παραμόρφωση αδιαβατική σε μια insulating Hamiltonian (Χαμιλτονιανή που περιγράφει μονωτή), θα πρέπει :

- Να αλλάζει τις παραμέτρους του συστήματος με συνεχή τρόπο.
- Να διατηρεί τις βασικές (κύριες) συμμετρίες του συστήματος.
- Να αφήνει το χενό στο χύριο μέρος (bulk) χοντά στην E = 0 ανοιχτό.

Δύο insulating Hamiltonian θεωρούνται αδιαβατικά ισοδύναμες (Adiabatically Equivalent Hamiltonians), αν υπάρχει αδιαβατική παραμόρφωση, τέτοια ώστε να μπορούμε να τις "συνδέσουμε", σεβόμενοι κάθε σημαντική συμμετρία τους.

Τοπολογικό Αναλλοίωτο (Topological Invariant) ορίζουμε έναν αχέραιο αριθμό ο οποίος χαραχτηρίζει μια insulating Hamiltonian και δεν αλλάζει κάτω από αδιαβατικές παραμορφώσεις. Είναι σημαντικό να γνωρίζουμε πως τα τοπολογικά αναλλοίωτα είναι καλώς ορισμένες στο θερμοδυναμικό όριο, και πως εξαρτώνται από τις συμμετρίες του συστήματος.

Τοπολογικό Αναλλοίωτο : Αριθμός Περιέλιξης ν

Στην υποενότητα (3.1.2) παρουσιάσαμε κάποια διαγράμματα τα οποία αναπαριστούσαν τη μορφή του ανύσματος $\mathbf{d}(k)$ στο επίπεδο $d_x - d_y$ καθώς το k σαρώνει την πρώτη ζώνη Brillouin για διαφορετικές τιμές των παραμέτρων v και w. Στη συνέχεια κάναμε κάποια συζήτηση για το αν ο κύκλος που σχηματιζόταν εμπεριείχε το σημείο (0,0) ή αν όχι. Η παραπάνω διαδικασία μπορεί να γραφεί φορμαλιστικά μέσω του αριθμού περιέλιξης (winding number).

Συγκεκριμένα μπορούμε να ορίσουμε το μοναδιαίο άνυσμα :

$$\tilde{\mathbf{d}}(k) = \frac{\mathbf{d}(k)}{|\mathbf{d}(k)|} \quad ; \quad \mathbf{d}(k) \neq 0 \quad \forall k$$
(3.41)

όπου επί της ουσίας προβάλουμε την καμπύλη που θα σχηματίζει το γενικό $\mathbf{d}(k)$ στο μοναδιαίο κύκλο. Μέσω του μοναδιαίου ανύσματος μπορούμε να ορίσουμε τον αριθμό περιέλιξης ως :

$$\nu = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \left(\tilde{\mathbf{d}}(k) \times \frac{d}{dk} \tilde{\mathbf{d}}(k) \right)_{z} dk$$
(3.42)

Ένας αχόμη τρόπος γραφής του αριθμού περιέλιξης μπορεί να γίνει αν γράψουμε την bulk Hamiltonian ως :

$$H(k) = \begin{pmatrix} 0 & h(k) \\ h^{\star}(k) & 0 \end{pmatrix} \quad ; \quad h(k) = d_x(k) - id_y(k)$$
(3.43)

Μπορούμε να δούμε πως :

$$\nu = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\pi}^{\pi} dk \frac{d}{dk} \log h(k)$$
(3.44)

Συνεχίζοντας τις πράξεις, μέσω της πολικής μορφής του h(k), και αν παρατηρήσουμε πως για την περίπτωσή μας $||h(\pi)|| = ||h(-\pi)||$,

$$\nu = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\pi}^{\pi} dk \frac{d}{dk} \log\left(\|h(k)\| e^{i\tilde{\phi}(k)}\right) = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\pi}^{\pi} dk \frac{d}{dk} \left(\log\left(\|h(k)\|\right) + i\tilde{\phi}(k)\right)$$
$$= \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dk \frac{d}{dk} \tilde{\phi}(k)$$

όπου $\tilde{\phi}(k) = -\tan^{-1}\left(\frac{w\sin k}{v+w\cos k}\right)$, δεδομένων των σχέσεων (3.26) που έχουμε βρει.

Ας υπολογίσουμε την Zak Phase από τη σχέση (2.24) για τη γενική Χαμιλτονιανή (3.25), βάση της ανάλυσης που κάνουμε στο Παράρτημα Α.

Έχουμε τη σχέση (Π.10) :

$$|\psi_{\pm}(k)\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\begin{array}{c} \pm e^{-i\phi(k)} \\ 1 \end{array}\right)$$
(3.45)

όπου προσθέσαμε για πληρότητα, την εξάρτηση από την παράμετρο k, σε αντίθεση με τη σχέση (Π.10) όπου χάναμε μια πιο γενική ανάλυση. Επίσης $\phi(k) = \tan^{-1} \left(\frac{w \sin k}{v + w \cos k} \right)$.

Διαδογικά λοιπόν :

$$\begin{split} \gamma_{\pm} &= i \int_{-\pi}^{\pi} dk \left\langle \psi_{\pm}(k) \right| \frac{d}{dk} \left| \psi_{\pm}(k) \right\rangle = \frac{i}{2} \int_{-\pi}^{\pi} dk \left(\begin{array}{cc} \pm e^{i\phi(k)} & 1 \end{array} \right) \frac{d}{dk} \left(\begin{array}{cc} \pm e^{-i\phi(k)} \\ 1 \end{array} \right) \\ &= \frac{1}{2} \int_{-\pi}^{\pi} dk \frac{d}{dk} \phi(k) \end{split}$$

Βλέπουμε λοιπόν βάση των παραπάνω υπολογισμών πως $\gamma_{\pm}=\pm\pi
u$. Ο αριθμός περιέλιξης u, και η Zak Phase γ_±, αλλά και γενικότερα η Berry Phase, έχουν μια σαφή συσχέτιση.

Με απλές πράξεις μπορούμε να υπολογίσουμε τον αριθμό περιέλιξης :

$$\nu = \begin{cases} 1 & v < w \\ 0 & v > w \\ \text{апрообло́рьото} & v = w \end{cases}$$
(3.46)

Είναι σαφές πως για v < w έχουμε διαφορετικό αριθμό περιέλιξης από ότι για v > w, και κατ' επέκταση και διαφορετική Zak Phase. Καταλαβαίνουμε λοιπόν πως αν και από τη σχέση διασποράς δε μπορούμε να ξεχωρίσουμε τις δύο περιπτώσεις, ο υπολογισμός της Zak Phase χαθιστά εφιχτό το διαχωρισμό τους.

Οι παραπάνω περιπτώσεις αποτελούν Τοπολογικά ξεχωριστές περιπτώσεις, αφού μπορούμε να τις ξεχωρίσουμε μέσω του αριθμού περιέλιξης ν, ο οποίος εξαρτάται από τη διαδρομή ολοκλήρωσης στο επίπεδο $d_x - d_y$. Συγκεκριμένα δεν υπάρχει τρόπος να αλλάξουμε τη διαδρομή μας με συνεχή τρόπο και να περάσουμε από τη μια κατάσταση στην άλλη, χωρίς να περάσουμε από το κέντρο του επιπέδου (και άρα να κλείσουμε το κενό κοντά στην E=0) ή χωρίς να σηκώσουμε τη διαδρομή από το επίπεδο (αφού τότε θα σπάγαμε τη Χειραλική Συμμετρία).

Τοπολογικό Αναλλοίωτο : Αριθμός των Edge States

Σε αυτό το σημείο θα προσπαθήσουμε να δείξουμε μέσω λογικών επιχειρημάτων πως ο αριθμός των *Edge States* σε μια αλυσίδα παραμένει σταθερός κάτω από αδιαβατικές παραμορφώσεις.

Ας θεωρήσουμε μια χειραλική αλυσίδα στο θερμοδυναμικό της όριο $N \to \infty$. Η συγκεκριμένη αλυσίδα μπορεί να έχει έναν αριθμό Δn από Edge States στο αριστερό της άκρο οι οποίες έχουν ενέργεια $-\epsilon < E < \epsilon$, όπου ϵ να βρίσκεται μέσα στο ενεργειακό εύρος του κύριου μέρους (π.χ το 2Δ για το SSH μοντέλο, όπου Δ δίνεται από τη σχέση (3.24)). Σε αυτό το εύρος ενεργειών μπορεί να υπάρχουν καταστάσεις μη μηδενικής ενέργειας οι οποίες κατ'ανάγκη θα έχουν ένα συμμετρικά χειραλικό ζεύγος, το οποίο θα βρίσκεται στο αριστερό μέρος και στην ίδια κυψελίδα με αυτά (αφού η χειραλική συμμετρία είναι τοπική συμμετρία). Επίσης μπορεί να υπάρχει πεπερασμένος αριθμός (λόγω του ενεργειαχού κενού στο κύριο μέρος) από καταστάσεις με μηδενική τιμή ενέργειας οι οποίες όπως έχουμε επιχειρηματολογήσει είναι τα ζεύγη του εαυτού τους. Αυτές οι καταστάσεις μπορεί να βρίσκονται είτε στο υποπλέγμα A είτε στο υποπλέγμα B, και άρα να έχουμε N_A και N_B αριθμό Edge States στο χάθε υποπλέγμα αντίστοιχα.

Αν φανταστούμε πως προχαλούμε μια αδιαβατική παραμόρφωση στην αλυσίδα, υπάρχουν δύο πιθανά σενάρια για το τι μπορεί να συμβεί. Μπορεί μια κατάσταση με μη μηδενική ιδιοτιμή ενέργειας να μετατραπεί σε κατάσταση μηδενικής ιδιοτιμής, ωστόσο αυτό θα σήμαινε πως και η αντίστοιχη χειραλικά συμμετρική κατάσταση θα γίνει κατάσταση μηδενικής ιδιοτιμής ενέργειας. Όταν κάτι τέτοιο συμβεί θα υπάρξει αύξηση καταστάσεων μηδενικής ιδιοτιμής ενέργειας κατά ένα στο πλέγμα Α και στο πλέγμα Β αντίστοιχα. Σε πλήρη αναλογία, μπορεί μια κατάσταση με μηδενική ιδιοτιμή ενέργειας να πάρει πεπερασμένη τιμή ενέργειας, όμως πάλι λόγω της χειραλικής συμμετρίας θα πρέπει να δημιουργηθεί και το αντίστοιχο χειραλικά συμμετρικό της ζεύγος (το αντίστροφο της προηγούμενη διαδικασίας). Κατ΄ανάγκη λοιπόν ο αριθμός των μηδενικών ιδιοτιμών ενέργειας θα μειωθεί κατά ένα σε κάθε ένα υποπλέγμα.

Λόγω της αδιαβατικής παραμόρφωσης οι κυματοσυναρτήσεις των άκρων μπορεί να αλλάξουν με τέτοιο τρόπο ώστε να πηγαίνουν πιο βαθιά μέσα στο κύριο μέρος. Ωστόσο λόγω της ύπαρξης του ενεργειακού κενού, οι καταστάσεις μηδενικής ιδιοτιμής ενέργειας θα πρέπει να έχουν εκθετική μείωση όσο πηγαίνουν προς το κύριο μέρος, και έτσι δε μπορεί να αλλάξει ο αριθμός των N_A και N_B με αυτό τον τρόπο.

Σε κάθε μια από τις παραπάνω περιπτώσεις ο αριθμός $N_A - N_B$ παραμένει σταθερός. Κατ'επέκταση ο συνολικός αριθμός *Edge States* στο αριστερό άκρο της αλυσίδας παραμένει σταθερός.

To Bulk-Boundary Correspondence στο SSH μοντέλο

Η ουσία του bulk-boundary correspondence αποτυπώνεται χρησιμοποιώντας τις έννοιες :

- ν : Αριθμός Περιέλιξης.
- Δn : Αριθμός Καταστάσεων στο ένα άχρο.

Έχουμε δείξει με απλό τρόπο πως για την Trivial Case, ισχύει $\nu = 0$ και $\Delta n = 0$, ενώ για την Topological Case, ισχύει $\nu = 1$ και $\Delta n = 1$. Πρακτικά βλέπουμε πως μπορούμε να χρησιμοποιήσουμε τον ν , ο οποίος είναι ορισμένος, και υπολογισμένος στο κύριο μέρος της αλυσίδας, για να προβλέψουμε τον αριθμό των καταστάσεων στα άκρα. Αυτή είναι η πιο απλή μορφή bulkboundary correspondence. Είναι σημαντικό να αναφέρουμε σε αυτό το σημείο, πως τα παραπάνω αποτελούν λογικά επιχειρήματα, και όχι αυστηρές αποδείξεις. Επί της ουσίας υπάρχει η ένδειξη για τη συσχέτιση των δύο, και μέσω υπολογισμών και προσομοιώσεων κώδικα έχουμε δει πως το παραπάνω ισχύει για το συγκεκριμένο μοντέλο. Ωστόσο η γενική απόδειξη του bulk-boundary correspondence αποτελεί ανοικτό πρόβλημα στον κλάδο των Τοπολογικών Μονωτών.

3.2 SSH μοντέλο : Μη Ερμιτιανή (*PT*) Εκδοχή

Σε αυτή την ενότητα του κεφαλαίου θα γενικεύσουμε το απλό SSH μοντέλο στη μη ερμιτιανή εκδοχή του. Γενικά υπάρχουν πολλές επιλογές που μπορεί κανείς να κάνει ώστε να θέσει μη ερμιτιανό το προηγούμενο μοντέλο. Ωστόσο εμείς θα περιοριστούμε μόνο στην περίπτωση όπου η προσθήκη ενός on-site καθάρα φανταστικού (imaginary) δυναμικού καταργεί την ερμιτιανότητα καθώς επίσης σπάει τη χειραλική συμμετρία, ενώ πλέον το σύστημά μας θα έχει την *PT* συμμετρία.

Βασιχή Περιγραφή

Ξεκινάμε ξανά όπως και στην υποενότητα (3.1.1) με τη Χαμιλτονιανή της μορφής :

$$\hat{H}^{\text{hop}} = v \sum_{m=1}^{N} \left(\left| m, B \right\rangle \left\langle m, A \right| + h.c \right) + w \sum_{m=1}^{N-1} \left(\left| m+1, A \right\rangle \left\langle m, B \right| + h.c \right)$$
(3.47)

την οποία ονομάζουμε hopping Hamiltonian επειδή αχριβώς μας δίνει τις μεταβάσεις στην αλυσίδα. Επίσης ορίζουμε την potential Hamiltonian :

$$\hat{H}^{\text{pot}} = iu \sum_{m=1}^{N} \left(\left| m, A \right\rangle \left\langle m, A \right| - \left| m, B \right\rangle \left\langle m, B \right| \right)$$
(3.48)

όπου είναι σαφές πως εκφράζει ακριβώς το on-site φανταστικό δυναμικό (για αυτό και το όνομα της). Το πλήρες σύστημα περιγράφεται μέσω της Χαμιλτονιανής :

$$\hat{H} = \hat{H}^{\text{hop}} + \hat{H}^{\text{pot}} \tag{3.49}$$

Σημαντικό σε αυτό το σημείο είναι να αναφέρουμε πως οι παράμετροι του συστήματος μας πλέον είναι τρεις, πραγματικές και θετικές :

$$u, v, w \in \mathbb{R} \qquad u, v, w \ge 0 \tag{3.50}$$

Η προσθήκη του καθαρά φανταστικού δυναμικού με αυτό τον τρόπο, πρακτικά καθιστά το σύστημα ικανό να περιγράψει διατάξεις στις οποίες η αλυσίδα έχει διαδοχικά σημεία με gain και loss⁵.

Αν χρησιμοποιήσουμε την περιγραφή του τύπου (3.11), βλέπουμε εύκολα πως για ένα σύστημα με 3 κυψελίδες θα έχουμε πλέον :

$$H = \begin{pmatrix} iu & v & 0 & 0 & 0 & 0 \\ v & -iu & w & 0 & 0 & 0 \\ 0 & w & iu & v & 0 & 0 \\ 0 & 0 & v & -iu & w & 0 \\ 0 & 0 & 0 & w & iu & v \\ 0 & 0 & 0 & 0 & v & -iu \end{pmatrix}$$
(3.51)

όπου βλέπουμε πως πλέον η διαγώνιος έχει μη μηδενικά στοιχεία, εναλλασσόμενου προσήμου, τα οποία εκφράζουν ακριβώς το on-site δυναμικό.

 $^{{}^5}$ Είναι σαφές πως σε κάθε κυψελίδα υπάρχει ίσο ${
m gain}$ και ${
m loss}$ βάση της μορφής της (3.48)

Μπορούμε όπως και προηγουμένως να θεωρήσουμε την αλυσίδα αρκετά μεγάλη και να περιγράψουμε το κύριο μέρος της (bulk) ξανά με χρήση των ιδιοκαταστάσεων Bloch. Εύκολα βρίσκουμε για την bulk-Hamiltonian στο χώρο των κυματανυσμάτων k τη μορφή :

$$\hat{H}(k) = \begin{pmatrix} iu & v + we^{-ik} \\ v + we^{ik} & -iu \end{pmatrix}$$
(3.52)

όπου ξανά, η διαφορά με την ερμιτιανή εχδοχή είναι η εμφάνιση μη μηδενιχών διαγώνιων στοιχείων.

Σχέση Διασποράς για Ενέργεια

Βάση της (3.52) βρίσκουμε εύκολα τη σχέση διασποράς :

$$E_{\pm}(k) = \pm \sqrt{v^2 + w^2 - u^2 + 2vw\cos k} \tag{3.53}$$

Η σημασία της σχέσης διασποράς στα \mathcal{PT} μοντέλα είναι αρχετά σημαντιχή. Βάση αυτής εξάγονται οι συνθήχες για το αν το σύστημα είναι στην \mathcal{PT} unbroken ή \mathcal{PT} broken φάση του στο χύριο μέρος. Γενιχά χαι οι δύο φάσεις έχουν ιδιαίτερο ενδιαφέρον σε ό,τι αφορά τον ρεαλισμό τους. Υπενθυμίζουμε σε αυτό το σημείο πως στην \mathcal{PT} unbroken φάση το φάσμα ιδιοτιμών ενέργειας είναι πάντα πραγματιχό, ενώ στην \mathcal{PT} broken οι ιδιοτιμές ενέργειας μπορούν να πάρουν μιγαδιχές τιμές. Για το συγχεχριμένο μοντέλο βάση της σχέσης (3.53) έχουμε τις εξής παρατηρήσεις :

• Υπάρχει εξάρτηση από τις παραμέτρους u, v και w του συστήματος, αλλά και από το κυματάνυσμα Bloch k. Θέλουμε λοιπόν να μελετήσουμε τι συμβαίνει σε ένα σύστημα με σταθερές τις παραμέτρους του, αλλά για όλες τις πιθανές τιμές του k. Γενικά γνωρίζουμε πως $-1 \le \cos k \le 1$, οπότε στην ελάχιστη τιμή του συνημιτόνου θα έχουμε για την ενέργεια μια σχέση της μορφής :

$$E_{\pm}(k = \pm \pi) = \pm \sqrt{v^2 + w^2 - 2vw - u^2} = \pm \sqrt{|v - w|^2 - u^2}$$
(3.54)

- Περίπτωση 1η : $|v - w| \ge u$: Το σύστημα είναι στην \mathcal{PT} unbroken φάση.

- Περίπτωση 2η : |v w| < u : Το σύστημα είναι στην \mathcal{PT} broken φάση.
- Υπάρχει μια ενδιαφέρουσα περίπτωση όταν u = v + w :

$$E_{\pm}(k) = \pm \sqrt{2vw} \left(\cos k - 1\right)$$
 (3.55)

όπου για κάθε τιμή του $k \in (-\pi, \pi)$ το ενεργειακό φάσμα είναι καθαρά φανταστικό. Δηλαδή υπάρχουν ζεύγη καταστάσεων για τις οποίες καθώς εξελίσσονται στο χρόνο η εκθετική μείωση της μίας, σημαίνει ακριβώς την αντίστοιχη εκθετική αύξηση της άλλης.

- Το ενεργειαχό χενό (band gap) στη μη ερμιτιανή PT εχδοχή είναι μιχρότερο από ότι στην ερμιτιανή εχδοχή :
 - Για u = 0: Δηλαδή επί της ουσίας στην ερμιτιανή εκδοχή, βάση της (3.54) θα είναι :

$$\Delta_H = 2|v - w| \tag{3.56}$$

το οποίο κλείνει για v = w.

- Για $u \neq 0$: Βάση της (3.54) θα είναι :

$$\Delta_{NH} = 2\sqrt{(v-w)^2 - u^2}$$
(3.57)

Το οποίο για μικρές τιμές της παραμέτρου u γίνεται :

$$\Delta_{NH} = \Delta_H - \frac{u^2}{v - w} + \mathcal{O}\left(u^3\right) \tag{3.58}$$

ενώ κλείνει για |v - w| = u.

Συμμετρία & Τοπολογία

Η προσθήκη του όρου δυναμικού, σπάει τη χειραλική συμμετρία του συστήματος, το οποίο έχει ως αποτέλεσμα να καταρρέει η συμβατική ερμηνεία του bulk-boundary correspondence. Χαρακτηριστικό παράδειγμα αυτής της αλλοίωσης είναι πως υπάρχει πιθανότητα για τιμές των παραμέτρων οι οποίες θέτουν το σύστημα στην unbroken φάση του στο κύριο μέρος, στην πεπερασμένη αλυσίδα να εμφανιστούν ιδιοκαταστάσεις με φανταστικές ιδιοτιμές.

Γενικά έχει γίνει μια αρκετά μεγάλη προσπάθεια να ερμηνευτεί αυτή η συμπεριφορά του μοντέλου, αλλά και να αναπτυχθεί ένας συστηματικός τρόπος εξαγωγής συμπερασμάτων της συμπεριφοράς των Edge States από την περιγραφή του κύριου μέρους (όπως ακριβώς συμβαίνει στο συμβατικό bulk-boundary correspondence). Ένα βήμα πιο κοντά στην κατανόηση αυτής της νέας αντιστοιχίας κύριου μέρους και άκρων, μας φέρνει η διερεύνηση των συμμετριών του συστήματος στο κύριο μέρος.

• Parity-Time reversal (\mathcal{PT}) :

$$\sigma_x H(k) \sigma_x = H(k)^\star \tag{3.59}$$

Το οποίο προχύπτει άμεσα, αρχεί να θυμηθούμε τη δράση των τελεστών \mathcal{P} και \mathcal{T} σε συστήματα 2 καταστάσεων όπως αναλύσαμε στην Ενότητα (2.2). Προφανώς, η ύπαρξη αυτή της συμμετρίας είναι και ο λόγος που ονομάζουμε τη συγχεχριμένη μη ερμιτιανή εκδοχή \mathcal{PT} .

• *pseudo-anti-Hermiticity* :

$$\sigma_z H(k)\sigma_z = -H(k)^{\dagger} \tag{3.60}$$

Η οποία είναι υπεύθυνη για την ύπαρξη των τοπολογικά διαχωρίσιμων φάσεων σε αυτό το μοντέλο. Μπορούμε να σκεφτούμε σε πλήρη αντιστοιχία με την περίπτωση της χειραλικής συμμετρίας, πως για κάθε κατάσταση της Χαμιλτονιανής με ενέργεια E υπάρχει μια ακόμη (το ζεύγος της) με ενέργεια $-E^*$. Αυτή η ιδιότητα, αν και χωρίς να είναι προφανές μπορεί να αποδειχθεί ικανή για να δει κανείς πως οι αδιαβατικές παραμορφώσεις που διατηρούν την pseudo-anti-Hermiticity διατηρούν τον αριθμό των Edge States. Για περισσότερες πληροφορίες και μια πιο εκτενή ανάλυση προτείνεται η εργασία των K. Esaki et al. [18], στην οποία δίνονται σαφή επιχειρήματα τόσο για τον αριθμό των Edge States όσο και για τον αριθμό περιέλιξης σε μη ερμιτιανά μοντέλα που παρουσιάζουν την pseudo-anti-Hermiticity.

3.3 SSH μοντέλο : Εμφύτευση ατέλειας

Η συγκεκριμένη ενότητα είναι βασισμένη σε μια πρόσφατη εργασία από τους Schomerus et. al [10]. Η μελέτη μας αφορά το πως η ύπαρξη μιας ατέλειας σε μια αλυσίδα με περιοδικές συνοριακές συνθήκες θα μπορούσε να δημιουργήσει εντοπισμένες λύσεις γύρω από το σημείο που υπάρχει η ατέλεια. Αυτές τις λύσεις (καταστάσεις) θα τις ονομάζουμε Zero Modes. Η λογική με την οποία προσεγγίζουμε το πρόβλημα είναι υπολογιστική και βασίζεται σε κώδικα που έχει αναπτυχθεί ώστε να περιγράφει αυτή ακριβώς τη διαδικασία, του οποίου τα σημαντικά στοιχεία παραθέτουμε και αναπτύσσουμε στο Κεφάλαιο 4ο : Κώδικες για Περιγραφή SSH μοντέλων.

Η διαδικασία που θα ακολουθήσουμε αποτελείται από τα εξής βήματα :

- Κατασκευή μια αλυσίδας τύπου SSH (Ερμιτιανής ή Μη Ερμιτιανής), με περιοδικές συνοριακές συνθήκες στην τετριμμένη της φάση (v > w).
- Εμφύτευση ενός είδους ατέλειας σε κάποιο σημείο της αλυσίδας. Αυτό που πρακτικά ονομάζουμε ατέλεια είναι μια τοπική αλλαγή σε κάποια από τις παραμέτρους του συστήματός μας σε κάποια άλλη μοναδική παράμετρο για τη δεδομένη κυψελίδα, την οποία μπορούμε να αλλάζουμε (αδιαβατικά).
- Εύρεση κατάλληλης τιμής της παραμέτρου της ατέλειας, ώστε να εμφανίζονται εντοπισμένες λύσεις γύρω από αυτή.
- 4. Διερεύνηση της συμπεριφοράς των εντοπισμένων λύσεων.

3.3.1 Είδος Ατέλειας : Αλλαγή Πλάτους Εσωτερικής Μετάβασης

Πρώτα θα μελετήσουμε το πως αλλάζει η συμπεριφορά μιας αλυσίδας τύπου SSH στην οποία αλλάζουμε αδιαβατικά το πλάτος εσωτερικής μετάβασης μιας εκ των κυψελίδων της, από v σε κάποια άλλη τιμή d. Είναι σαφές πως για d = v το σύστημα δεν έχει ατέλεια.

Οι αλυσίδες που θα μελετήσουμε έχουν Πλάτος Εσωτερικής Μετάβασης v = 1.00 και Πλάτος Εξωτερικής Μετάβασης w = 0.50. Η παράμετρος που καθορίζει την ατέλεια θα ξεκινάει από d = v = 1.00 και θα τη μειώνουμε μέχρι την τιμή μηδέν.

Ερμιτιανή Αλυσίδα

Ξεκινάμε λοιπόν από μια ερμιτιανή αλυσίδα, της οποίας τα γενικά χαρακτηριστικά συνοψίζονται στο παρακάτω σχήμα :



Θα αχολουθούμε τη συλλογιστική πορεία του paper [10]. Ξεχινάμε λοιπόν τη μελέτη μας σαν η αλυσίδα να μην έχει ατέλεια. Θεωρούμε λοιπόν πως d = v αρχικά, και υπολογίζουμε το ενεργειαχό της φάσμα. Για μια αλυσίδα με 50 χυψελίδες αυτό φαίνεται στο Σχήμα 2.4 (α). Επιλέγουμε τις δύο καταστάσεις με τις ιδιοτιμές πιο χοντά στο μηδέν (οι οποίες στο σχήμα έχουν σχεδιαστεί για να τις ξεχωρίζουμε με μεγαλύτερης διάστασης χύχλους και χρώματος χόχχινου). Στη συνέχεια

στο Σχήμα 2.4 (β) βλέπουμε το πώς οι ιδιοτιμές αυτών των δύο καταστάσεων αλλάζουν καθώς μειώνουμε την τιμή της παραμέτρου d από την τιμή d = v = 1.00 έως την τιμή 0.00. Ξανά κάνουμε το διάγραμμα που σχετίζεται με τις ιδιοτιμές ενέργειας για το σύστημα (Σχήμα 2.4 (γ)), αλλά αυτή τη φορά επιλέγουμε την τιμή της παραμέτρου d για την οποία οι καταστάσεις έχουν ιδιοτιμή ενέργειας μηδέν. Στο συγκεκριμένο πρόβλημα η τιμή της παραμέτρου είναι ακριβώς η τιμή d = 0.00. Τέλος κατασκεύαζουμε το διάγραμμα του τετραγώνου του μέτρου των ιδιοκατάστασεων αυτών που πλέον έχουν μηδενική ιδιοτιμή (Σχήμα 2.4 (δ)) και βλέπουμε πράγματι πως έχουμε εντοπισμένες λύσεις. Μάλιστα το διάγραμμα που έχουμε κατασκεύασει έχει φτιαχτεί έτσι ώστε το πρώτο και το τελευταίο σημείο να είναι αυτά τα οποία συμμετέχουν στην ατέλεια.



Σχήμα 3.4: Στα παραπάνω γραφήματα βλέπουμε διαδοχικά : (α) Διάγραμμα των ιδιοτιμών ενέργειας μιας Ερμιτιανής Αλυσίδας με περιοδικές συνοριακές συνθήκες για αριθμό κυψελίδων N = 50, και τιμές παραμέτρων v = 1.00, w = 0.50, χωρίς ατέλεια. (β) Διάγραμμα των ιδιοτιμών των δύο πλησιέστερων στο μηδέν ιδιοτιμών ενέργειας ως συνάρτηση της παραμέτρου d που περιγράφει την ατέλεια. (γ) Διάγραμμα των ιδιοτιμών ενέργειας για την ερμιτιανή αλυσίδα με τιμή της παραμέτρου ατέλειας d = 0.00 όπου οι δύο ιδιοτιμές που μελετάμε έχουν μηδενική τιμή. (δ) Διάγραμμα του τετραγώνου του μέτρου των καταστάσεων οι οποίες έχουν τιμή μηδέν. Το πρώτο και το τελευταίο σημείο στο γράφημα είναι αυτά που συμμετέχουν στην ατέλεια.

Σχόλια :

 Παρατηρούμε πως η αλυσίδα παρόλο που βρίσκεται στην Trivial Case και έχει περιοδικές συνοριακές συνθήκες μπορεί να υποστηρίξει καταστάσεις οι οποίες είναι εντοπισμένες σε μια μικρή περιοχή της. Η ύπαρξη της ατέλειας κάνει δυνατή αυτή τη συμπεριφορά. Η τιμή της παραμέτρου d για την οποία εμφανίζονται οι εντοπισμένες λύσεις ή αλλιώς τα Zero Modes, είναι η τιμή μηδέν. Από καθαρά φυσικής απόψεως αυτό δεν πρέπει να μας εκπλήσσει καθόλου, δεδομένου πως η τιμή αυτή αντιστοιχεί πρακτικά σε κόψιμο της αλυσίδας. Παύουν λοιπόν να ισχύουν οι περιοδικές συνοριακές συνθήκες. Επιπρόσθετα, επειδή κόβουμε την αλυσίδα σπάζοντας έναν εσωτερικό δεσμό, μπορούμε να δούμε πως αλλάζουμε την γεωμετρία του προβλήματος. Συγκεκριμένα, για τη συγκεκριμένη πεπερασμένη αλυσίδα, πλέον μπορούμε κατά σύμβαση να θεωρήσουμε πως η παράμετρος w εκφράζει πλάτος εσωτερικής μετάβασης και η παράμετρος v εκφράζει πλάτος εξωτερικής μετάβασης. Έτσι έχουμε πλέον την αλυσίδα στην Topological Case. Κατά μια έννοια λοιπόν μέσω της ατέλειας και της ακραίας τιμής της καταφέραμε να κατασκευάσουμε από μια αλυσίδα με περιοδικές συνοριακές συνθήκες στην Topological Case της, μια χωρίς περιοδικές συνοριακές συνθήκες συνθήκες στην Τοροlogical Case και της ακραίας τιμής της καταφέραμε της μετάβασης τα Ζετο Modes δεν είναι τίποτα άλλο παρά οι γνωστές για εμάς πλέον Εdge States.

Ένα ενδεικτικό σχήμα αλυσίδας με 4 κυψελίδες η οποία έχει περιοδικές συνοριακές συνθήκες, ενώ για τιμή της παραμέτρου d=0.00 σπάει σε μια μη περιοδική αλυσίδα :



Θα πρέπει να είμαστε προσεκτικοί όταν "σπάμε" την αλυσίδα, αφού όπως έχουμε περιγράψει πριν, επειδή το σπάσιμο γίνεται για εσωτερική μετάβαση, τα σύνορα της αλυσίδας συνδέονται με τα γειτονικά τους σημεία πλέον μέσω του πλάτους εξωτερικής μετάβασης, και άρα επί της ουσίας οι ρόλοι των δύο παραμέτρων εναλλάσσονται. Τέλος, έχουμε "ανοίξει" την αλυσίδα βάζοντας πρώτο από τα αριστερά το σημείο A, θα μπορούσαμε να κάνουμε ένα διαφορετικό άνοιγμα και να βάζαμε πρώτο το σημείο B. Πρακτικά η παραπάνω παρατήρηση έχει να κάνε με το αν διαβάζουμε τις κυψελίδες και το όλο σύστημα αριστερόστροφα ή δεξιόστροφα.

Μη Ερμιτιανή (ΡΤ) Αλυσίδα

Συνεχίζουμε με τη μη ερμιτιανή αλυσίδα, της οποίας τα γενικά χαρακτηριστικά συνοψίζονται στο παρακάτω σχήμα :



Σημαντική παρατήρηση για αυτό το μοντέλο είναι πως θα το εξετάσουμε μόνο στην unbroken φάση του, έχοντας v = 1.00 και w = 0.50, θα πρέπει βάση των όσων έχουμε πει u < |v - w|, δηλαδή u < 0.50. Επιλέγουμε την τιμή u = 0.20 για αρχή.



Σχήμα 3.5: Στα παραπάνω γραφήματα βλέπουμε διαδοχικά : (α) Διάγραμμα των ιδιοτιμών ενέργειας μιας μη ερμιτιανής Αλυσίδας με περιοδικές συνοριακές συνθήκες για αριθμό κυψελίδων N = 50, και τιμές παραμέτρων u = 0.20, v = 1.00 και w = 0.50, χωρίς ατέλεια. (β) Διάγραμμα των ιδιοτιμών των δύο πλησιέστερων στο μηδέν ιδιοτιμών ενέργειας ως συνάρτηση της παραμέτρου d που περιγράφει την ατέλεια. (γ) Διάγραμμα των ιδιοτιμών ενέργειας για τη μη ερμιτιανή αλυσίδα με τιμή της παραμέτρου ατέλειας d = 0.27 όπου οι δύο ιδιοτιμές που μελετάμε έχουν τιμή μηδέν. (δ) Διάγραμμα του τετραγώνου του μέτρου των καταστάσεων οι οποίες έχουν τιμή μηδέν.

Σχόλια :

Πρώτη και απλή παρατήρηση είναι πως η ύπαρξη του staggered onsite φανταστικού δυναμικού μειώνει το ενεργειακό κενό μεταξύ των δύο ιδιοτιμών που είναι πλησιέστερες στο μηδέν.
 Όσο μεγαλύτερη είναι η τιμή της παραμέτρου u τόσο μικρότερο είναι το κενό μεταξύ των θετικών και των αρνητικών ιδιοτιμών ενέργειας. Σημαντικό είναι να μην ξεπεράσει η τιμή της παραμέτρου u τον w και w παραμέτρων.

Υπάρχει ιδιαίτερη σημασία στην παραπάνω παρατήρηση. Θα πρέπει να θυμηθούμε πως η απαίτηση u < |v - w|, ώστε το σύστημα να είναι στην unbroken φάση του έχει προχύψει από ανάλυση η οποία αφορά την αλυσίδα στο bulk μέρος της. Το σύστημα που μελετάμε εδώ μπορεί να είναι περιοδικό αλλά σε καμία περίπτωση δεν είναι άπειρο. Κρίνεται λοιπόν ιδιαιτέρως σημαντικό να είμαστε προσεκτικοί κατά την εφαρμογή συνθηκών και την εξαγωγή συμπερασμάτων, αφού μπορούμε να πούμε με ασφάλεια πως το σύστημα βρίσκεται στην unbroken φάση του για το bulk, όμως το ίδιο δεν είναι σίγουρο πως ισχύει για την πεπερασμένη αλυσίδα. Δηλαδή δεν αποκλείεται να υπάρχουν τιμές των παραμέτρων για τις οποίες το σύστημα έχει παραγματικό φάσμα ιδιοτιμών ενέργειας στο bulk και όχι στην πεπερασμένη αλυσίδα.

• Η μη ερμιτιανή αλυσίδα υποστηρίζει μηδενικές ιδιοτιμές ενέργειας στην Trivial Case, για μη μηδενική τιμή της παραμέτρου της ατέλειας d. Αυτό το φαινόμενο έχει αρκετό ενδιαφέρον, αφού τα προηγούμενα επιχειρήματά μας, για το "σπάσιμο" της αλυσίδας και της αλλαγής συμπεριφοράς, δεν ισχύουν σε αυτή την περίπτωση. Η παραπάνω είναι μια εξωτική συμπεριφορά αυτού του συστήματος η οποία δεν θα μπορούσε να προβλεφθεί από πριν. Ένα επιπρόσθετο σχόλιο είναι πως όσο μεγαλύτερη είναι η τιμή της παραμέτρου u, τόσο πιο νωρίς θα εμφανιστούν οι καταστάσεις με μηδενική ιδιοτιμή, δηλαδή τα Zero Modes. Παρακάτω παραθέτουμε ένα χρωματικό διάγραμμα του Inverse Mean Petermann Factor⁶ για σύστημα με N = 10 κυψελίδες ως συνάρτηση των παραμέτρων d και u :



Σχήμα 3.6: Χρωματικό Διάγραμμα του Inverse Mean Petermann Factor για σύστημα με N = 10κυψελίδες, τιμές παραμέτρων v = 1.00 και w = 0.50. Η παράμετρος u (κατακόρυφος άξονας) παίρνει τιμές από 0.00 έως 0.50 ενώ η d (οριζόντιος άξονας) από 0.00 έως 1.00.

⁶Μια σύντομη επεξήγηση του τι αχριβώς είναι ο Petermann factor γίνεται στην Ενότητα 4.2.

Από το χρωματικό διάγραμμα φαίνεται πως η σχέση που συνδέει τις δύο παραμέτρους ως προς την εμφάνιση των Zero Modes δεν είναι γραμμική.

 Για τις τιμές των παραμέτρων u, v και w που έχουμε επιλέξει τα Zero Modes εμφανίζονται για τιμή της παραμέτρου d = 0.27. Στα παρακάτω διαγράμματα αυξάνουμε την τιμή της παραμέτρου u μέχρι την τιμή 0.50, διατηρώντας την τιμή της d σταθερή :



Σχήμα 3.7: Διαγράμματα του τετραγώνου του μέτρου των Zero Modes για αλυσίδα με N = 50 χυψελίδες, τιμές των παραμέτρων v = 1.00, w = 0.50, d = 0.27 και (α) u = 0.20, (β) u = 0.30, (γ) u = 0.40, (δ) u = 0.50.

Παρατηρούμε λοιπόν πως η αύξηση της παραμέτρου gain και loss, αυξάνει τον εντοπισμό γύρω από τα σημεία της αλυσίδας. Συγκεκριμένα, η μια λύση γίνεται πιο εντοπισμένη στο σημείο όπου η αλυσίδα έχει gain, ενώ η άλλη στα σημεία όπου η αλυσίδα έχει loss. Σε αυτό το σημείο δεν θα πρέπει να γίνεται συγχύση με το προηγούμενο σχόλιο. Προηγούμενως μελετούσαμε το πότε θα εμφανιστούν τα Zero Modes, ενώ σε αυτή τη μελέτη έχουμε αυτή την τιμή και μελετάμε την αύξηση του φαινομένου εντοπισμού γύρω από τα συγκεκριμένα σημεία της αλυσίδας. Αν κανείς μελετήσει τις ιδιοτιμές ενέργειας αυτών των καταστάσεων θα δει πως όταν η παράμετρος u γίνεται μεγαλύτερη από την τιμή για την οποία πρωτοεμφανίζονται οι μηδενικές ιδιοτιμές, τότε αυτές αποκτούν ένα φανταστικό μέρος. Η αύξηση του εντοπισμού, επιφέρει και την εκθετική πτώση του πλάτους των καταστάσεων. Μόνο για τις ακριβείς τιμές των u και d όπου έχουμε μηδενισμό των ιδιοτιμών, έχουμε δύο (συμμετρικά) εντοπισμένες λύσεις στην αλυσίδα, οι οποίες διατηρούν το πλάτος τους.

3.3.2 Είδος Ατέλειας : Κυψελίδα με Gain & Loss

Σε αυτή την υποενότητα αλλάζουμε το είδος της ατέλειας στην αλυσίδα μας. Η αλυσίδα είναι ερμιτιανή παντού και περιοδική, ενώ μια της κυψελίδα έχει staggered onsite φανταστικό δυναμικό. Η ατέλεια πλέον δεν έχει να κάνει με το πλάτος εσωτερικής μετάβασης της αλυσίδας, αλλά με το πόσο μικρό ή μεγάλο gain και loss υπάρχει σε μια συγκεκριμένη της κυψελίδα. Τα γενικά χαρακτηριστικά αυτού του μοντέλου φαίνονται στο παρακάτω σχήμα :



Λόγω του ότι αυτή η ατέλεια είναι πιο πολύπλοκη από τις προηγούμενες, αφού επηρεάζει την αλυσίδα με τέτοιο τρόπο όπου να μη μπορούμε πλέον να τη χαρακτηρίσουμε ερμιτιανή ή μη ερμιτιανή, καθώς επίσης και να μη μπορούμε να προβλέψουμε το αν και για ποια τιμή της παραμέτρου u θα προκύψουν Zero Modes, θα πρέπει να καταφύγουμε σε κάποια υπολογιστική διαδικασία. Για ακόμη μια φορά θα χρησιμοποιήσουμε τον Inverse Mean Petermann Factor. Συγκεκριμένα, θεωρούμε πως η αλυσίδα μας βρίσκεται ξανά στην Trivial Case με v = 1.00 και w = 0.50. Υπολογίζουμε τον Inverse Mean Petermann Factor για τιμές της παραμέτρου u από 0.00 έως 2.00 όπως φαίνεται στο παρακάτω σχήμα :



Σχήμα 3.8: Διάγραμμα του Inverse Mean Petermann Factor για αλυσίδα με N = 50 κυψελίδες, ως συνάρτηση της παραμέτρου u. Ο κατακόρυφος άξονας είναι λογαριθμικός.

Παρατηρούμε από το διάγραμμα πως ο Mean Petermann Factor επί της ουσίας αποχλίνει για την τιμή του u = 1.00. Αυτό σημαίνει αχριβώς πως για αυτή την τιμή της παραμέτρου έχουμε εμφάνιση των Zero Modes. Η παραπάνω τιμή δεν είναι τυχαία. Προχύπτει πως η εμφάνιση των Zero Modes συμβαίνει όταν u = v.

Για τιμές της παραμέτρου u για τις οποίες ισχύε
ιu > v, έχουμε για τα Zero Modes την παρακάτω συμπεριφορά :



Σχήμα 3.9: Διαγράμματα του τετραγώνου του μέτρου των Zero Modes για αλυσίδα με N = 50 χυψελίδες, τιμές των παραμέτρων v = 1.00, w = 0.50 και (α) u = 1.00, (β) u = 1.20, (γ) u = 1.40, (δ) u = 1.50.

Παρατηρούμε ξανά πως ο εντοπισμός γύρω από τα σημεία που συμμετέχουν στην ατέλεια αυξάνεται όσο μεγαλώνουμε την τιμή πέρα από αυτή που εμφανίζονται τα Zero Modes, το οποίο έρχεται ξανά μαζί με το φανταστικό μέρος των ιδιοτιμών, και άρα με μείωση του πλάτους τους στην πάροδο του χρόνου. Σημαντική παρατήρηση είναι πως το συγκεκριμένο είδος ατέλειας δημιουργεί εντοπισμένες λύσεις γύρω από το σημείο της ατέλειας για οποιαδήποτε τιμή του gain και loss. Ωστόσο, είναι μόνο για τιμές του u όπου ισχύει $u \ge v$ όπου έχουμε Zero Modes. Το πόσο έντονο θα είναι το φαινόμενο του εντοπισμού για τιμές του u μικρότερες του v εξαρτάται και από το μήκος της αλυσίδας.

Γενικό Σχόλιο Κεφαλαίου : Η ανάλυση που κάναμε σε αυτό το Κεφάλαιο μας έδειξε πως υπάρχουν οι εξής τρόποι να δημιουργήσουμε εντοπισμένες καταστάσεις σε μια αλυσίδα τύπου SSH :

- Edge States : Καταστάσεις που προχύπτουν στην Topological Case μη περιοδιχής αλυσίδας.
- Zero Modes : Καταστάσεις που προχύπτουν στην Trivial Case περιοδιχής αλυσίδας, λόγω της ύπαρξης ατέλειας.

Κεφάλαιο 4

Κώδικες για περιγραφή SSH μοντέλων

Το συγκεκριμένο κεφάλαιο είναι καθαρά τεχνικό. Παρουσιάζουμε τα βασικά στοιχεία που έχουμε χρησιμοποιήσει για να προσομοιώσουμε μέσω της γλώσσας προγραμματισμού Python τις αλυσίδες τύπου SSH. Όλα τα διαγράμματα των προηγούμενων κεφαλαίων έχουν αναπαραχθεί με χρήση αυτών (εκτός των διαγραμμάτων που αφορούν το σχεδιασμό του ανύσματος **d** στο επίπεδο $d_x - d_y$ στο Σχήμα 3.1).

Σε κάθε έναν από τους κώδικες παραθέτουμε :

- Τις βιβλιοθήχες που χρησιμοποιήσαμε.
- Τις συναρτήσεις (στο πλαίσιο του προγραμματισμού) που έχουμε ορίσει για να μας βοηθήσουν στο να αναπτύξουμε τους κώδικες.
- Το βασικό ορισμό των Χαμιλτονιανών στον Ευθύ και Ανάστροφο Χώρο (με ή χωρίς ατέλειες).
- Τις υπολογιστικές διαδικασίες που κάνουμε για να πετύχουμε όλα όσα χρειάζονται για τη μελέτη των συστημάτων.
- Αποτελέσματα για την Zak Phase που επιβεβαιώνουν τις θεωρητικά αναμενόμενες τιμές (για το ερμιτιανό μοντέλο χωρίς ατέλεια.)

Δεν παραθέτουμε γραμμές κώδικα που αφορούν συναρτήσεις ή άλλες εντολές οι οποίες σχετίζονται με το σχεδιασμό των διαγραμμάτων, αφού αυτές δεν προσδίδουν στην υπολογιστική διαδικασία.

4.1 Ερμιτιανό SSH μοντέλο

Αρχίζουμε με τον πρώτο απλό χώδιχα που έχουμε αναπτύξει έτσι ώστε να περιγράψουμε την ερμιτιανή αλυσίδα τύπου SSH. Ο τρόπος με τον οποίο έχουμε επιλέξει να χρησιμοποιήσουμε τη γλώσσα προγραμματισμού Python, είναι ο απλούστερος δυνατός. Συγκεκριμένα, παραχάτω θα γίνει σαφές πως η χρήση χώδιχα δεν αποτελεί παρά μια επέκταση της αναλυτιχής διαδιχασίας. Επί της ουσίας εκμεταλλευόμαστε την υπολογιστιχή (επεξεργαστιχή) ισχύ που παρέχει ένας ηλεκτρονιχός υπολογιστής ώστε να μπορέσουμε να λύσουμε γρήγορα χαι εύχολα προβλήματα ιδιοτιμών χαι ιδιοχασταστάσεων, και να χαράξουμε διαγράμματα τα οποία μας βοηθούν να κατανοήσουμε χαλύτερα τη φυσιχή του προβλήματος. Ο χώδιχας αυτός εχτελείται αρχετά γρήγορα από τον ηλεκτρονικό υπολογιστή, και έτσι μπορούμε να δοχιμάσουμε εύχολα διαφορετιχές τιμές των παραμέτρων του συστήματός μας, και άρα να έχουμε μια άμεση ειχόνα της γενιχότερης συμπεριφοράς του.

Λειτουργία Εντολών : Βιβλιοθήχες (Modules) της Python

```
1 #SSH model code
2
3 ###Python Modules###
5 import numpy as np
6 import math as math
7 import scipy.linalg as la
8 from scipy.sparse import diags
9 import sympy
10 import matplotlib.pyplot as plt
11 import random
12 import cmath
13
15
16 ###Define Constants###
17
18 pi=math.pi
19
```

Επεξήγηση : Το πρώτο βήμα για να μπορέσουμε να ξεχινήσουμε να γράφουμε τον χώδιχα μας είναι να χαλέσουμε τις βιβλιοθήχες εχείνες που θα χάνουν τη δύσχολη δουλειά για εμάς. Έχουμε επιλέξει να χρησιμοποιήσουμε τις εξής βιβλιοθήχες :

- Οι numpy, math, cmath ορίζουν μαθηματικές συναρτήσεις, χειρίζονται μαθηματικές εξισώσεις και μας επιτρέπουν να κάνουμε πράξεις μέσω μιγαδικών αριθμών.
- Η scipy μας βοηθάει με ζητήματα που αφορούν τη γραμμική άλγεβρα. Έχουμε καλέσει ένα μέρος της συγκεκριμένης βιβλιοθήκης το οποίο αφορά την επίλυση προβλημάτων γραμμικής άλγβερας και πράξεων με πίνακες, καθώς επίσης και το γρήγορο ορισμό πινάκων (στις περιπτώσεις όπου τα περισσότερα στοιχεία του πίνακα είναι 0).
- Η βιβλιοθήκη matploylib.pyplot είναι απαραίτητη για τη γραφική απεικόνιση των αποτελεσμάτων μας. Βάση αυτής μπορούμε να κατασκευάσουμε όλα τα διαγράμματα τα οποία έχουμε παρουσιάσει στην εργασία.
- Η βιβλιοθήκη random σχετίζεται με την αναπαραγωγή τυχαίων αριθμών, και τη χρησιμοποιούμε στον κώδικα σε σημεία που θέλουμε να επιλέξουμε τυχαία μια κατάσταση χωρίς να επηρεαστεί η επιλογή από εμάς. (Χρησιμοποιήθηκε κατά τη διαδικασία τυχαίας επιλογής κατάστασης για κατασκευή της γραφικής της παράστασης.)

Λειτουργία Συνάρτησης : Κατασκευή Λίστας Τιμών

Επεξήγηση : Έχουμε ορίσει μια συνάρτηση η οποία κατασκευάζει μια λίστα τιμών. Η συγκεκριμένη λίστα παίρνει τιμές από κάποια ελάχιστη τιμή a_{min} μέχρι μια μέγιστη τιμή a_{max} με σταθερό βήμα Δa το οποίο ορίζεται από τη σχέση :

$$\Delta a = \frac{a_{max} - a_{min}}{n_a},$$

όπου n_a το πλήθος των βημάτων. Χρειάζεται σε αυτό το σημείο προσοχή διότι η λίστα εμπεριέχει $n_a + 1$ στοιχεία, διότι θέλουμε να παίρνει όλες τις τιμές από a_{min} έως a_{max} . Η παραπάνω εντολή μοιάζει με την numpy.arange της Python, όμως η διαφορά είναι πως η εντολή της βιβλιοθήκης έχει ως τιμή εισόδου το βήμα και όχι τον αριθμό βημάτων, ενώ πηγαίνει μέχρι τη μέγιστη τιμή που δίνει ο χρήστης και όχι έως και τη μέγιστη τιμή. Στα θετικά της numpy.arange είναι η επιλογή του τύπου της μεταβλητής (ακέραιος, πραγματικός, μιγαδικός).

Λειτουργία Συναρτήσεων : Λύση του προβλήματος ιδιοτιμών και ιδιοανυσμάτων πίνακα ταξινομημένα από τη μέγιστη στην ελάχιστη τιμή

```
45 def eigen_values(A_matrix) :
      (eig_val,eig_vec)=la.eig(A_matrix)
46
      return (eig_val)
47
48
49 def eigen_vectors(A_matrix) :
      (eig_val,eig_vec)=la.eig(A_matrix)
50
51
      return(np.array(eig_vec))
52
53 def eigen_sorted(A_matrix) :
     (a,b)=la.eig(A_matrix)
54
55
      idx=np.argsort(a)
56
      a=a[idx]
      b=b[:,idx]
57
      return (a,b)
58
```

Επεξήγηση : Η διαδικασία επίλυσης του προβλήματος ιδιοτιμών και ιδιοσυναρτήσεων από τον ηλεκτρονικό υπολογιστή γίνεται μέσω της εντολής la.eig(A_matrix), όπου A_matrix κάποιος πίνακας. Η εντολή αυτή επιστρέφει πίσω δύο λίστες. Η πρώτη λίστα που επιστρέφει είναι μια 1-D λίστα η οποία αφορά τις ιδιοτιμές του πίνακα ενώ η δεύτερη είναι μια 2-D λίστα της οποία η κάθε στήλη αποτελεί ιδιοάνυσμα του πίνακα. Οι λίστες δίνονται έτσι ώστε η ιδιοτιμή που υπάρχει ως i στοιχείο στη μια λίστα να αντιστοιχεί στο ιδιοάνυσμα στήλης i. Ωστόσο οι ιδιοτιμές επιτρέφουν από τον κώδικα μη ταξινομημένες και αυτό μπορεί να αποτελέσει πρόβλημα κατά τη διαδικασία εξαγωγής αποτελεσμάτων και συμπερασμάτων. Έτσι ορίζουμε τις παρακάτω συναρτήσεις :

- Η eigen_values επιστρέφει μόνο τις ιδιοτιμές του πίναχα που εισάγουμε.
- Η eigen_vec επιστρέφει μόνο τις ιδιοχαταστάσεις του πίναχα που εισάγουμε.
- Η eigen_sorted επιστρέφει τις ιδιοτιμές και τις ιδιοκαταστάσεις του πίνακα που εισάγουμε, ταξινομώντας τις ιδιοτιμές και τις αντίστοιχες ιδιοκαταστάσεις από τη μέγιστη στην ελάχιστη ιδιοτιμή.

Λειτουργία Συνάρτησης : Υπολογισμός του Inverse Participation Ratio ενός ανύσματος

Επεξήγηση : Το Inverse Participation Ratio (IPR) είναι ένα μέτρο του πόσο εντοπισμένη είναι μια χυματοσυνάρητηση. (localization of the wavefunction). Ορίζεται ως :

$$IPR = \frac{1}{\sum_i p_i^2}$$

όπου p_i η πιθανότητα ένα σωματίδιο να βρεθεί στην κατάσταση i. Δεδομένου πως $p_i = \|\psi_i\|^2$ μπορούμε να γράψουμε πως :

$$IPR = \frac{1}{\sum_{i} \|\psi_i\|^4}$$

Αν ένα σωματίδιο έχει N επιτρεπτές καταστάσεις τότε, βλέπουμε πως αν είναι ισοπίθανο να βρεθεί σε κάθε μια από αυτές τις καταστάσεις $p_i = \frac{1}{N}$ τότε θα προκύπτει πως IPR = N, ενώ αν είμαστε σίγουροι πως το σωματίδιο βρίσκεται σε μια συγκεκριμένη κατάσταση j, δηλαδή $p_j = 1$, τότε προκύπτει πως IPR = 1. Καταλαβαίνουμε πως για τη δική μας περίπτωση, ο υπολογισμός της IPR για μια λύση της Finite Hamiltonian, δείχνει ακριβώς πόσο εντοπισμένη πάνω στην αλυσίδα είναι αυτή η λύση. Χρησιμοποιούμε λοιπόν τη συνάρτηση αυτή για να προσδιορίσουμε τις Edge States στην αλυσίδα μας.

Λειτουργία Συνάρτησης : Υπολογισμός παραγώγου για ένα άνυσμα

```
67 def deriv(vec,k,dk) :
68     derivative=(vec[k+1]-vec[k])/dk
69     return (np.array(derivative))
```

Επεξήγηση : Οι ιδιοκαστάσεις που μας επιστρέφει ο κώδικας είναι επί της ουσίας ανύσματα. Για να μπορέσουμε να υπολογίσουμε την παράγωγο των καταστάσεων ως προς μια διακριτή μεταβλητή n, εφαρμόζουμε τον ορισμό :

$$\psi_n' = \frac{\psi_{n+1} - \psi_n}{\Delta n}$$

όπου Δn είναι το βήμα για τη διακριτή μεταβλητή n. Η παραπάνω συνάρτηση παρέχει μια συμπαγή γραφή στη συνέχεια του κώδικα.

Λειτουργία Συνάρτησης : Υπολογισμός Berry Connection για ένα άνυσμα

```
71 def Berry_Connection(vec,k,dk) :
72     ber_con=1j*np.vdot(vec[k],deriv(vec,k,dk))
73     return (ber_con)
```

Επεξήγηση : Η Berry Connection, η οποία δίνεται από τη σχέση (2.14), μπορεί να υπολογιστεί στην περίπτωση όπου έχουμε μια διακριτή παράμετρο, για κάθε μια τιμή της παραμέτρου. Αυτή η συνάρτηση κάνει ακριβώς αυτή τη δουλειά. Συγκεκριμένα, θα χρησιμοποιήσουμε τη συνάρτηση αυτή για να υπολογίσουμε την Berry Phase (Zak Phase) στον παραμετρικό χώρο που ορίζεται από τα κυματανύσματα Bloch k στην πρώτη ζώνη Brillouin. Λειτουργία Συναρτήσεων : Ορισμός Finite και Bulk Hamiltonian για το SSH μοντέλο

```
103 ###Hamiltonian###
104
105 def fin_ham(u,v,w,N) :
       diag1=[]
106
       diag2=[]
       diag3=[]
108
       for i in range(2*N) :
109
           if i % 2 == 0 :
               diag1.append(v)
111
               diag2.append(u)
112
               diag3.append(v)
113
           else :
114
               diag1.append(w)
               diag2.append(-u)
116
               diag3.append(w)
117
     diag1=np.array(diag1)
118
     diag2=np.array(diag2)
119
      diag3=np.array(diag3)
120
      diagonals=[diag2,diag1,diag3]
121
     H_R=diags(diagonals,[0,-1,1]).toarray()
122
      return(H_R)
123
124
125 ##Bulk Hamiltonian##
126
127 def bulk_hamiltonian(u,v,w,k) :
      bulk_ham=[[u,v+w*np.exp(-1j*k)],[v+w*np.exp(1j*k),-u]]
128
       bulk_ham=np.array(bulk_ham)
129
      return(bulk_ham)
130
131
```

Επεξήγηση : Σε αυτές τις γραμμές κώδικα ορίζουμε τις δύο Χαμιλτονιανές οι οποίες αποτελούν τη βασική περιγραφή του SSH μοντέλου :

- Η Finite Hamiltonian που ορίζεται αρχικά, χρησιμοποιεί την εντολή diags της βιβλιοθήκης scipy.sparse η οποία κατασκευάζει τρισδιαγώνιο πίνακα. Πρακτικά κατασκευάζουμε μέσω επαναληπτικής διαδικασίας τις τρεις διαγωνίους του πίνακα σε μορφή λίστας, και μετά τις βάζουμε σε έναν πίνακα.
- Η Bulk Hamiltonian ορίζεται κατευθείαν, δεδομένου ότι πρόκειται για 2 × 2 πίνακα, οπότε δεν απαιτείται κάποια περίτεχνη υπολογιστική διαδικασία. Είναι σημαντικό να παρατηρήσουμε πως οποτεδήποτε ορίζουμε ένα άνυσμα (λίστα) ή έναν πίνακα χειροκίνητα, δηλαδή μέσω επαναληπτικής διαδικασίας ή άμεσα όπως στην περίπτωση μας τώρα, είναι απαραίτητο να επαναορίσουμε το αντικείμενο που έχουμε κατασκευάσει μέσω της εντολής numpy.array(), διότι έτσι ο κώδικας μπορεί να κάνει πράξεις με αυτό το αντικείμενο, μέσω των συναρτήσεων της βιβλιοθήκης numpy.

 $\Sigma \chi \delta \lambda io$: Στις Χαμιλτονιανές μας έχουμε υποθέσει και την ύπαρξη ενός staggered onsite potential όρου της μορφής :

$$H^{\text{pot}} = u \sum_{m=1}^{N} \left(\left| m, A \right\rangle \left\langle m, A \right| - \left| m, B \right\rangle \left\langle m, B \right| \right)$$

Πρακτικά ο κώδικας μπορεί να περιγράψει και το πιο γενικό μοντέλο Rice Mele.

Λειτουργία Εντολών : Ορισμός Παραμέτρων του συστήματος και λύση του προβλήματος ιδιοτιμών και ιδιοσυναρτήσεων για αυτές τις συγκεκριμένες τιμές παραμέτρων

```
134 ###General Characteristics of the SSH-model###
135 u=0 #staggered potential
136 v=0.50 #Intracell Hopping
137 w=1.00 #Intercell Hopping
138 N=10 #Number of cells
139 k=0 #Bloch wavenumber
140
141 #Hamiltonians
142
143 H_bulk=bulk_hamiltonian(u,v,w,k)
144 H_R=fin_ham(u,v,w,N)
145
146 #Solving Eigenfunction-Eigenvalue problem
147 (E,psi)=eigen_sorted(H_R)
148 psi=np.transpose(psi)
149
```

Επεξήγηση : Σε αυτό το σημείο του κώδικα ξεκινάμε να χειριζόμαστε το πρόβλημα. Δίνουμε τιμές στις παραμέτρους του συστήματος :

- *u* : Παράμετρος του staggered onsite potential. Για το SSH μοντέλο που περιγράφουμε η τιμή της θα είναι πάντα μηδέν.
- v : Παράμετρος του εσωτερικού πλάτους μετάβασης.
- w : Παράμετρος του εξωτερικού πλάτους μετάβασης.
- N : Αριθμός των χυψελίδων της αλυσίδας.
- k : Τιμή του ιδιοανύσματος Bloch.

Στη συνέχεια καλούμε τις συναρτήσεις που ορίζουν την Finite και την Bulk Hamiltonian, για τις τιμές των παραμέτρων που έχουμε δώσει στον κώδικα. Κατόπιν, λύνουμε το πρόβλημα ιδιοτιμών και ιδιοσυναρτήσεων μέσω της συνάρτησης *eigen_sorted*, και αλλάζουμε τη μορφή της λίστας που δίνει τα ιδιοανύσματα ώστε οι γραμμές να εκφράζουν το κάθε ιδιοάνυσμα και όχι οι στήλες. Με αυτές τις αρχικές εντολές μπορούμε να ελέγξουμε μέσω της εντολής *print()*, αν οι συναρτήσεις που έχουμε ορίσει λειτουργούν σωστά.

Λειτουργία Εντολών : Λύση του προβλήματος ιδιοτιμών και ιδιοσυναρτήσεων της Finite Hamiltonian για σταθερή παράμετρο w και αυξάνομενη τιμή της v, και αντίστροφα.

```
152 ###Energy vs v and w=constant###
153
154 v_min=0
155 v_max = 4
156 n_v=100
157 v_list=list_of_values(v_min,v_max,n_v)
158
159 Energies_v=[]
160
161 for i in range(n_v) :
      H_v=fin_ham(u,v_list[i],w,N)
162
      Energies_v.append(eigen_values(H_v))
163
164 Energies_v=np.array(Energies_v)
165 Energies_v.real.sort()
166 Energies_v_transpose=np.transpose(Energies_v)
```

```
169 ###Energy vs w and v=constant###
170
171 w_min=0
172 w_max = 4
173 n_w=100
174 w_list=list_of_values(w_min,w_max,n_w)
175
176 Energies_w=[]
177
178 for i in range(n_w) :
179
      H_w=fin_ham(u,v,w_list[i],N)
      Energies_w.append(eigen_values(H_w))
180
181 Energies_w=np.array(Energies_w)
182 Energies_w.real.sort()
183 Energies_w_transpose=np.transpose(Energies_w)
```

Επεξήγηση : Οι παραπάνω δύο επαναληπτικές διαδικασίες κατασκευάζουν 2-D λίστες οι οποίες έχουν ως γραμμές ταξινομημένες (από την ελάχιστη στη μέγιστη) τις ιδιοτιμές της Finite Hamiltonian για διαφορετικές τιμές της παραμέτρου v ή w, και σταθερή τιμή της άλλης παραμέτρου. Βάση αυτών μπορούμε και κατασκευάζουμε τα διάγραμμα στο Σχήμα 3.2

Λειτουργία Εντολών : Λύση του προβλήματος ιδιοτιμών και ιδιοσυναρτήσεων για την Bulk Hamiltonian στην πρώτη ζώνη Brillouin.

```
185 ###Energy vs k###
186
187 k_min=-pi
188 k_max=pi
189 n_k=9999
190 k_list=list_of_values(k_min,k_max,n_k)
191 Energy_k=[]
192
193
194 for i in range(n_k+1) :
      H_k=bulk_hamiltonian(u,v,w,k_list[i])
195
      Energy_k.append(eigen_values(H_k))
196
197
198 Energy_k=np.array(Energy_k)
199 #Energy_k=Energy_k.real
200 Energy_k_transpose=np.transpose(Energy_k)
201
```

Επεξήγηση : Με αυτές τις εντολές μπορούμε και κατασκευάζουμε μια 2-D λίστα με τις ιδιοτιμές που αφορούν την Bulk Hamiltonian για διαφορετικές τιμές του κυματαριθμού Bloch k. Συγκεκριμένα επιτρέπουμε στο k να πάρει τιμές στην πρώτη ζώνη Brillouin $[-\pi, \pi]$. Προσέχουμε πως οι ιδιοτιμές (οι οποίες είναι δύο για κάθε διαφορετικό k) είναι ταξινομημένες από τη μικρότερη στη μεγαλύτερη, και στο τέλος της διαδικασίας χρησιμοποιούμε την εντολή numpy.transpose(). Με αυτό τον τρόπο καταφέρνουμε να φτιάξουμε μια λίστα με δύο γραμμές, οι οποίες αντιστοιχούν ακριβώς στις δύο ενεργειακές ζώνες (Energy Bands) του συστήματος.

Σχόλιο : Η επιλογή της ζώνης Brillouin που κάνουμε έχει να κάνει αποκλειστικά με τον τρόπο με τον οποίο θέλουμε να παρουσιάσουμε τα αποτελέσματα και να εξάγουμε συμπεράσματα. Θα μπορούσαμε ισοδύναμα να λύσουμε το πρόβλημα ιδιοτιμών και ιδιοσυναρτήσεων για k τα οποία ανήκουν στο διάστημα [0, 2π]. Ωστόσο κάθε φορά θα πρέπει να είμαστε προσεκτικοί στην ερμηνεία που δίνουμε στα αποτελέσματα μας. **Λειτουργία Εντολών :** Υπολογισμός της Berry Phase (Zak Phase) για το σύστημα με δύο τρόπους.

```
205 ###Berry Phase###
206
207 psi_k=[]
208 for k in range(n_k+1) :
      H_k=bulk_hamiltonian(u,v,w,k_list[k])
209
      (Eval_k,Evec_k)=eigen_sorted(H_k)
210
211
      Evec_k=np.transpose(Evec_k)
      Evec_k_bottom=Evec_k[0]
212
      #print(Evec_k_bottom, end=" ")
213
      r1,theta1=cmath.polar(Evec_k_bottom[0])
214
      r2,theta2=cmath.polar(Evec_k_bottom[1])
215
       Evec_k_bottom_gf_0=cmath.rect(r1,theta1-theta2)
216
       Evec_k_bottom_gf_1=cmath.rect(r2,theta2-theta2)
217
       Evec_k_bottom_gf=np.array([Evec_k_bottom_gf_0,Evec_k_bottom_gf_1])
218
       #print(Evec_k_bottom_gf)
219
       psi_k.append(Evec_k_bottom_gf)
220
221 psi_k=np.array(psi_k)
222
223
224 ##Logarithm
225
226 product1=1.+0.j
227
228 for k in range(1,n_k+1) :
      product1=product1*(np.vdot(psi_k[k-1],psi_k[k]))
229
230 zak_phase1=-np.angle(product1)
231
232 print("Logarithm : Zak Phase = %.5f v = %.2f w = %.2f N_k = %.d"%(zak_phase1
      ,v,w,n_k+1))
234 ##Berry_Connection
235
236 sum1=0
237 dk=1
238
239 for k in range(n_k) :
240
       sum1=sum1+Berry_Connection(psi_k,k,dk)
241 \text{ zak_phase2=sum1*dk}
242
243 print("Connection : Zak Phase = %.5f v = %.2f w = %.2f N_k = %.d"%(zak_phase2
      .real,v,w,n_k+1))
244
```

Επεξήγηση : Μέσω επαναληπτικής διαδικασίας λύνουμε το πρόβλημα ιδιοτιμών και ιδιοκαταστάσεων της Bulk Hamiltonian για τιμές του κυματαριθμού Bloch k στην πρώτη ζώνη Brillouin, κατασκευάζοντας μια λίστα η οποία έχει για γραμμές τα ιδιοανύσματα της κάτω ενεργειακής ζώνης για τα διαφορετικά k. Σημαντικές παρατηρήσεις :

- Σε αυτή τη διαδικασία ασχολούμαστε μόνο με την "κάτω" ενεργειακή ζώνη και όχι και με τις δύο, αφού μπορούμε να εξάγουμε συμπεράσματα για το φυσικό σύστημα μόνο από αυτή. Εύκολα μπορούμε να κάνουμε τους υπολογισμούς για την "πάνω" ενεργειακή ζώνη αν αλλάξουμε την εντολή της γραμμής κώδικα 212.
- Η διαδικασία που κάνουμε στις γραμμές κώδικα 213-218 αποτελεί ένα gauge-fixing υπό μια έννοια για τα ανύσματα μας. Συγκεκριμένα η υπολογιστική μηχανή επιστρέφει τα ιδιοανύσματα εν γέννει με αυθαίρετες φάσεις, και εμείς προσπαθούμε να φτιάξουμε τη φάση αυτή ώστε

να είναι σταθερή για κάθε k. Χρειάζεται προσοχή σε αυτό το σημείο, διότι δεν επηρεάζουμε τη φυσική που περιγράφει το σύστημά μας, απλώς κάνουμε σίγουρο πως τα ανύσματα μας θα έχουν ως δεύτερη συνιστώσα τον ίδιο πάντα αριθμό.

Για να προσδιορίσουμε την Berry Phase (Zak Phase) χρησιμοποιούμε δύο τεχνικές :

 Τεχνική Λογαρίθμου : Σε αυτή την τεχνική θεωρούμε πως ο παραμετρικός χώρος είναι διακριτός και έτσι μπορούμε να υπολογίσουμε την Berry Phase μέσω της σχέσης :

$$\gamma = -\arg\left(\langle\psi_{k_1}|\psi_{k_2}\rangle\langle\psi_{k_2}|\psi_{k_3}\rangle\dots\langle\psi_{k_{N-1}}|\psi_{k_N}\rangle\right)$$

Η τεχνιχή αυτή έχει το πλεονέχτημα της πάρα πολύ μεγάλης αχρίβειας για πολύ μεγάλες διαμερίσεις του διαστήματος $[-\pi, \pi]$. Ωστόσο επειδή χρησιμοποιεί την εντολή np.angle()υπάρχει μια αυθαιρεσία την οποία δε μπορούμε να ελέγξουμε στο πως ο χώδιχας επιλέγει το brunch cut του λογαρίθμου.

 Τεχνική Berry Connection : Σε αυτή την τεχνική κάνουμε μια μετατροπή του ολοκληρώματος της Berry Connection, σε άθροισμα :

$$\gamma = i \int_{-\pi}^{\pi} \langle u_{-}(k) | \partial_{k} | u_{-}(k) \rangle \, dk \simeq i \sum_{n=1}^{N} \langle u_{k_{i}} | \partial_{k} | u_{k_{i}} \rangle \, \Delta k$$

Η τεχνική αυτή έχει το πλεονέκτημα πως δεν υπάρχει αυθαιρεσία προσήμου, όμως χάνει στο κομμάτι της ακρίβειας. Επειδή ακριβώς έχουμε μετατρέψει ένα ολοκλήρωμα σε άθροισμα γνωρίζουμε εκ των προτέρων πως θα πρέπει να κάνουμε μια αρκετά μικρή διαμέριση στο διάστημα $[-\pi, \pi]$ ώστε να πάρουμε ένα ακριβές αποτέλεσμα.

Τα παραπάνω μπορούν να επιβεβαιωθούν αν δούμε μερικά αποτελέσματα του κώδικα στην οθόνη χρήστη :

```
= RESTART: /Users/andreaskatsaris/Desktop/Διπλωματική Εργασία/ssh-model.py =
Logarithm : Zak Phase = -3.14159 v = 0.50 w = 1.00 N_k = 10
Connection : Zak Phase = 2.77636 v = 0.50 w = 1.00 N_k = 10
= RESTART: /Users/andreaskatsaris/Desktop/Διπλωματική Εργασία/ssh-model.py =
Logarithm : Zak Phase = -3.14159 v = 0.50 w = 1.00 N_k = 100
Connection : Zak Phase = 3.13826 v = 0.50 w = 1.00 N_k = 100
>>>
= RESTART: /Users/andreaskatsaris/Desktop/Διπλωματική Εργασία/ssh-model.py =
Logarithm : Zak Phase = 3.14159 v = 0.50 w = 1.00 N_k = 1000
Connection : Zak Phase = 3.14156 v = 0.50 w = 1.00 N_k = 1000
>>>
= RESTART: /Users/andreaskatsaris/Desktop/Διπλωματική Εργασία/ssh-model.py =
Logarithm : Zak Phase = -3.14159 v = 0.50 w = 1.00 N_k = 10000
Connection : Zak Phase = 3.14159 v = 0.50 w = 1.00 N_k = 10000
>>>
= RESTART: /Users/andreaskatsaris/Desktop/Διπλωματική Εργασία/ssh-model.py =
Logarithm : Zak Phase = -0.00000 v = 1.00 w = 0.50 N_k = 10000 Connection : Zak Phase = 0.00000 v = 1.00 w = 0.50 N_k = 10000
```

Τέλος είναι σαφές από τα παραπάνω αποτελέσματα πως η Berry Phase (Zak Phase) όπως είχαμε προβλέψει από τη θεωρητική προσέγγιση μας είναι μηδέν για την Trivial Case και π για την Topological Case. Έχουμε επιλέξει να δείξουμε αυτά τα αποτελέσματα για συγκεκριμένες τιμές των παραμέτρων. Γενικά ο κώδικας αναπαράγει σωστά αποτελέσματα για οποιεσδήποτε τιμές των παραμέτρων v και w (εκτός προφανώς από την περίπτωση όπου v = w όπου ο κώδικας θα βγάλει αποτέλεσμα, αλλά δε μπορούμε να το ερμηνεύσουμε).

4.2 Μη Ερμιτιανό (\mathcal{PT}) SSH μοντέλο & Εμφύτευση Ατέλειας

Σε αυτό το σημείο θα παραθέσουμε τις προσθήχες και τις αλλαγές που έχουμε κάνει στον προηγούμενο κώδικα ώστε να περιγράψουμε την επέκταση του ερμιτιανού SSH μοντέλου στο μη ερμιτιανό (\mathcal{PT}) SSH μοντέλο, καθώς επίσης και την εμφύτευση ατέλειας στον κώδικα. Οι βιβλιοθήχες που χρησιμοποιούμε είναι αχριβώς οι ίδιες με πριν, ενώ έχουμε ορίσει ξανά και τις ίδιες συναρτήσεις.

Λειτουργία Συνάρτησης : Υπολογισμός τετραγώνου του μέτρου ανύσματος, για κάθε συνιστώσα ξεχωριστά

```
90 def vec_norm_squared(A_vector) :
91    norm=[]
92    for i in range(len(A_vector)) :
93         norm.append(np.vdot(A_vector[i],A_vector[i]))
94    norm=np.array(norm)
95    norm=norm.real
96    return (norm)
```

Επεξήγηση : Κατασκευάζουμε μια λίστα η οποία έχει ως στοιχεία το τετράγωνο του μέτρου κάθε συνιστώσας ενός ανύσματος. Αν σκεφτούμε ένα άνυσμα στήλη :

$$\mathbf{a} = \left(\begin{array}{ccc} a_1 & a_2 & \cdots & a_N \end{array} \right)^{\mathsf{T}}$$

όπου a_i οι συνιστώστες του ανύσματος, έχουμε για το τετράγωνο του μέτρου του :

$$\|\mathbf{a}\|^2 = \|a_1\|^2 + \|a_2\|^2 + \dots + \|a_N\|^2$$

Η λίστα που έχουμε κατασκευάσει έχει ακριβώς ως συνιστώσες τους όρους αυτούς του αθροίσματος. Την παραπάνω συνάρτηση, την χρησιμοποιούμε όταν θέλουμε να σχεδιάσουμε την $\|\psi\|^2$ σε κάθε σημείο της αλυσίδας.

Λειτουργία Συνάρτησης : Κανονιχοποίηση βάση αριστερών και δεξιών ιδιοανυσμάτων Χαμιλτονιανής.

```
98 def normalise_vec(L,R) :
99 norm,phase=cmath.polar(np.vdot(L,R))
100 normalise_factor=np.exp(-1j*phase/2)*1/np.sqrt(norm)
101 L_normalised=normalise_factor*L
102 R_normalised=normalise_factor*R
103 return (L_normalised,R_normalised)
```

Επεξήγηση : Κατά την ανάλυση \mathcal{PT} μοντέλων μπορούμε, για τα $\langle L_n |$ αριστέρα ιδιοανύσματα και $|R_n\rangle$ δεξιά ιδιοανύσματα μιας μη ερμιτιανής Χαμιλτονιανής, να τα ορίσουμε πάντα με τέτοιο τρόπο ώστε να ικανοποιούν τη σχέση :

$$\langle L_n | R_m \rangle = \delta_{nm}$$

Ωστόσο η Python κατά τον υπολογισμό των ιδιοανυσμάτων τα κανονικοποιεί ώστε να είναι κάθετα με τον εαυτό τους. Αυτή η συνάρτηση επιβάλλει την καθετότητα μεταξύ αριστερού και δεξιού ιδιοανύσματος, ώστε να μπορούμε να συγκρίνουμε τα αποτελέσματα του κώδικα που σχετίζονται με τα ιδιοανύσματα με αυτά της αναλυτικής προσέγγισης. Λειτουργία Συνάρτησης : Κανονικοποίηση ανύσματος με βάση τη δεύτερη συνιστώσα

```
      105
      def
      second_comp_norm(A_vector) :

      106
      r1,theta1=cmath.polar(A_vector[0])

      107
      r2,theta2=cmath.polar(A_vector[1])

      108
      A_gf0=cmath.rect(r1,theta1-theta2)

      109
      A_gf1=cmath.rect(r2,theta2-theta2)

      110
      A_gf=np.array([A_gf0, A_gf1])

      111
      return(A_gf)
```

Επεξήγηση : Σε αυτόν τον κώδικα έχουμε ορίσει μια συνάρτηση η οποία κάνει ακριβώς τη δουλειά του gauge fixing που περιγράψαμε στον υπολογισμός της Berry Phase (Zak Phase) αναφορικά με την αυθαιρεσία φάσης που έχει η Python όταν επιστρέφει τα ιδιοανύσματα.

Λειτουργία Συνάρτησης : Υπολογισμός του Petermann και Mean Petermann Factor

```
120 def Petermann_factor(L_n,R_n) :
121
       K_n=np.vdot(L_n,L_n)*np.vdot(R_n,R_n)
       return(K_n)
122
123
124 def mean_Petermann(K) :
125
      sum1=0
      for i in range(len(K)) :
126
           sum1=sum1+K[i]
127
     mpf=sum1/len(K)
128
129 return(mpf)
```

Επεξήγηση: Ακολουθόντας το παράδειγμα του [10] και θέλοντας να αναπαράγουμε τα αποτελέσματα του, ορίζουμε τις δύο παραπάνω συναρτήσεις οι οποίες μας επιτρέπουν να υπολογίσουμε τον Petermann Factor για κάθε κατάσταση και τον Mean Petermann Factor για όλο το σύστημα. Οι Χαμιλτονιανές οι οποίες είναι μη ερμιτιανές έχουν το ιδιαίτερο χαρακτηριστικό τα αριστερά από τα δεξιά ιδιοανύσματα να είναι διαφορετικά. Μπορούμε όπως έχουμε αναφέρει να ορίσουμε τη σχέση ορθογωνονιότητας μεταξύ τους $\langle L_n | R_m \rangle = \delta_{nm}$, ωστόσο θα πρέπει να είναι σαφές πως τα αριστερά ιδιοανύσματα δεν είναι ορθογώνια με τον εαυτό τους και αντίστοιχα τα δεξιά. Ένα μέτρο της μη ορθογωνιότητας των ανυσμάτων είναι ο Petermann Factor όπου δίνεται από τη σχέση για κάθε κατάσταση :

$$K_n = \langle L_n | L_n \rangle \langle R_n | R_n \rangle$$

Το σημαντικό είναι πως σε ένα σημείο στο οποίο η ιδιοτιμή της ενέργειας γίνεται μηδέν, και άρα έχουμε την προϋπόθεση για εντοπισμένες λύσεις, ο Petermann Factor αποκλίνει και άρα μπορούμε να τον χρησιμοποιήσουμε για να βρούμε αυτό το σημείο.

Ο Mean Petermann Factor ορίζεται ως :

$$\overline{K} = \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{n=1}^{N} K_n$$

όπου \mathcal{N} ο αριθμός των καταστάσεων. Για ένα SSH μοντέλο με N κυψελίδες έχουμε $\mathcal{N} = 2 \cdot N$. Ο Mean Petermann Factor παίρνει την τιμή 1 αν οι ιδιοκαταστάσεις είναι ορθογώνιες, ενώ παίρνει μεγαλύτερες τιμές του 1 για μη ορθογώνιες καταστάσεις. Στα διαγράμματα που έχουμε, έχει σχεδιαστεί ο αντίστροφος του Mean Petermann Factor. **Λειτουργία Συναρτήσεων :** Ορισμός Finite και Bulk Hamiltonian για το μη ερμιτιανό (*PT*) SSH μοντέλο με ατέλεια.

```
167 ##Hamiltonian##
168
169 def Finite_Hamiltonian(u,v,w,N,d) :
      diag1=[]
170
      diag2=[]
171
      diag3=[]
      for i in range(2*N) :
173
          if i % 2 == 0 :
174
               diag1.append(v)
               diag2.append(u*1j)
176
               diag3.append(v)
           else :
178
               diag1.append(w)
179
               diag2.append(-u*1j)
180
               diag3.append(w)
181
      diag1=np.array(diag1)
182
      diag2=np.array(diag2)
183
184
      diag3=np.array(diag3)
       diagonals=[diag2,diag1,diag3]
185
      H_R=diags(diagonals,[0,-1,1]).toarray()
186
                       #Periodic Boundary Conditions
187
      H_R[O][-1]=w
                       #Periodic Boundary Conditions
      H_R[-1][0] = w
188
                      #Internal Transition Defect
      H_R[0][1]=d
189
      H_R[1][0]=d #Internal Transition Defect
190
   #
      H_R[0][0]=d*1j #non-Hermitian Defect
191
      H_R[1][1]=-d*1j #non-Hermitian Defect
192
193
      return(H_R)
194
195 ##Bulk Hamiltonian##
196
197 def Bulk_Hamiltonian(u,v,w,k) :
       bulk_ham=[[u*1j,v+w*np.exp(-1j*k)],[v+w*np.exp(1j*k),-u*1j]]
198
       bulk_ham=np.array(bulk_ham)
199
      return(bulk_ham)
200
201
```

Επεξήγηση : Η Finite Hamiltonian έχει βασιστεί ακριβώς στον ορισμό του ερμιτιανού SSH μοντέλου, με μια βασική αλλαγή και τρεις προσθήκες :

- Έχουμε αλλάξει το staggered onsite potential ώστε να είναι καθαρά φανταστικό.
- Στις γραμμές χώδιχα 187 χαι 188 εφαρμόζουμε περιοδιχές συνοριαχές συνθήχες. Επί της ουσίας το τελευταίο σημείο της αλυσίδας B ενώνεται με το πρώτο σημείο της αλυσίδας A, χαι αυτή η μετάβαση είναι εξωτεριχή άρα περιγράφεται από την παράμετρο w.
- Στις γραμμές κώδικα 189 και 190 αλλάζουμε την παράμετρο εσωτερικής μετάβαση για την πρώτη κυψελίδα της αλυσίδας από v σε d και άρα φυτεύουμε την ατέλεια στην αλυσίδα.
- Στις γραμμές κώδικα 191 και 192 αλλάζουμε την παράμετρο του gain και loss στην πρώτη κυψελίδα της αλυσίδας από u σε d και άρα αν τρέξουμε τον κώδικα με αυτές τις γραμμές κώδικα θα έχουμε το άλλο είδος ατέλειας.

Σχόλιο : Η Finite Hamiltonian περιγράφεται από τις παραμέτρους του μοντέλου u, v και w, από τον αριθμό κυψελίδων N και από μια παράμετρο d που σχετίζεται με την ατέλεια (d:defect).

Είναι σημαντικό να καταλαβαίνουμε κάθε φορά η παράμετρος d για ποιο είδος ατέλειας χρησιμοποιείται και άρα τι εκφράζει. Ο λόγος που έχουμε ορίσει έτσι τη Χαμιλτονιανή, είναι για να μπορούμε να χειριζόμαστε πιο εύκολα αλλαγές στον κώδικα.

Η Bulk Hamiltonian αλλάζει μόνο στα διαγώνια στοιχεία όπου απλώς τα πολλαπλασιάζουμε με τη φανταστική μονάδα *i*.

Λειτουργία Εντολών : Ορισμός Παραμέτρων του συστήματος και λύση του προβλήματος ιδιοτιμών και ιδιοσυναρτήσεων για αυτές τις συγκεκριμένες τιμές παραμέτρων

```
204 ##General Characteristics of the PT SSH-model##
205 u=0.00 #staggered potential
206 v=1.00 #internal hopping amplitude
207 w=0.50 #external hopping amplitude
208 d=1.50 #defect parameter
209 N=10 #number of cites
210 k=0 #zero momentum
211
212
213 #Hamiltonians
214
215 H_bulk=Bulk_Hamiltonian(u,v,w,k)
216 H=Finite_Hamiltonian(u,v,w,N,d)
217
218 ##Solving Eigenfunction-Eigenvalue problem ##
219
220 (E,psi)=la.eig(H)
221
222 idx=np.argsort(E) ##Sortening for minimum to maximum eigenvalue
223 E=E[idx]
224 psi=psi[:,idx]
225 psi=np.transpose(psi) ## Make rows eigenfunction
226
```

Επεξήγηση : Όμοια με την ερμιτιανή εκδοχή. Απλώς έχουμε προσθέσει την παράμετρο d που σχετίζεται με την ατέλεια. Μέχρι αυτό το σημείο μπορούμε να αναπαράγουμε, με κάποιες ακόμα εντολές βεβαίως για τη σχεδίαση, τα διαγράμματα που βλέπουμε στα Σχήματα 3.4 και 3.5 (α) και (γ) καθώς επίσης και στα Σχήματα 3.7 και 3.9.

 $\Sigma \chi \delta \lambda i o$: Τα διαγράμματα που αφορούν την αναπάρασταση του $\|\psi\|^2$ σε κάθε σημείο της αλυσίδας είναι φτιαγμένα έτσι ώστε το πρώτο σημείου του γραφήματος να είναι το σημείο B της πρώτης κυψελίδας και το τελευταίο σημείο να είναι το σημείο A της πρώτης κυψελίδας της αλυσίδας. Επί της ουσίας έχουμε κάνει μια μετατόπιση κατά τα αριστερά, ώστε τα άκρα του γραφήματος να ταυτίζονται με τα σημεία της πρώτης κυψελίδας. Αυτό το έχουμε κάνει διότι οι λύσεις που μελετάμε είναι εντοπισμένες γύρω από την ατέλεια και με αυτή την αναπαράσταση μοιάζουν γραφικά με αυτές των Edge States. Σε καμία περίπτωση όμως δεν πρέπει αυτές οι δύο περιπτώσεις να συγχέονται. Έχουμε δύο διαφορετικά είδη εντοπισμένων λύσεων :

- Edge States : Εμφανίζονται σε πεπερασμένες αλυσίδες χωρίς περιοδικές συνοριακές συνθήκες επειδή οι παράμετροι του συστήματος v και w το επιτρέπουν.
- Zero Modes : Εμφανίζονται σε πεπερασμένες αλυσίδες με περιοδικές συνοριακές συνθήκες επειδή υπάρχει ατέλεια στην αλυσίδα με κατάλληλη τιμή.

Λειτουργία Εντολών : Εμφύτευση ατέλειας για διαφορετικές τιμές της παραμέτρου d

```
266 ##Planting the defect for different values of d
267
268 d_min=1.00
269 \, d_max = 0.00
270 n_d=50
271 d_list=list_of_values(d_min,d_max,n_d)
272
273 E_dr=[]
274 E_di=[]
275
276 for i in range(n_d) :
      E_dr12=[]
277
      E_di12=[]
278
      ham_d=Finite_Hamiltonian(u,v,w,N,d_list[i])
279
      (E_d,psi_d)=la.eig(ham_d, left=False, right=True)
280
       idx=np.argsort(E_d) ##Sortening for min to max eigenvalue
281
      E_d=E_d[idx]
282
      E_dr12.append(E_d.real[N])
283
      E_dr12.append(E_d.real[N-1])
284
     E_di12.append(E_d.imag[N])
285
     E_di12.append(E_d.imag[N-1])
286
287
      E_dr.append(E_dr12)
288
      E_di.append(E_di12)
289
290 E_dr=np.array(E_dr)
291 E_di=np.array(E_di)
292 E_dr=np.sort(E_dr)
293 E_di=np.sort(E_di)
294 E_dr=np.transpose(E_dr)
295 E_di=np.transpose(E_di)
296
```

Επεξήγηση : Η παραπάνω διαδικασία κατασκευάζει δύο λίστες με τις τιμές του πραγματικού και του φανταστικού μέρους των δύο ιδιοτιμών ενέργειας που είναι πλησιέστερα στο μηδέν για διαφορετικές τιμές της παραμέτρου d. Αυτή η διαδικασία έχει νόημα και προσδίδει πληροφορία μόνο στην περίπτωση όπου η ατέλεια είναι τέτοια που αλλάζει σε μια κυψελίδα το εσωτερικό πλάτος μετάβασης. Χάρη σε αυτή τη διαδικασία μπορούμε να κατασκεύασουμε τα διαγράμματα (β) στα Σχήματα 3.4 και 3.5.

 $\Sigma \chi \delta \lambda i o$: Η Python όταν ταξινομεί μιγαδιχούς αριθμούς τους ταξινομεί βάση του πραγματιχού τους μέρους. Για αυτό φτιάχνουμε δύο ξεχωριστές 2-D λίστες, οι οποίες αρχικά έχουν δύο στήλες που η κάθε μια έχει το πραγματικό και το φανταστικό μέρος των ιδιοτιμών της ενέργειας για τις διαφορετικές τιμές της παραμέτρου d. Εν συνεχεία εφαρμόζουμε την εντολή numpy.sort() για τις δύο λίστες και έτσι πλέον η κάθε μια λίστα έχει στην πρώτη της στήλη τη μικρότερη τιμή και στην δεύτερη τη μεγαλύτερη τιμή. Με την εντολή numpy.transpose() έχουμε πλέον δύο γραμμές στην κάθε λίστα οι οποίες πρακτικά μπορούν να χρησιμοποιηθούν για την κατασκευή διαγραμμάτων.

Λειτουργία Εντολών : Υπολογισμός του Inverse Mean Petermann Factor για διαφορετικές τιμές της παραμέτρου u

```
315 ##Calculating the Petermann factor for differnet values of u
316
317 u_min=0.00
318 \, u_{max} = 2.00
319 n_u=1000
320 u_list=list_of_values(u_min,u_max,n_u)
321
322 mean_Pf = []
323 inv_mean_Pf=[]
324
325 for i in range(n_u) :
       ham_u=Finite_Hamiltonian(u,v,w,N,u_list[i])
326
       (E,psi_R)=la.eig(ham_u, left=False, right=True)
327
       (E_star,psi_L)=la.eig(ham_u, left=True, right=False)
328
       psi_R=np.transpose(psi_R)
       psi_L=np.transpose(psi_L)
330
331
       K = []
       for i in range(2*N) :
332
           (psi_L_i,psi_R_i)=normalise_vec(psi_L[i],psi_R[i])
333
           K.append(Petermann_factor(psi_L_i,psi_R_i))
334
       mean_Pf.append(mean_Petermann(K))
       inv_mean_Pf.append(1/mean_Petermann(K))
336
337
338 mean_Pf=np.array(mean_Pf)
339 inv_mean_pf=np.array(inv_mean_Pf)
340
```

Επεξήγηση : Έχουμε κάνει ήδη μια ανάλυση για τον Petermann Factor στον ορισμό των συναρτήσεων Petermann_factor() και mean_Petermann(). Σε αυτές τις γραμμές κώδικα υπολογίζουμε τον Mean Petermann και τον Inverse Mean Petermann Factor για διαφορετικές τιμές της παραμέτρου του gain και loss u. Για την αποφυγή σύγχυσης θα πρέπει να διευκρινίσουμε πως τη συγκεκριμένη διαδικασία τη χρησιμοποιούμε στην περίπτωση όπου έχουμε ατέλεια τέτοια ώστε μια χυψελίδα να είναι μη ερμιτιανή (έχει gain και loss) ενώ όλη η υπόλοιπη αλυσίδα είναι ερμιτιανή (δεν έχει gain και loss). Πρακτικά κρατάμε σταθερές τις παραμέτρους v και w και επηρεάζουμε την πάραμετρο στον κώδικα d η οποία σχετίζεται με την ατέλεια, που επί της ουσίας είναι η παράμετρος u για μια μόνο αλυσίδα. Βάση αυτής της διαδικασίας μπορούμε να βρούμε την τιμή του gain και loss για την οποία "αλλάζει φάση" η αλυσίδα, υπό την έννοια ότι έχουμε εμφάνιση των Defect Mode. Βάση αυτής της διαδικασίας κατασκευάζουμε το διάγραμμα του Σχήματος 3.8.

Σχόλιο : Η εντολή scipy.linalg.eig() της Python παρέχει την επιλογή να επιστρέψει το πρόγραμμα τα δεξιά ή τα αριστερά ιδιοανύσματα του πίνακα που δίνουμε σαν τιμή εισόδου. Χρησιμοποιούμε αυτή την δυνατότητα για να υπολογίσουμε τα αριστέρα και δεξιά ιδιοανύσματα του συστήματος. Ωστόσο όπως αναφέραμε αυτά επιστρέφουν κανονικοποιημένα στη μονάδα, οπότε στη συνέχεια χρησιμοποιούμε τη συνάρτηση μας normalise_vec() και παίρνουμε την κανονικοποίηση που θέλουμε. Θα μπορούσαμε να βρούμε τα αριστέρα ιδιοανύσματα αν υπολογίζαμε μέσω της εντολής numpy.conjugate() τον ερμιτιανό συζυγή πίνακα που αναπαριστά τη Χαμιλτονιανή, και ύστερα βρίσκαμε τα δεξιά ιδιοανύσματα αυτού. Και οι δύο τρόποι είναι αποδεκτοί, αν και για μεγάλους πίνακες η επιλογή που έχουμε κάνει είναι πιο αποτελεσματική, δεδομένου ότι δεν απαιτούμε από το πρόγραμμα να κάνει επιπρόσθετες πράξεις για να υπολογίσει το ερμιτιανό συζηγές του πίνακα. **Λειτουργία Εντολών :** Υπολογισμός του Inverse Participation Ratio για διαφορετικές τιμές των παραμέτρων *u* και *d*

```
596 ##Find Petermann's factor for different values of d and u in an
597 ##non-Hermitian chain
598
599 u_min=0.00
600 \, u_max = 0.50
601 n_u=100
602 u_list=list_of_values(u_min,u_max,n_u)
603
604 \, d_min=0.00
605 \, d_max = 1.00
606 n_d=100
607 d_list=list_of_values(d_min,d_max,n_d)
608
609 inv_mean_pf_2D=[]
610
611 for i in range(n_d) :
       mean_Pf=[]
612
       inv_mean_Pf=[]
613
       for j in range(n_u) :
614
           ham_u=Finite_Hamiltonian(u_list[j],v,w,N,d_list[i])
615
           (E,psi_R)=la.eig(ham_u, left=False, right=True)
616
           (E_star,psi_L)=la.eig(ham_u, left=True, right=False)
617
           psi_R=np.transpose(psi_R)
618
           psi_L=np.transpose(psi_L)
619
           K = []
620
           for k in range(2*N) :
621
                (psi_L_k,psi_R_k)=normalise_vec(psi_L[k],psi_R[k])
622
                K.append(Petermann_factor(psi_L_k,psi_R_k))
623
           mean_Pf.append(mean_Petermann(K))
624
           inv_mean_Pf.append(1/mean_Petermann(K))
625
       mean_Pf=np.array(mean_Pf)
626
627
       inv_mean_pf=np.array(inv_mean_Pf)
       inv_mean_pf_2D.append(inv_mean_pf)
628
629
630 inv_mean_pf_2D=np.array(inv_mean_pf_2D)
631 inv_mean_pf_2D_tp=np.transpose(inv_mean_pf_2D)
632
```

Επεξήγηση: Σε αυτές τις γραμμές χώδιχα υπολογίζουμε τον Mean Petermann και τον Inverse Mean Petermann Factor για διαφορετικές τιμές της παραμέτρου του gain και loss u καθώς επίσης και της παραμέτρου της ατέλειας d. Αυτή η διαδικασία έχει νόημα στην περίπτωση όπου έχουμε μια μη ερμιτιανή Αλυσίδα με gain και loss, και η ατέλεια μας είναι τέτοια ώστε να αλλάζει το πλάτος εσωτερικής μετάβασης για μια κυψελίδα. Η παραπάνω διαδικασία μας επιτρέπει να κατασκευάσουμε το χρωματικό διάγραμμα στο Σχήμα 3.6, το οποίο μας δείχνει πως όσο μεγαλύτερη είναι η τιμή της παραμέτρου u, τόσο πιο νωρίς, δηλαδή σε τόσο μεγαλύτερη τιμή της παραμέτρου d έχουμε την εμφάνιση των Zero Modes.

Επίλογος

Υστερα από αυτή τη μαχροσκελή ανάλυση, μπορούμε να συνοψίσουμε το σύνολο της εργασίας σε τρία βασικά κομμάτια. Στην ιστορία, τη θεωρητική κατανόηση και την υπολογιστική κατανόηση των αλυσίδων τύπου SSH.

Αρχικά είναι σημαντικό να γνωρίζουμε την ιστορία του κλάδου των Τοπολογικών Μονωτών, η οποία βασίστηκε σε μια ιδιαιτέρως ενδιαφέρουσα ιδέα. Η υπόθεση πως κάποια υλικά θα παρουσίαζαν το *QHE* χωρίς την ύπαρξη εξωτερικού μαγνητικού πεδίου δεν είναι καθόλου τετριμμένη. Ωστόσο, τα συγκεκριμένα υλικά όχι μόνο υπάρχουν, αλλά η λογική πίσω από αυτά μπορεί να εμφανιστεί και σε απλά 1-D μοντέλα, όπως το SSH μοντέλο που μελετήσαμε. Οι ανθεκτικά εντοπισμένες λύσεις στα άκρα μιας διάταξης, είναι ιδιαίτερως σημαντική σε ό,τι αφορά τις εφαρμογές, όπως για παράδειγμα η μεταφορά κβαντικών καταστάσεων.

Για να μπορέσουμε να κατανοήσουμε σε μεγαλύτερο βάθος τις έννοιες που αφορούν τους Τοπολογικούς Μονωτές, μελετήσαμε το SSH μοντέλο από την αρχή του. Ορίσαμε τις καταστάσεις του, τη Χαμιλτονιανή του στον ευθύ χώρο, και με χρήση υποθέσεων μεταβήκαμε στην περιγραφή κύριου μέρους. Η πιο σημαντική παρατήρηση από όλες είναι αυτή του bulk-boundary correspondence, βάση του οποίου δύο τοπολογικά αναλλοίωτα, ένα το οποίο ορίζεται στο κύριο μέρος, και ένα που ορίζεται στο άκρο του συστήματος, υπό μια έννοια συνδέονται, κάνοντας εφικτή την πρόβλεψη ύπαρξης εντοπισμένων καταστάσεων στα άκρα του συστήματος καθαρά από την ανάλυση του κύριου μέρους του. Συνεχίσαμε αναδεικνύοντας την ύπαρξη εντοπισμένων λύσεων γύρω από ατέλεια της αλυσίδας, ακόμη και στην περίπτωση όπου η αλυσίδα χωρίς την ατέλεια δεν θα υποστήριζε τέτοιες καταστάσεις, μια ιδιότητα η οποία μπορεί να εφαρμοστεί στο σχεδιασμό συμβατικών φωτονικών κρυστάλων lasers.

Σημαντικό ρόλο συνετέλεσε στο να μπορέσουν να γίνουν αντιληπτές όλες οι έννοιες οι ανάπτυξη των δύο αλγορίθμων. Η υπολογιστική διαδικασία, δηλαδή η μετάβαση μιας αναλυτικής περιγραφής σε ένα περιβάλλον που επιτρέπει το γρήγορο υπολογισμό αποτελεσμάτων για διαφορετικές τιμές των παραμέτρων των προβλημάτων, αλλά και την επίλυση προβλημάτων τα οποία με αναλυτικός υπολογισμούς, λόγω της πολυπλοκότητας των πράξεων θα ήταν αδύνατη, κρίνεται αναγκαία σε έναν τέτοιο ερευνητικό κλάδο. Πολλά από τα αποτελέσματα που παρουσιάσαμε μπορούν και υπάρχουν καθαρά και μόνο επειδή αναπτύξαμε τους κώδικες αυτούς. Ο τρόπος με τον οποίο έχουμε γράψει τους κώδικες είναι τέτοιος ώστε να μπορούν με μικρές μετατροπές να περιγράψουν ένα μεγαλύτερο φάσμα συστημάτων, συγκριτικά με αυτά που παρουσιάσαμε στην εργασία.

Το εξαιρετικό, αναφορικά με το SSH μοντέλο, είναι η ικανότητά του να υποστηρίζει εντοπισμένες λύσεις για συγκεκριμένες τιμές των παραμέτρων του. Η ερμιτιανή εκδοχή του υποστηρίζει τις γνωστές *Edge States* όταν περιγράφει μια πεπερασμένη αλυσίδα χωρίς περιοδικές συνοριακές συνθήκες. Η ύπαρξη ατέλειας σε συγκεκριμένο σημείο της αλυσίδας είναι ικανή να δημιουργήσει εντοπισμένες λύσεις γύρω της σε πεπερασμένη και περιοδική αλυσίδα. Η εμφύτευση της ατέλειας δείξαμε πως δημιουργεί τέτοιες λύσεις τόσο στην ερμιτιανή όσο και στη μη ερμιτιανή εκδοχή.

Βάση των όσων έχουμε αναφέρει μια άμεση επέχταση της δουλειάς αυτής, θα ήταν η μελέτη της συμπεριφοράς των *Edge States* στην *Topological Case* μιας μη ερμιτιανής αλυσίδας, με πεπερασμένο αριθμό χυψελίδων χαι χωρίς περιοδιχές συνοριαχές συνθήχες. Η συγχεχριμένη διερεύνηση έχει

ενδιαφέρον αφού η συμβατική σχέση του bulk-boundary correspondence φαίνεται να χαλάει σε αυτή την περίπτωση.

Τέλος, έχοντας αποκτήσει όλες αυτές τις γνώσεις που αναπτύξαμε μπορούμε να μελετήσουμε και διαφορετικά 1-D μοντέλα και να δούμε τη σχέση τους με το SSH. Ένα ιδιαίτερα ενδιαφέρον μοντέλο είναι αυτό που προτάθηκε από τον Alexei Yu Kitaev το 2001 [19] για την περιγραφή ασύζευκτων φερμιονίων Majorana σε κβαντικά καλώδια. Η συγκεκριμένη εργασία έχει αποτελέσει αφετηρία για μια νέα κατεύθυνση στη Φυσική της Κβαντικής Πληροφορίας τα τελευταία χρόνια, και αυτό συμβαίνει διότι τα φερμιόνια Majorana μας θέτουν ένα βήμα πιο κοντά στους τοπολογικούς κβαντικούς υπολογιστές, οι οποίοι θα είναι ιδιαίτερως ανθεκτικοί στο να μην κάνουν λάθη, αφού η στατιστική που ακολουθούν τα φερμιόνια Majorana είναι μη-Αβελιανή.

Παραρτήματα

Παράρτημα Α : Γενική 2 × 2 Χαμιλτονιανή

Για ένα σύστημα με δύο εσωτερικές καταστάσεις μπορούμε να γράψουμε τη Χαμιλτονιανή στη γενική μορφή :

$$\hat{H} = d_0 \hat{\sigma}_0 + \mathbf{d} \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} = \begin{pmatrix} d_0 + d_z & d_x - id_y \\ d_x + id_y & d_0 - d_z \end{pmatrix}$$
(II.1)

όπου :

$$\mathbf{d} = (d_x, d_y, d_z) \tag{\Pi.2}$$

και

$$\hat{\sigma}_0 = \hat{\mathbb{I}}_2 \quad ; \quad \hat{\boldsymbol{\sigma}} = (\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z)$$
(II.3)

Είναι αρκετά εύκολο να υπολογίσου
με τη σχέση διασποράς για την ενέργεια για τη Χαμιλτονιανή της σχέση
ς $(\Pi.1)$:

$$E_{\pm} = d_0 \pm \sqrt{d_x^2 + d_y^2 + d_z^2} = d_0 \pm \|\mathbf{d}\| \tag{\Pi.4}$$

και τις αντίστοιχες ιδιοκαταστάσεις :

$$|\psi_{+}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\|\mathbf{d}\|(d_{z} + \|\mathbf{d}\|)}} \begin{pmatrix} d_{z} + \|\mathbf{d}\| \\ d_{x} + id_{y} \end{pmatrix}$$
(II.5)

$$|\psi_{-}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\|\mathbf{d}\|(d_{z} + \|\mathbf{d}\|)}} \begin{pmatrix} id_{y} - d_{x} \\ d_{z} + \|\mathbf{d}\| \end{pmatrix}$$
(II.6)

Αν ισχύει πως $d_z=0,$ τότε έχουμε άμεσα :

$$|\psi_{+}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}\|\mathbf{d}\|} \begin{pmatrix} \|\mathbf{d}\| \\ d_{x} + id_{y} \end{pmatrix} \quad ; \quad |\psi_{-}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}\|\mathbf{d}\|} \begin{pmatrix} id_{y} - d_{x} \\ \|\mathbf{d}\| \end{pmatrix} \tag{II.7}$$

Και αν σκεφτούμε πως αν οι παράμετρο
ι $d_x,\ d_y$ είναι πραγματικές, τότε σε πολική μορφή ο μιγαδικός αριθμό
ς $d_x+id_y,$ γράφεται :

$$d_x + id_y = \|d\|e^{i\phi} \tag{\Pi.8}$$

όπου $\phi = \tan^{-1}\left(rac{d_y}{d_x}
ight)$, μπορούμε να καταλήξουμε στις κομψές σχέσεις :

$$|\psi_{+}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1\\ e^{i\phi} \end{pmatrix} \quad ; \quad |\psi_{-}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -e^{-i\phi}\\ 1 \end{pmatrix}$$
(II.9)

Και δεδομένου ότι μπορούμε να στρίψουμε κατά μια αυθαίρετη φάση τα ανύσματα χωρίς να αλλοιώσουμε τη φυσική που περιγράφουν, μπορούμε πολλαπλασιάζοντας το $|\psi_+\rangle$ με $e^{-i\phi}$, να καταλήξουμε για ένα σύστημα με $d_z = 0$ στη συνοπτική έκφραση :

$$|\psi_{\pm}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \pm e^{-i\phi} \\ 1 \end{pmatrix} \tag{II.10}$$

Παράρτημα Β : Μαθηματικές Πράξεις

B1. Προβολή bulk-Hamiltonian στο χώρο των χυματανυσματών Bloch k

Βάση των σχέσεων (3.14) και (3.17) έχουμε :

$$\begin{split} H(k) &= \langle k | H_{bulk} | k \rangle \\ &= v \sum_{m=1}^{N} \sum_{m'=1}^{N} \sum_{m''=1}^{N} \sum_{m''=1}^{N} \frac{1}{\sqrt{N}} e^{-ikm''} \langle m'' | m \rangle \langle m | \frac{1}{\sqrt{N}} e^{ikm'} | m' \rangle \otimes \sigma_x \\ &+ w \sum_{m=1}^{N} \sum_{m'=1}^{N} \sum_{m''=1}^{N} \frac{1}{\sqrt{N}} e^{-ikm''} \langle m'' | m \mod N \rangle + 1 \rangle \langle m | \frac{1}{\sqrt{N}} e^{ikm'} | m' \rangle \otimes \left(\frac{\sigma_x + i\sigma_y}{2} \right) \\ &+ w \sum_{m=1}^{N} \sum_{m'=1}^{N} \sum_{m''=1}^{N} \frac{1}{\sqrt{N}} e^{-ikm''} \langle m'' | m \rangle \langle (m \mod N) + 1 | \frac{1}{\sqrt{N}} e^{ikm'} | m' \rangle \otimes \left(\frac{\sigma_x - i\sigma_y}{2} \right) \\ &= \frac{v}{N} \sum_{m=1}^{N} \sum_{m'=1}^{N} \sum_{m''=1}^{N} e^{-ikm''} e^{ikm'} \delta_{m'm} \delta_{mm'} \otimes \sigma_x \\ &+ \frac{w}{N} \sum_{m=1}^{N} \sum_{m'=1}^{N} \sum_{m''=1}^{N} e^{-ikm''} e^{ikm'} \delta_{m',(m \mod N)+1} \delta_{mm'} \otimes \left(\frac{\sigma_x + i\sigma_y}{2} \right) \\ &+ \frac{w}{N} \sum_{m=1}^{N} \sum_{m'=1}^{N} \sum_{m''=1}^{N} e^{-ikm''} e^{ikm'} \delta_{m',(m \mod N)+1} \delta_{mm''} \otimes \left(\frac{\sigma_x - i\sigma_y}{2} \right) \\ &= \frac{v}{N} \sum_{m=1}^{N} e^{-ikm} e^{ikm} \otimes \sigma_x \\ &+ \frac{w}{N} \sum_{m=1}^{N} e^{-ik((m \mod N)+1)} e^{ikm} \otimes \left(\frac{\sigma_x + i\sigma_y}{2} \right) + \frac{w}{N} \sum_{m=1}^{N} e^{-ik((m \mod N)+1)} e^{-ikm} \otimes \left(\frac{\sigma_x - i\sigma_y}{2} \right) \\ \hat{H}(k) &= \frac{v}{N} N \otimes \sigma_x + \frac{w}{N} \left((N-1) e^{-ik} + e^{-ik} e^{ikN} \right) \otimes \left(\frac{\sigma_x + i\sigma_y}{2} \right) \end{split}$$

Και με χρήση του ότι το kανή
κει στην πρώτη ζώνη Brillouin μπορούμε εύκολα να δείξουμε πως :

$$e^{\pm ikN} = e^{\pm in\frac{2\pi}{N}N} = 1 \tag{\Pi.11}$$

οπότε καταλήγουμε μετά από αυτές τις πράξεις στην κομψή έκφραση :

$$\hat{H}(k) = v \otimes \sigma_x + w e^{-ik} \otimes \left(\frac{\sigma_x + i\sigma_y}{2}\right) + w e^{ik} \otimes \left(\frac{\sigma_x - i\sigma_y}{2}\right) \tag{\Pi.12}$$

και σε μορφή πίνακα :

$$\hat{H}(k) = \begin{pmatrix} 0 & v + we^{-ik} \\ v + we^{ik} & 0 \end{pmatrix}$$
(II.13)

Βιβλιογραφία

- F.D.M Haldane, Model for a Quantum Hall Eff'ect without Landau Levels: Condensed-Matter Realization of the "Parity Anomaly", Phys. Rev. Lett. 61, 2015–2018 (1988).
- [2] S. Murakami, N. Nagaosa and S. C. Zhang, Spin-Hall Insulator, Phys. Rev. Lett. 93, 156804 (2004).
- [3] C.L. Kane and E.J. Mele, Z2 Topological Order and the Quantum Spin Hall Effect Phys. Rev. Lett. 95, 146802 (2005).
- [4] W. P. Su, J. R. Schrieffer, and A. J. Heeger, Solitons in Polyaeetylene, Phys. Rev.Lett. 42, 1698 (1979)
- [5] N. Batra and G. Sheet, *Physics with Coffee and Doughnuts*. Reson 25, 765–786 (2020)
- [6] János K. Asbóth, László Oroszlány and András Pályi Pályi, A Short Course on Topological Insulators, Springer, (2016), https://doi.org/10.1007/978-3-319-25607-8
- [7] Ananya Ghatak and Tanmoy Das, New topological invariants in non-Hermitian systems, J. Phys.: Condens. Matter 31 263001, (2019), https://doi.org/10.1088/1361-648X/ab11b3
- [8] Péter Boross, János K. Asbóth, Gábor Széchenyi, László Oroszlány, and András Pályi, Poor man's topological quantum gate based on the Su-Schrieffer-Heeger model, Phys. Rev. B 100, 045414, (2019)
- [9] Henning Schomerus, Topologically protected midgap states in complex photonic lattices, Opt. Lett. 38, 1912-1914 (2013)
- [10] Fatemeh Mostafavi, Cem Yuce, Omar S. Maganã-Loaiza, Henning Schomerus and Hamidreza Ramezani, Robust localized zero-energy modes from locally embedded PT symmetric defects, Phys. Rev. Research 2, 032057(R), (2020), 10.1103/PhysRevResearch. 2.032057
- S. Weimann, M. Kremer, Y. Plotnik, Y. Lumer, S. Nolte, K. G. Makris, M. Segev, M. C. Rechtsman & A. Szameit, *Topologically protected bound states in photonic parity-time-symmetric crystals*, Nature Materials volume 16, pages433–438 (2017)
- [12] Mingsen Pan, Han Zhao, Pei Miao, Stefano Longhi & Liang Feng Photonic zero mode in a non-Hermitian photonic lattice, Nature Communications volume 9, Article number: 1308 (2018)
- M. V. Berry, F.R.S., Quantal phase factors accompanying adiabatic changes, Proc. R. Soc. Lond. A39245-57 (1984) http://doi.org/10.1098/rspa.1984.0023

- [14] Raffaele Resta, Manifestations of Berry's phase in molecules and condensed matter, J. Phys.: Condens. Matter 12 R107 (2000)
- [15] J. Zak Berry's Phase for Energy Bands in Solids, Phys. Rev. Lett. 62, 2747, (1989)
- [16] David Vanderbilt, Berry Phases in Electronic Structure Theory, Cambridge University Press, (2018), https://doi.org/10.1017/9781316662205
- [17] Carl M. Bender, Introduction to PT-symmetric quantum theory, Contemporary Physics, Vol. 46, No. 4, (2005) https://doi.org/10.1080/00107500072632
- [18] Kenta Esaki, Masatoshi Sato, Kazuki Hasebe, and Mahito Kohmoto, Edge states and topological phases in non-Hermitian systems, Phys. Rev. B 84, 205128 (2011)
- [19] Alexei Yu. Kitaev, Unpaired Majorana fermions in quantum wires, Phys.-Usp. 44 131 (2001)