

UNIVERZA V LJUBLJANI
FAKULTETA ZA MATEMATIKO IN FIZIKO
ODDELEK ZA FIZIKO
MATEMATIČNA FIZIKA

Andrej Kolar - Požun

**PREKLOP HAMILTONJANA TOPOLOŠKEGA
IZOLATORJA Z NEREDOM PREKO TOČKE
FAZNEGA PREHODA**

Magistrsko delo

MENTOR: dr. Tomaž Rejec
SOMENTORICA: mag. Lara Ulčakar

Ljubljana, 2020

Zahvala

hvala

Preklop Hamiltonjana topološkega izolatorja z neredom preko točke faznega prehoda

IZVLEČEK

V delu obravnavamo model enodimensionalnega topološkega izolatorja z neredom. V takem sistemu lahko med topološkima fazama prehajamo tudi z višanjem jakosti nereda. Opazimo široko prevodno območje v okolici te točke faznega prehoda ter Andersonov lokalizacija/delokalizacija prehod točno na točki faznega prehoda. Glavni del dela je posvečen proučevanju preklopov Hamiltonjana preko prej omenjene točke faznega prehoda. Med preklopom se pojavijo eksitacije v prevodnem pasu, katerih število je odvisno od hitrosti preklopa. Ugotovimo, da je pri počasnejših preklopih odvisnost potenčna z nenavadnimi potencami. Potenčno skaliranje opazimo tudi pri najvišje zasedenih energijah v odvisnosti od hitrosti preklopa. Po podrobnejši analizi posameznih eksitacij opazimo, da posamezno preklopljeno stanje praviloma prehaja v le dve različni stanji v prevodnem pasu, kar razložimo s preslikavo na ekvivalenten XX model.

Ključne besede: topološki izolator, SSH model, nered, Andersonova lokalizacija, preklop

Disordered topological insulator Hamiltonian quench across a phase transition point

ABSTRACT

We consider a model of a onedimensional topological insulator with disorder. In such a system a transition between topological phases is also possible by increasing the intensity of the disorder. We notice a wide conducting area around this phase transition point and the Anderson localization/delocalization transition exactly at the phase transition point. The main part of our work is devoted to the study of Hamiltonian quenches over the previously mentioned phase transition point. During the quench, excitations in the conducting band appear with their number depending on the quench speed. For slower quenches, we observe a power law scaling of the number of excitations with respect to the quench speed with unusual exponents. Potential law is also seen in the dependence of the highest occupied energies in the conducting band of the quench speed. After a more detailed analysis of the individual excitations we notice that the quenched state generally only transitions into two different states in the conducting band, which is explained by mapping onto an equivalent XX model.

Keywords: topological insulator, the SSH model, disorder, Anderson localization, quench

Kazalo

1 Uvod	xi
2 Topološki izolatorji	xiii
2.1 SSH model	xiii
2.1.1 Fizika translacijsko invariantnega sistema	xv
2.1.2 Robna stanja	xvii
2.2 Pospološitev	xix
2.2.1 Kiralna simetrija	xix
3 Sistemi z neredom	xxiii
4 Model in metode dela	xxix
5 Rezultati preklapljanja	xxxix
6 Zaključek	xlix
Literatura	li
7 Literatura	li

Poglavlje 1

Uvod

DOBIVAM ERROR, ČE AVTORJE CITIRAM PO APS STANDARDU Že veliko časa je znano, da lahko večino fizikalnih sistemov v fiziki trdne snovi klasificiramo med prevodnike in izolatorje, odvisno od obstoja energijske reže v spektru Hamiltonjana. V zadnjih desetletjih pa so raziskovalno popularni posebni tipi izolatorjev - topološki izolatorji. Te lahko nadalje klasificiramo v različne topološke faze, katerih ureditveni parameter je celoštevilska topološka invarianta. Ti materiali so zanimivi, ker se topološke invariante ne spreminjajo med zveznimi transformacijami, kar pomeni, da so topološke faze robustne: če želimo iti v drugo fazo, moramo narediti nekaj nezveznega ali pa spremeniti eno izmed glavnih lastnosti modela, na primer zapreti energijsko režo ali zlomiti eno izmed simetrij modela. V topoloških izolatorjih ima pomembno vlogo rob materiala, kjer se za razliko od običajnih materialov netrivialna fizika pojavi tudi v termodinamski limiti. Kljub temu, da se v notranjosti material obnaša kot izolator, imamo namreč lahko na robu prisotna prevodna stanja, katerih število je preko tako imenovane notranjost-rob korepondence povezano s topološko invarianto topološkega izolatorja. Iz robustnosti topološke invariante sledi tudi robustnost prevodnih robnih stanj, kar pomeni, da topološki izolator lahko predstavlja dober prevodnik, tudi če so v materialu prisotne nečistoče. Topološki fizikalni sistemi so nasprotno popularna raziskovalna tema, saj temelji ena izmed najbolj razširjenih idej za izgradnjo kvantnega računalnika na topoloških kubitih, ki jih topološka narava ščiti pred dekoherenco.

V tem delu se bomo posvetili enodimensionalnemu topološkemu izolatorju z nečistočami. Povedali smo že, da so topološke faze robustne na nečistoče v materialu, vendar to velja le, ko te niso premočne. Ko so premočne, preide sistem v trivialno topološko fazo. Osredotočili se bomo na preklop Hamiltonjana preko take točke faznega prehoda. S tem imamo v mislih časovni razvoj stanja s časovno odvisnim Hamiltonjanom, saj bomo tudi jakost nereda s časom povečevali. Začeli bomo s stanjem v topološki fazi in z višanjem jakosti nereda končali v trivialni fazi. Zaradi končne hitrosti preklopa in zapiranja energijske reže v tem območju se pri tem v prevodnem pasu pojavijo eksitacije. Glavni cilj dela je raziskati lastnosti teh eksitacij oziroma natančneje, pokazati potenčno skaliranje števila eksitacij v odvisnosti od hitrosti preklopa. Motivacija za to je Kibble-Zurekov mehanizem [1], ki predvičeva prav takšno skaliranje. Kibble-Zurekov mehanizem je sicer primarno namenjen preklopom med navadnimi (torej ne topološkimi) fazami, v katerih je prisoten zlom simetrije, vendar se zadnje čase pogosto uspešno uporablja tudi za prehode med topološkimi fazami [2, 3, 4]. TUKAJ SEM CITIRAL VAJINE ČLANKE, BO V

Poglavlje 1. Uvod

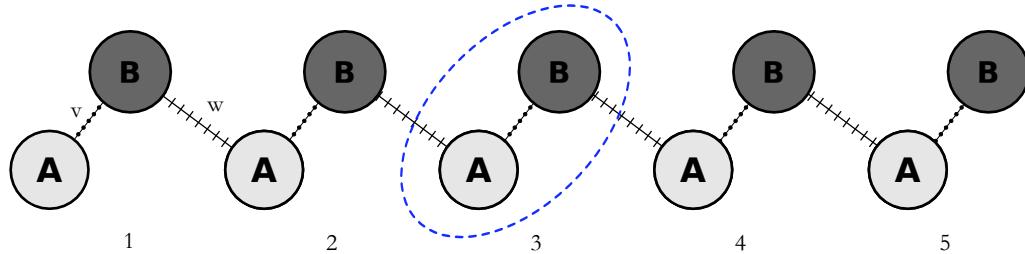
REDU ALI NAJ CITIRAM MANJ/VEČ ČLANKOV?

Poglavlje 2

Topološki izolatorji

2.1 SSH model

Najpreprostejši model topološkega izolatorja je Su-Schrieffer-Heegerjev (SSH) model, ki obravnava enodimenzionalno Bravaisovo rešetko (verigo) z bazo, kjer je osnovna celica sestavljena iz dveh mest, ki ju označimo s črkama A in B. V tem modelu obravnavamo - podobno kot v modelu tesne vezi - elektron, ki skače med najbližjimi sosedi na verigi. Kot je razvidno iz Slike 2.1, je skakanje med mestoma v isti osnovni celici določeno s sklopitvenim parameterom v , medtem ko je skakanje med sosednjimi mesti iz različnih osnovnih celic določeno s (v splošnem različnim) parameterom w .



Slika 2.1: atomska veriga, ki ustreza SSH modelu. Svetlo in temno sivi krogi ustrezajo mestom tipa A in B. Osnovna celica je označena z modro, črtkano črto. Vez med mestoma v isti osnovni celici je označena s črto s pikicami, medtem ko je vez med različnimi osnovnimi celicami označena s črto s prečnimi črtkami. Veriga na sliki je sestavljena iz petih osnovnih celic.

Če prevedemo zgornje napisano v Hamiltonski opis, dobimo SSH-jev Hamiltonjan [5]:

$$\hat{H} = v \sum_{m=1}^{\frac{N}{2}} (|m, B\rangle\langle m, A| + \text{h. c.}) + w \sum_{m=1}^{\frac{N}{2}-1} (|m+1, A\rangle\langle m, B| + \text{h. c.}), \quad (2.1)$$

kjer $|m, \alpha\rangle = |m\rangle \otimes |\alpha\rangle$, z $m = 1, \dots, \frac{N}{2}$ in $\alpha \in \{A, B\}$ označuje stanje elektrona, ki je lokalizirano na podmreži α v m -ti osnovni celici. Število vseh mest v verigi je N , kar pomeni, da je osnovnih celic $\frac{N}{2}$. Analogno razdelimo tudi naš Hamiltonjan na del, ki deluje na zunanjost prostorsko stopnjo $|m\rangle$ in na del, ki deluje na notranjo

prostorsko stopnjo $|\alpha\rangle$:

$$\hat{H} = v \sum_{m=1}^{\frac{N}{2}} |m\rangle\langle m| \otimes \hat{\sigma}_x + w \sum_{m=1}^{\frac{N}{2}-1} \left(|m+1\rangle\langle m| \otimes \frac{\hat{\sigma}_x + i\hat{\sigma}_y}{2} + \text{h. c.} \right). \quad (2.2)$$

2.1.1 Fizika translacijsko invariantnega sistema

Za trenutek pozabimo na rob verige in se osredotočimo na njeno notranjost. Zanima nas torej dolg, sredinski del verige, ki prostorsko prevlada v termodinamski limiti $N \rightarrow \infty$. Ker fizika v notranosti materiala ni odvisna od dogajanja na robu [6], lahko za njeno obravnavo izberemo najpreprostejše robne pogoje - periodične robne pogoje. Takšni robni pogoji ustrezajo translacijsko invariantnemu sistemu, za kar uvedimo oznako TIS. Hamiltonjan, ki opisuje to fiziko \hat{H}_{TIS} , lahko torej dobimo iz prejšnjega Hamiltonjana, če vanj preprosto dodamo člen $w |N/2, B\rangle\langle 1, A|$ (in seveda njegovo hermitsko konjugiranko), ki opiše interakcijo med prvo in zadnjo osnovno celico prvotne verige in jo s tem transformira v periodično verigo. Iščemo N lastnih stanj $|\Psi_n(k)\rangle$ z energijami $E_n(k)$:

$$\hat{H}_{\text{TIS}}|\Psi_n(k)\rangle = E_n(k)|\Psi_n(k)\rangle. \quad (2.3)$$

V zgornji enačbi smo že zapisali energije in stanja kot funkcije Blochovega vektorja k , saj vemo, da velja za translacijsko invariantne sisteme Blochov teorem [6], ki pravi, da lahko lastna stanja napišemo v naslednji obliki:

$$|\Psi_n(k)\rangle = |k\rangle \otimes |u_n(k)\rangle. \quad (2.4)$$

V zgornji enačbi smo vpeljali Blochovo funkcijo $|k\rangle$:

$$|k\rangle = \frac{1}{\sqrt{N/2}} \sum_{m=1}^{\frac{N}{2}} e^{imk} |m\rangle, \quad (2.5)$$

kjer k zavzame $\frac{N}{2}$ različnih vrednosti v prvi Brillouinovi coni. Zdaj lahko definiramo še Hamiltonjan v recipročnem prostoru $\hat{H}(k) = \langle k|\hat{H}_{\text{TIS}}|k\rangle$, ki deluje na notranjo prostorsko stopnjo:

$$\hat{H}(k)|u_n(k)\rangle = E_n(k)|u_n(k)\rangle. \quad (2.6)$$

Če razvijemo notranji del valovne funkcije po podmrežni bazi $|u_n(k)\rangle = a_n(k)|A\rangle + b_n(k)|B\rangle$, postane $\hat{H}(k)$ 2×2 (hermitska) matrika in jo lahko zapišemo kot linearno kombinacijo Paulijevih matrik in identitet:

$$H(k) = d_0(k)\mathbb{I} + d_x(k)\sigma_x + d_y(k)\sigma_y + d_z(k)\sigma_z. \quad (2.7)$$

Iz koeficientov razvoja tvorimo vektor $\mathbf{d}(k) = (d_x, d_y, d_z)(k)$, iz katerega bomo dobili topološke lastnosti modela. Izkaže se, da je za SSH model $d_z(k)$ enak nič. Ko višamo k od 0 proti 2π , torej oriše vektor $\mathbf{d}(k)$ krivuljo v dvodimensionalni (d_x, d_y) ravnini. Zaradi periodičnosti Brillouinove cone mora biti ta krivulja zanka, ki jo lahko topološko klasificiramo s celoštevilskim parametrom - ovojnim številom okoli izhodišča ν [7]. Kot bo jasneje na primerih, nam ovojno število pove, kolikokrat se orientirana zanka "ovije" okoli izhodišča. Konkretno lahko z eksplicitno konstrukcijo Hamiltonjana v recipročnem prostoru dobimo vektor:

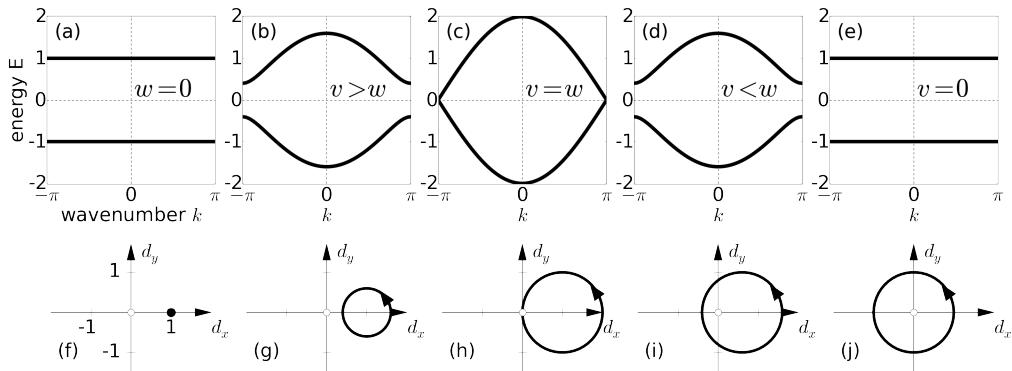
$$\mathbf{d}(k) = (v + w \cos k, w \sin k, 0). \quad (2.8)$$

Zanke, ki ustrezajo različnim izbiram parametrov v, w , lahko vidimo v drugi vrstici na Sliki 2.2. Za $w < v$ imamo $\nu = 0$, medtem ko $w > v$ da $\nu = 1$. Primer, ko velja $w = v$, je poseben, saj gre v tem primeru zanka $\mathbf{d}(k)$ skozi izhodišče,

kar pomeni, da je ovojno število okoli izhodišča nedefinirano. V prvi vrstici je na Sliki 2.2 je prikazana disperzijska relacija za vsak obravnavan primer. Dobimo jo z diagonalizacijo Hamiltonjana v recipročnem prostoru, kar da:

$$E(k) = \pm \sqrt{v^2 + w^2 + 2vw \cos k} \quad (2.9)$$

Vidimo lahko, da je za primere $v \neq w$ prisotna končna energijska reža med prevodnim in valenčnim pasom, kar po definiciji ustreza izolatorju. Pri posebni točki $v = w$, kjer je ovojno število nedefinirano, se energijska reža zapre in sistem preide v prevodno stanje. Opravka imamo torej z dvema možnima izolatorskima fazama, ki se razlikujeta po ureditvenem parameteru ν . Primeru $\nu = 0$ bomo rekli trivialna faza, medtem ko primer $\nu = 1$ ustreza topološki fazji. Ovojno število je topološka invarianta v naslednjem smislu: ohranjajo ga zvezne deformacije (homotopije) zank, ki se izognejo izhodišču. Zvezen prehod med različnima izolatorskima fazama je torej možen le s prehodom skozi prevodno stanje, kar geometrijsko pomeni, da med homotopijo zanka gre skozi izhodišče. K tej lastnosti modela se bomo kasneje vrnili v splošnejšem smislu.



Slika 2.2: v prvi vrstici je prikazana disperzijska relacija za različne kombinacije parametrov v in w . V drugi vrstici so narisane zanke $\mathbf{d}(k)$ v (d_x, d_y) ravnini. Prva stolpca ustreza $\nu = 0$, zadnja ustreza $\nu = 1$, medtem ko gre v sredinskem zanku skozi izhodišče in ν ni definiran. Vir Slike: [8]

Končno omenimo še, da obstaja za ovojno število eksplicitna formula. Ker se zanka izogne izhodišču, jo lahko projeciramo na enotsko kroznico z normiranjem vektorja $\mathbf{d}(k)$:

$$\hat{r}(k) = \frac{\mathbf{d}(k)}{|\mathbf{d}(k)|}. \quad (2.10)$$

Zanima nas celotna sprememba polarnega kota $\Delta\varphi$ tega vektorja, ko gre k od 0 do 2π . Ker imamo opravka z zanko, mora biti ta sprememba celoštevilski večkratnik 2π oziroma po definiciji ovojnega števila $\Delta\varphi = \nu 2\pi$, torej velja

$$\nu = \frac{1}{2\pi} \Delta\varphi = \frac{1}{2\pi} \int_{k=0}^{k=2\pi} d\varphi(k) \quad (2.11)$$

Izraz za polarni kot in njegov diferencial poznamo:

$$\varphi(k) = \arctan(\hat{r}_y(k)/\hat{r}_x(k)) \quad (2.12)$$

$$d\varphi(k) = -\hat{r}_y(k)d\hat{r}_x(k) + \hat{r}_x(k)d\hat{r}_y(k) = (\hat{r}(k) \times d\hat{r}(k))_z, \quad (2.13)$$

Tako dobimo formulo za ovojno število, izraženo z zanko $\widehat{r}(k)$:

$$\nu = \frac{1}{2\pi} \int_{k=0}^{k=2\pi} (\widehat{r}(k) \times d\widehat{r}(k))_z = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \left(\widehat{r}(k) \times \frac{d}{dk} \widehat{r}(k) \right)_z dk \quad (2.14)$$

Ovojno število lahko izrazimo tudi neposredno s pomočjo Hamiltonjana v recipročnem prostoru. Spomnimo se, da je naddiagonalna komponenta enaka $h(k) = d_x(k) - id_y(k)$. Če izračunamo kompleksen logaritem te komponente:

$$\ln h(k) = \ln(|h(k)|) + i \arg h(k) = \ln(d_x^2(k) + d_y^2(k)) + i \arctan(d_y(k)/d_x(k)), \quad (2.15)$$

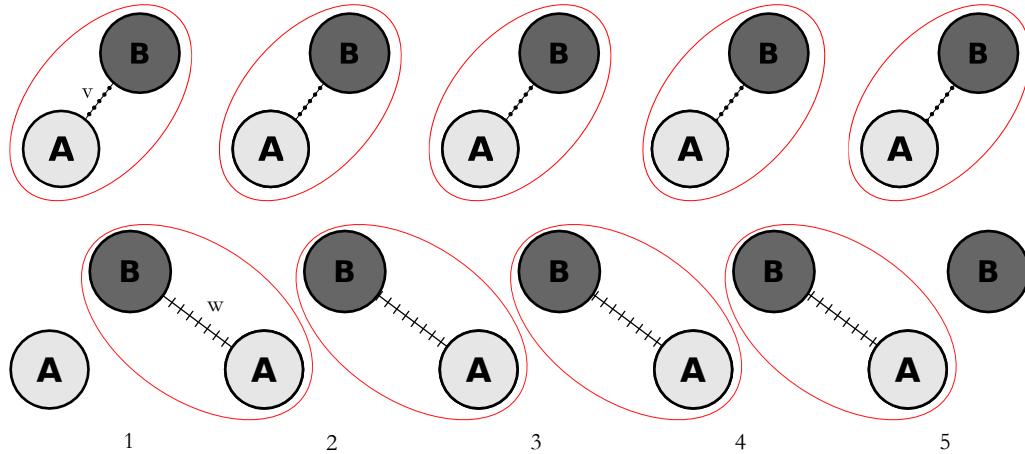
opazimo, da lahko zgornjo formulo za ovojno število napišemo tudi kot:

$$\nu = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d \ln h(k)}{dk} dk. \quad (2.16)$$

2.1.2 Robna stanja

V prejšnjem poglavju smo raziskali fiziko v notranjosti materiala, zdaj pa se osredotočimo na robna stanja.

Začnimo s preprostim primerom. Za trenutek obravnavajmo spet verigo brez robnih pogojev in poglejmo dva skrajna primera - tako imenovani popolnoma dimerizirani limiti, kjer enega od sklopitvenih parametrov v ali w postavimo na nič. Posledično veriga razпадne na nepovezane komponente, imenovane "dimeri", kot je vidno na Sliki 2.3.



Slika 2.3: različni popolnoma dimerizirani limiti SSH verige. Zgornja slika prikazuje primer, ko je $w = 0$, spodnja pa, ko je $v = 0$. Dimeri, ki nastanejo so obkroženi z rdečo črto. V primeru, ko velja $w = 0$, je vsako mesto del nekega dimera, medtem ko na spodnji sliki dobro vidimo mesti, ki nista del dimerov in ustrezata robnim stanjem.

V prvem primeru imamo $w = 0, v > 0$, kar ustreza trivialni fazi ($\nu = 0$). N lastnih stanj in njihove energije so:

$$\hat{H}(|m, A\rangle \pm |m, B\rangle) = \pm v(|m, A\rangle \pm |m, B\rangle). \quad (2.17)$$

Stanja elektronov so lokalizirana na posameznih dimerih, ki sovpadajo z osnovnimi celicami. V drugem primeru imamo $v = 0, w > 0$, kar ustreza topološki fazi ($\nu = 1$):

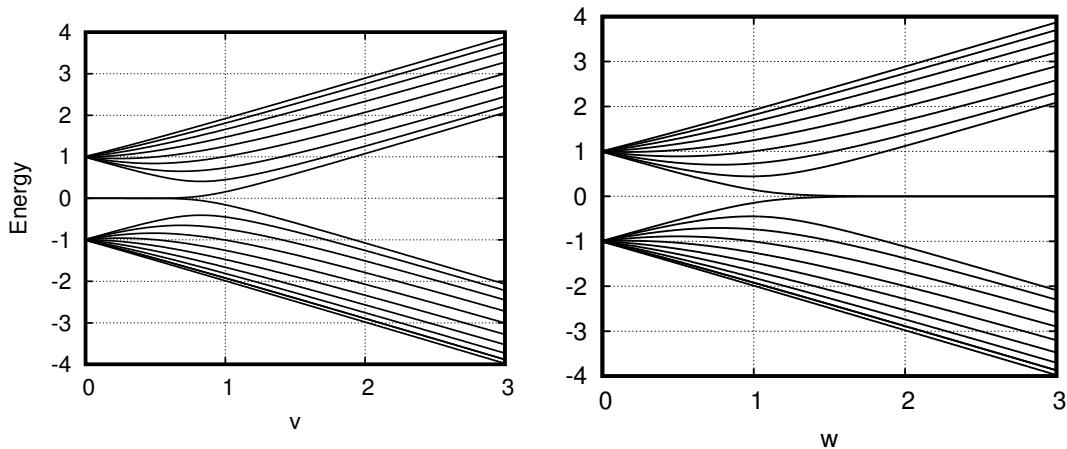
$$\hat{H}(|m, B\rangle \pm |m + 1, A\rangle) = \pm w(|m, B\rangle \pm |m + 1, A\rangle). \quad (2.18)$$

Spet je elektron lokaliziran na dimerih, ki pa zdaj ne sovpadajo več z osnovnimi celicami, ampak vsebujejo mesti s sosednjih osnovnih celic. V obeh primerih je energija enaka $\pm v$ ali $\pm w$, torej so energijski pasovi ravni, kar pomeni, da je grupna hitrost elektronov nič [6], kar je smiselno, saj smo pravkar videli, da so ti lokalizirani.

V trivialni fazi nam da zgornja formula vseh N stanj. Po drugi strani pa da za topološko fazo zgornja formula le $N - 2$ stanj. Kot lahko vidimo na Sliki 2.3, sta v topološki fazi prisotni izolirani mesti na robu. Izkaže se, da sta ti tudi lastni stanji z energijo nič:

$$\hat{H}|1, A\rangle = \hat{H}|N/2, B\rangle = 0 \quad (2.19)$$

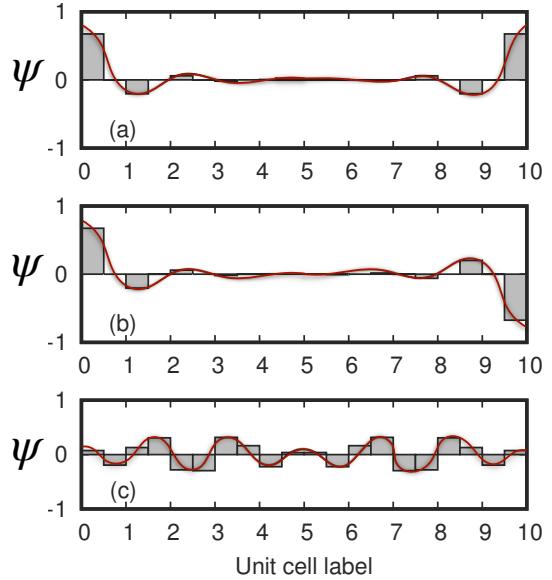
Ti stanji sta robni stanji.



Slika 2.4: lastne energije v SSH modelu v odvisnosti od sklopitvenih parametrov. Na levi je $w = 1$ fiksen in spremojmo v , medtem ko je na desni $v = 1$ fiksen in spremojmo w . Na obeh grafih opazimo robna stanja v energijski reži translacijsko invariantnega Hamiltonjana v topološki fazi. Vir Slike: [9]

V splošnem primeru definiramo robna stanja kot stanja, ki so lokalizirana. Ta definicija je smiselna, saj so stanja, ki ustrezajo notranjosti - lastna stanja TIS Hamiltonjana - delokalizirana (Blochovi valovi). Poleg tega lahko prepoznamo dano stanje kot robno stanje, če ima energijo v energijski reži TIS Hamiltonjana, saj v tem primeru spet vemo, da to stanje posledično ni del fizike v notranjosti in mora torej ustrezati fiziki na robu. Zdaj pa poglejmo, kaj se zgodi s temi stanji, ko se oddaljimo od popolnoma dimerizirane limite. Slika 2.4 kaže energijske nivoje sistema, ko spremojmo enega izmed sklopitvenih parametrov. Opazimo, da imamo robna stanja - stanja z energijo v energijski reži TIS Hamiltonjana - ves čas prisotna, dokler smo v topološki fazi (Na grafu se sicer to ne zgodi točno na prehodu med fazama, kar je posledica numerike, saj je zgornji graf narejen na verigi z zgolj desetimi osnovnimi celicami). To je preprost primer tako imenovane notranjost-rob korespondence [10], ki je ena izmed karakterističnih lastnosti topoloških izolatorjev in pravi, da je topološka invarianca v notranjosti - v našem primeru ovojno število ν - povezana s številom robnih stanj. $\nu = 0$ ustreza nič robnim stanjem, medtem ko $\nu = 1$ dvema robnima stanjema - eno je na vsakem robu verige. Na Sliki 2.5 je prikazanih nekaj lastnih stanj končne verige.

Zgornja grafa prikazujeta stanji z energijo nič. Vidimo, da sta ti res lokalizirani na robu, opazimo pa tudi nekaj novega: vsako ima neničelno vrednost na samo eni izmed podmrež A ali B na vsaki strani. Na spodnjem grafu je prikazano stanje z neničelno energijo, ki pa je delokalizirano. Za razliko od robnih stanj je enakomerno razporejeno po obeh podmrežah skozi verigo. Tudi to je splošnejsa lastnost, ki jo bomo podrobnejše obravnavali v naslednjem poglavju.



Slika 2.5: lastna stanja SSH modela. Vir Slike: [9]

2.2 Posplošitev

2.2.1 Kiralna simetrija

V tem poglavju bomo nekatere prej omenjene lastnosti SSH modela posplošili na širši razred fizikalnih sistemov. V kvantni mehaniki se pogosto srečujemo s primeri, ko poseduje Hamiltonjan določene simetrije. Rečemo, da unitarni operator \hat{U} predstavlja simetrijo Hamiltonjana \hat{H} , če \hat{U} komutira z \hat{H} [11], oziroma če velja:

$$\hat{U}\hat{H}\hat{U}^\dagger = \hat{H}. \quad (2.20)$$

Lastnost, s katero se bomo ukvarjali v tem poglavju, je tako imenovana kiralna simetrija, ki je definirana nekoliko drugače. Operator $\hat{\Gamma}$ predstavlja kiralno simetrijo Hamiltonjana \hat{H} , če velja naslednje [8]:

- $\hat{\Gamma}$ je unitaren in tudi hermitski operator in

$$\hat{\Gamma}\hat{H}\hat{\Gamma} = -\hat{H} \quad (2.21)$$

- $\hat{\Gamma}$ je lokalen operator. Kot v SSH modelu, privzamemo, da lahko naš sistem opišemo z Bravaisovo rešetko. Lokalnost pomeni, da so matrični elementi operatorja $\hat{\Gamma}$ med stanji, ki ustrezajo različnim osnovnim celicam ničelnii $\langle m, \alpha | \hat{\Gamma} | m', \alpha' \rangle = 0, m \neq m'$. Temu pogoju bo zadoščeno, če lahko napišemo operator $\hat{\Gamma}$ kot direktno vsoto unitarnih in hermitskih operatorjev $\hat{\gamma}$, ki delujejo na posamezno osnovno celico.

$$\hat{\Gamma} = \bigoplus_{m=1}^{N/2} \hat{\gamma} \quad (2.22)$$

- Zadnji pogoj je robustnost kiralne simetrije. Naš Hamiltonjan je lahko odvisen od več parametrov, ki jih bomo zapakirali v en sam vektor ξ . Robustnost pomeni, da:

$$\forall \xi : \hat{\Gamma} \hat{H}(\xi) \hat{\Gamma} = -\hat{H}(\xi). \quad (2.23)$$

Prvi pogoj kiralne simetrije mora torej veljati za vsako izbiro teh parametrov, pri čemer je operator kiralne simetrije $\hat{\Gamma}$ od njih neodvisen. V primeru SSH modela bi ξ vseboval vseh N skloplitvenih parameterov v_m in w_m , kjer gre $m = 1, 2, \dots, N/2$. Do sedaj smo preprosto nastavili $v_m = v, w_m = w$, vendar moramo, da lahko govorimo o kiralni simetriji, dovoliti, da so ti parametri odvisni od kraja, saj lahko s tem preverimo, če je zgornji pogoj izpolnjen in lastnosti robustnosti zadoščeno.

Sedaj, ko smo kiralno simetrijo definirali, si poglejmo nekatere izmed njenih posledic.

Posledice

Najprej si oglejmo kiralno simetrijo iz drugega zornega kota, ki ima bolj izrazito fizikalno interpretacijo. Ko imamo operator kiralne simetrije $\hat{\Gamma}$, lahko definiramo operatorje:

$$\hat{P}_A = \frac{1}{2}(\hat{\mathbb{I}} + \hat{\Gamma}), \quad \hat{P}_B = \frac{1}{2}(\hat{\mathbb{I}} - \hat{\Gamma}). \quad (2.24)$$

Ti operatorji zadoščajo $\hat{P}_A + \hat{P}_B = \hat{\mathbb{I}}$, $\hat{P}_A \hat{P}_B = 0$, $\hat{P}_{A,B}^2 = \hat{P}_{A,B}$. Torej so operatorji $\hat{P}_{A,B}$ ortogonalni projektorji na različna podprostora A in B , ki tvorita particijo celotnega prostora stanj. Z njihovo pomočjo lahko prepišemo $\hat{\Gamma} \hat{H} \hat{\Gamma} = -\hat{H}$ kot

$$\hat{P}_A \hat{H} \hat{P}_A = \hat{P}_B \hat{H} \hat{P}_B = 0 \quad (2.25)$$

ozziroma

$$\hat{H} = (\hat{P}_A + \hat{P}_B) \hat{H} (\hat{P}_A + \hat{P}_B) = \hat{P}_A \hat{H} \hat{P}_B + \hat{P}_B \hat{H} \hat{P}_A, \quad (2.26)$$

kar pomeni, da lahko ekvivalentno na kiralno simetrijo gledamo kot dejstvo, da dovoli Hamiltonjan le prehode iz nekega podprostora (A/B) v drugega (B/A) , kjer ta podprostora A and B skupaj tvorita prostor vseh stanj.

Naslednja posledica, s katero smo se že srečali v SSH modelu je, da je spekter sistema s kiralno simetrijo simetričen: če imamo lastno stanje z energijo E , imamo tudi lastno stanje z energijo $-E$. To sledi iz:

$$\hat{H}|\Psi_n\rangle = E_n|\Psi_n\rangle \Rightarrow \hat{H}\hat{\Gamma}|\Psi_n\rangle = -\hat{\Gamma}\hat{H}|\Psi_n\rangle = -\hat{\Gamma}E_n|\Psi_n\rangle = -E_n\hat{\Gamma}|\Psi_n\rangle, \quad (2.27)$$

kjer smo uporabili osnovne lastnosti operatorja $\hat{\Gamma}$.

Posledica simetričnosti spektra je, da je delež stanja z neničelno energijo, ki živi na podprostoru A , enak deležu na podprostoru B : če imamo lastno stanje $|\Psi\rangle$ z energijo $E \neq 0$, je stanje $\hat{\Gamma}|\Psi\rangle$ tudi lastno stanje Hamiltonjana z različno energijo $-E$. Ti stanji sta ortogonalni, saj sta lastni stanji hermitskega operatorja (Hamiltonjana) z različno lastno vrednostjo (energijo). Torej velja naslednje:

$$0 = \langle \Psi | \hat{\Gamma} \Psi \rangle = \langle \Psi | \hat{P}_A | \Psi \rangle - \langle \Psi | \hat{P}_B | \Psi \rangle, \quad (2.28)$$

kar pomeni, da so stanja z $E \neq 0$ enako močno zastopana na obeh podprostорih - A in B .

Poglejmo še stanja z $E = 0$. Ta stanja lahko izberemo takšna, da so neničelna na le enem izmed podprostorov A in B , saj:

$$\hat{H}|\Psi_n\rangle = 0 \Rightarrow \hat{H}\hat{P}_{A,B}|\Psi_n\rangle = \hat{H}(|\Psi_n\rangle \pm \hat{\Gamma}|\Psi_n\rangle) = 0. \quad (2.29)$$

Kiralna simetrija v SSH modelu

Sedaj, potem ko smo izpeljali nekaj lastnosti sistemov s kiralno simetrijo, se vrnimo k SSH modelu. Izkaže se, da je direktna vsota operatorjev $\hat{\gamma} = \hat{\sigma}_z$ operator kiralne simetrije SSH Hamiltonjana. Ta operator deluje kot identiteta na vseh stanjih na podmreži A , medtem ko pomnoži stanja na podmreži B z -1 . Projektorja $\hat{P}_{A,B}$ se izražata kot:

$$\hat{P}_A = \sum_{m=1}^{\frac{N}{2}} |m, A\rangle\langle m, A| \quad \hat{P}_B = \sum_{m=1}^{\frac{N}{2}} |m, B\rangle\langle m, B|. \quad (2.30)$$

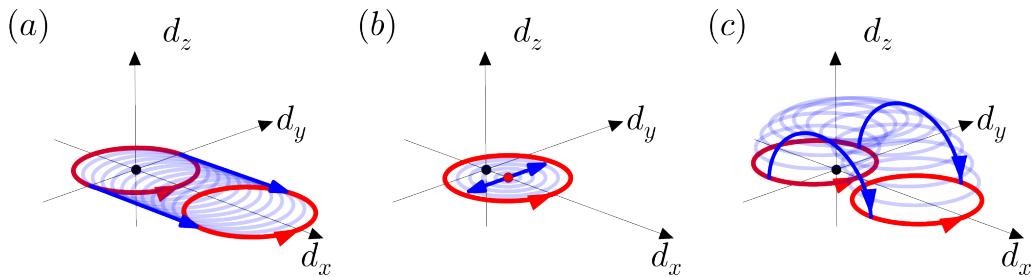
Podprostora A in B torej v SSH modelu ustreza kar podmrežama A in B . Prej omenjena posledica kiralne simetrije, ki pravi, da dovoli Hamiltonjan le prehode iz ene podmreže v drugo, je očitna že iz strukture SSH Hamiltonjana, saj vsebuje ta le člene tipa $|m, B\rangle\langle m', A|$ in njihove hermitske konjugiranke. To drži tudi, če so sklopitveni parametri odvisni od kraja, kar pomeni, da ima operator $\hat{\Gamma}$ potrebno lastnost robustnosti. Omenimo še povezavo med kiralno simetrijo SSH Hamiltonjana in prej vpeljanim ovojnim številom ν . Relacija, ki definira kiralno simetrijo, se glasi:

$$\hat{\sigma}_z \hat{H}(k) \hat{\sigma}_z = -\hat{H}(k). \quad (2.31)$$

Če Hamiltonjan v recipročnem prostoru spet zapišemo kot linearno kombinacijo Paulijevih matrik in identitet, vidimo, da zgornje zahteva:

$$d_z(k) = 0, \quad (2.32)$$

kar pomeni, da sledi iz dejstva, da poseduje naš sistem kiralno simetrijo s simetrijskim operatorjem $\hat{\sigma}_z$ to, da opiše vektor $\mathbf{d}(k)$ zanko v dvodimenzionalni (d_x, d_y) ravnini. Formalno je ovojno število okoli izhodišča v \mathbb{R}^n element fundamentalne grupe prostora $\mathbb{R}^n \setminus \{0\}$, ki jo označimo z $\pi_1(\mathbb{R}^n \setminus \{0\})$. Fundamentalen rezultat iz teorije homotopij [7] pravi, da velja $\pi_1(\mathbb{R}^n \setminus \{0\}) = \{0\}$ za $n > 2$ in $\pi_1(\mathbb{R}^2 \setminus \{0\}) = \mathbb{Z}$. V tridimenzionalnem prostoru imajo torej vse zanke vedno enako ovojno število (in sicer 0), medtem ko imamo v ravnini lahko v principu kakršnokoli celoštevilsko ovojno število. Kiralna simetrija je torej tukaj potrebna, da se sploh lahko začnemo pogovarjati o možnosti različnih faz, katerih ureditveni parameter je ovojno število.



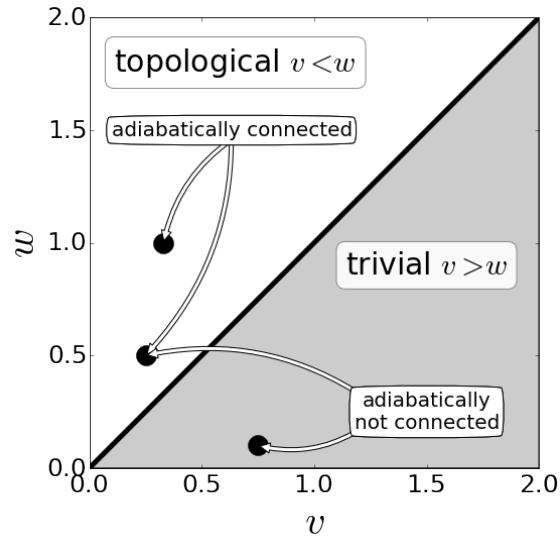
Slika 2.6: trije različni načini za spremembo ovojnega števila z zveznimi transformacijami v SSH modelu. Prva primera zapreta energijsko režo TIS Hamiltonjana s translacijo oziroma deformacijo zanke, medtem ko tretji primer krši kiralno simetrijo. Vir Slike: [8]

Sedaj smo končno na točki, kjer lahko konkretno povemo, kdaj sta dva Hamiltonjana v isti topološki fazi. Kot je vidno na Sliki 2.6, lahko v SSH modelu spremenimo

ovojno število z zveznimi transformacijami tako, da povlečemo zanko skozi izhodišče (in s tem vmes zapremo energijsko režo TIS Hamiltonjana) ali pa s premikom zanke skozi tretjo dimenzijo d_z (in s tem zlomitvijo kiralne simetrije). Na podlagi tega definiramo adiabatsko deformacijo Hamiltonjanov. Rečemo, da predstavlja neka transformacija Hamiltonjana adiabatsko deformacijo, če [8]:

- Se njegovi parametri spreminjajo zvezno.
- Se relevantne simetrie sistema ves čas ohranljajo.
- Ostane TIS energijska reža okoli $E = 0$ odprta.

Rečemo, da sta dva Hamiltonjana adiabatsko ekvivalentna (ozioroma adiabatsko povezana), če obstaja med njima adiabatska deformacija. Celemu številu, ki karakterizira adiabatsko ekvivalentne Hamiltonjane, rečemo topološka invarianta. V SSH modelu je to preprosto ovojno število okoli izhodišča ν in adiabatsko ekvivalentni Hamiltonjani so tisti z istim ν . Relevantna simetria je tu kiralna simetria. Kot prej video, lahko ν zavzame eno izmed dveh vrednosti, kar pomeni, da imamo samo dva tipa Hamiltonjanov do adiabatske ekvivalence natančno. Pripadajoč fazni diagram je vi den na Sliki 2.7.



Slika 2.7: fazni diagram SSH modela, kjer je vsaka faza karakterizirana s topološko invariantom ν . Vir Slike: [8]

Poglavlje 3

Sistemi z neredom

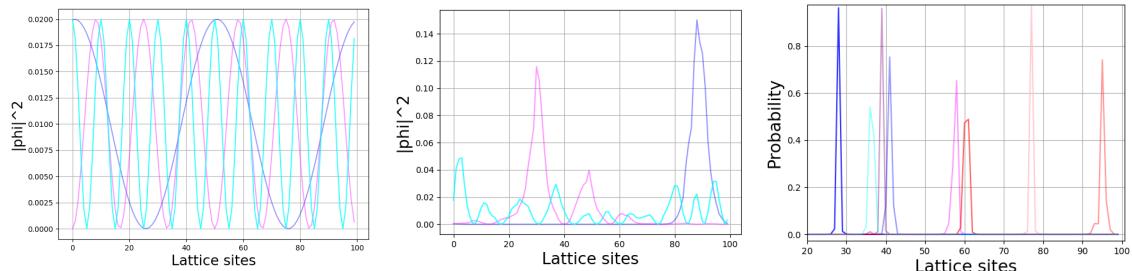
V nadaljevanju se bomo ukvarjali z modeli z neredom. To pomeni, da parametri modela ne bodo deterministično določeni, ampak bodo neke naključne spremenljivke, porazdeljene po vnaprej določeni porazdelitvi. V modelih z naključnim potencialom na mestih v rešetki se pod določenimi pogoji lastna stanja, ki so sicer delokalizirana, lokalizirajo. Ta pojav imenujemo Andersonova lokalizacija. Najprej si oglejmo tipičen primer Andersonove lokalizacije na modelu tesne vezi:

$$\hat{H} = \sum_n \epsilon_n \hat{c}_n^\dagger \hat{c}_n + g (\hat{c}_{n+1}^\dagger \hat{c}_n + \hat{c}_n^\dagger \hat{c}_{n+1}). \quad (3.1)$$

Tu so ϵ_n naključno porazdeljeni po enakomerni porazdelitvi na intervalu $[-0.5W, 0.5W]$ za neko jakost nereda W , \hat{c}_n pa so fermionski operatorji, ki anihilirajo elektron na n -tem mestu verige.

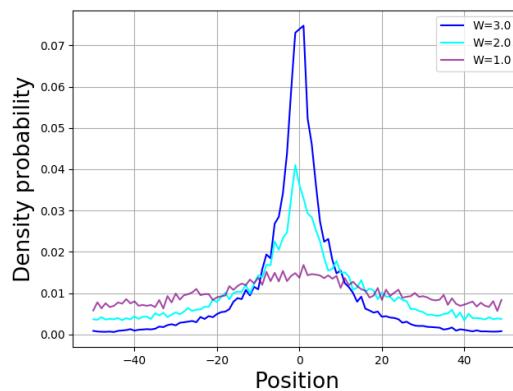
V limiti $W \rightarrow 0$ potencialov na mestih sploh ni in rešitev modela tesne vezi je znana. Lastne funkcije so Blochovi valovi in so torej popolnoma delokalizirane. V drugi limiti $W \rightarrow \infty$ pa v Hamiltonjanu člen s potenciali prevlada in lahko sklopitve med različnimi mesti povsem zanemarimo. Hamiltonjan postane diagonalen in lastna stanja imajo neničelno vrednost le na nekem i -tem mestu z energijo ϵ_i in so torej lokalizirana. V splošnem velja, da za dovolj veliko jakost nereda vedno pridemo v režim, v katerem so lastna stanja lokalizirana [12].

Andersonovo lokalizacijo lahko v praksi vidimo na Sliki 3.1, kjer je prikazanih nekaj lastnih stanj zgornjega modela za več vrednosti jakosti nereda W . Vidimo, da imamo že pri $W = 0.5$ lokalizacijo, ki pa je z večanjem jakosti nereda čedalje močnejša.



Slika 3.1: lastna stanja modela tesne vezi za več jakosti nereda. Leva slika ustreza $W = 0$, srednja $W = 0.5$, desna pa $W = 2$. V vseh primerih je dolžina verige $N = 100$ in sklopitev med mesti $g = -1$. Vir Slike: [12]

Zanimiva lastnost Andersonove lokalizacije, ki bo za naše delo relevantna, je, da se v dovolj nizko dimenzionalnih rešetkah lokalizacija pojavi že pri poljubno majhni jakosti nereda (če je ta seveda prisoten). Tu bom predstavil intuitiven razlog za to lokalizacijo v eni dimenzijski, konkretnježno izpeljavo pa lahko bralec najde v [12]. Mislimo si, da začnemo s stanjem elektrona, ki je lokalizirano na nekem točno določenem mestu. To stanje časovno razvijemo in gledamo, kako se pri tem verjetnost, da se nahajamo na začetnem mestu, spreminja. Če bo stanje delokalizirano, se bo ta verjetnost manjšala, saj se bo valovna funkcija razširila preko celotne rešetke. Če pa bo lokalizirano, ta verjetnost ne bo padala. To lahko vidimo na Sliki 3.2, kjer je začetno stanje Diracova delta funkcija na mestu 0, tekom časovnega razvoja pa se pri večjem neredu ta vedno hitreje in bolj razleže. Posledično je njen vrh v izhodišču nižji, zaradi česar je verjetnost, da najdemo elektron na začetnem mestu, manjša.



Slika 3.2: delta funkcija v izhodišču, časovno razvita s Hamiltonjanom tesne vezi do $t = 100$ za več vrednosti jakosti nereda W . Vir Slike: [12]

Vprašanje o lokalizaciji stanj smo s tem prevedli na iskanje verjetnosti za vrnitev elektrona na začetno mesto. To količino je možno izračunati v klasično analognem modelu naključnega sprehoda. Opravka imamo torej s sprehodom po neskončni verigi, kjer je verjetnost za skok na eno izmed sosednjih mest $\frac{1}{2}$. Verjetnost za vrnitev na začetno mesto ρ lahko povežemo s pričakovanim številom vrnitev $\langle X \rangle$ na začetno mesto na naslednji način: če označimo z ρ_k verjetnost, da se vrnemo točno k -krat, potem velja:

$$\rho_k = \rho^k (1 - \rho) \quad (3.2)$$

in

$$\langle X \rangle = \sum_{k=0}^{\infty} k \rho_k = \frac{\rho}{1 - \rho}. \quad (3.3)$$

Zadnja enačba pomeni, da $\langle X \rangle = \infty$ ustrezha $\rho = 1$. Če hočemo pokazati, da se zagotovo vrnemo na začetno mesto, je torej dovolj pokazati, da je pričakovano število vrnitev neskončno. Vemo, da je verjetnost, da smo v n korakih za k desno od začetnega položaja, enaka:

$$p(k, n) = \binom{n}{k} \frac{1}{2^n}. \quad (3.4)$$

Faktor $\frac{1}{2^n}$ je verjetnost, da se je zgodil nek točno določen naključni sprehod. Naključnih sprehodov, kjer po n korakih končamo pri koordinati k , pa je $\binom{n}{k}$. Verjetnost,

da se v $2n$ korakih vrnemo v izhodišče, je potem

$$P(x_{2n} = 0) = \frac{1}{2^{2n}} \binom{2n}{n} \asymp \frac{1}{\sqrt{\pi n}}, \quad (3.5)$$

kjer smo privzeli, da je n velik in uporabili asymptotsko formulo za binomski koeficient [13]. Definirajmo naključno spremenljivko X_n kot 1, če je $x_n = 0$ in 0 sicer. Pričakovano število vrnitev na začetno mesto je:

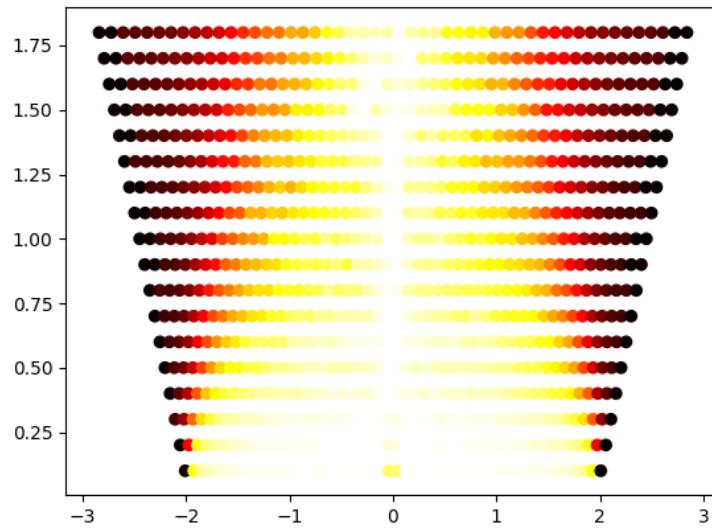
$$\langle X \rangle = \sum_{i=1}^{\infty} \langle X_i \rangle = \sum_{i=1}^{\infty} P(x_{2i} = 0) \asymp \sum_{i=1}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{i}} = \infty. \quad (3.6)$$

Sledi torej, da se naključni sprehod v eni dimenziji res z verjetnostjo 1 vrne v izhodišče. Po naši analogiji to fizikalno pomeni, da so elektronska stanja v sistemu z neredom v eni dimenziji lokalizirana. Izkaže se, da je verjetnost za vrnitev enaka ena tudi v simetričnih naključnih sprehodih v dveh dimenzijah, za višje dimenzije pa to ni več res [14]. V fizikalnem kontekstu to pomeni, da je lokalizacija prisotna že pri poljubno majhnem neredu, če je dimenzija rešetke manjša od tri.

Stopnjo lokalizacije lahko ocenimo tudi brez risanja lastnih stanj s pomočjo kolичine, znane kot IPR - inverse participation ratio. Definirana je na naslednji način:

$$\text{IPR} = \frac{1}{\sum_i |\Psi_i|^4}. \quad (3.7)$$

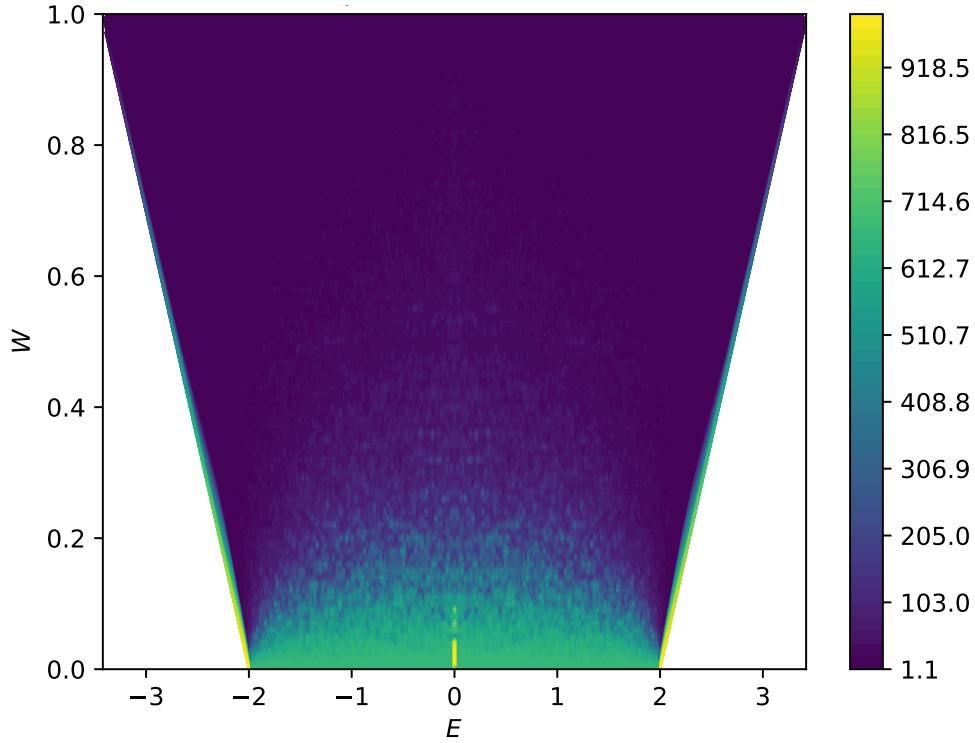
V primeru Blochovih valov velja $|\psi_i|^2 = 1/N$ in torej $\text{IPR} = N$. Če pa je stanje neničelno na le enem mestu, velja $\text{IPR} = 1$. Manjši IPR torej ustreza močnejši lokalizaciji. Na Sliki 3.3 lahko vidimo, da z višanjem jakosti nereda IPR res pada, ko se stanja močneje lokalizirajo.



Slika 3.3: na sliki je prikazan IPR za model tesne vezi z neredom na mestih. Na x osi je energija E , na y osi pa jakost nereda W . Z barvo je označen IPR, kjer bela barva ustreza visokemu IPR, črna pa nizkemu. Vir Slike: [12]

Slika 3.3 prikazuje Andersonovo lokalizacijo, ko imamo nered na posameznih mestih v rešetki. Izkaže se, da se lokalizacija zgodi tudi, če damo nered na sklopite

med mesti. To je razvidno iz Slike 3.4, ki je narisana za model, kjer smo potenciale na mestih ϵ postavili na nič, medtem ko so sklopite g naključne spremenljivke na intervalu $[1 - W, 1 + W]$. Spet vidimo, da se IPR in s tem delokalizacija z jakostjo nereda manjšajo.



Slika 3.4: IPR za primer, ko je nered v sklopitvah. Na x osi je energija stanj, na y pa moč nereda W . Z barvo je označen IPR. Graf je pridobljen iz verige z dolžino 1000 mest.

V nadaljevanju bomo obravnavali izključno primere, ko imamo nered na sklopitvah brez potencialov na posameznih mestih. Poglejmo si teorijo takšnih sistemov podrobneje. Obravnavamo Hamiltonjan:

$$\hat{H} = \sum_i g_i \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_{i+1} + \text{h. c.}, \quad (3.8)$$

kjer so sklopite g_i neodvisne, enako porazdeljene naključne spremenljivke. Pokazali bomo, da v tem primeru gostota stanj v okolini energije $E = 0$ divergira kot:

$$g(E) \propto \frac{1}{E \log^3 E} \quad (3.9)$$

Schrödingerjeva enačba za zgornji Hamiltonjan se glasi

$$a_{i-1}g_{i-1} + a_{i+1}g_i = Ec_i, \quad (3.10)$$

kjer je a_i koeficient v razvoju lastnega stanja pred vektorjem, lokaliziranim na mestu i . Vpeljimo količino $\Delta_i = a_{i-1}g_{i-1}/a_i$, ki po Schrödingerjevi enačbi zadošča $\Delta_{i+1} = g_i^2/(E - \Delta_i)$. Izkaže se [15], da je število stanj do energije E enako deležu pozitivnih Δ_i . Iz rekurzivne formule za Δ_i vidimo, da pri $E = 0$ ti po predznaku alternirajo, kar

pomeni, da velja $N(0) = 0.5$. Poglejmo si pozitivne Δ_i . Brez izgube splošnosti lahko rečemo, da bodo ti sodi Δ_{2i} . Iz rekurzivne zveze sledi $\Delta_{2i} = (g_{2i-1}/g_{2i-2})^2 \Delta_{2i-2}$. Če definiramo $u_{2i} = \ln \Delta_{2i}$, se ta zveza prevede v $u_{2i} = \ln(g_{2i-1}/g_{2i-2})^2 + u_{2i-2}$. u_{2i} ustrezajo naključnem sprehodu v eni dimenziji, saj velja:

$$\langle u_{2i} - u_{2i-2} \rangle = \langle \ln(g_{2i-1}/g_{2i-2})^2 \rangle = 2\langle \ln g \rangle - 2\langle \ln g \rangle = 0 \quad (3.11)$$

$$\langle (u_{2i} - u_{2i-2})^2 \rangle = \langle (\ln(g_{2i-1}/g_{2i-2})^2)^2 \rangle = 2\langle (\ln g^2)^2 \rangle - 2\langle \ln g^2 \rangle^2 = 2\sigma^2 \quad (3.12)$$

Vemo, da naključni sprehodi ustrezajo difuzijskim procesom [16], kjer za difuzijsko konstanto D velja zveza $\sigma^2(t) = 2Dt$. V zgornji enačbi ima indeks i vlogo časa, torej imamo $D = \sigma^2/2$. Označimo z $\phi(n, u)$ verjetnostno gostoto za u_n , ki mora zadoščati difuzijski enačbi:

$$2 \frac{\partial \phi(n, u)}{\partial n} = \sigma^2 \frac{\partial^2 \phi(n, u)}{\partial u^2} \quad (3.13)$$

Poglejmo si še primer, ko energija E ni nič, vendar vseeno zelo majhna. Zaradi kiralne simetrije, se lahko omejimo na primer, ko velja $E > 0$. Rekurzivna enačba za sode člene Δ_{2i} pri neničelnem energiji je

$$\Delta_{2i} = \left(\frac{g_{2i-1}}{g_{2i-2}} \right)^2 \Delta_{2i-2} \frac{1 - E/\Delta_{2i-2}}{1 + (E\Delta_{2i-2} - E^2)/g_{2i-2}^2} \quad (3.14)$$

V primeru, ko velja $E \ll \Delta_{2i-2} \ll g_{2i-2}^2/E$, so popravki k primeru $E = 0$ zanemarljivi. Prej definirana spremenljivka u torej opravlja naključni sprehod, dokler velja $\ln E \ll u \ll \ln(g^2/E)$, kjer je g tu neka tipična vrednost sklopitve g_i , za katero se bo izkazalo, da ni pomembna. Ker imamo torej tudi pri neničelnem E naključni sprehod, lahko tudi ta primer opišemo s prejšnjo difuzijsko enačbo. Poglejmo, kaj se zgodi z u , ko se približujemo zgornji in spodnji meji $\ln E$ in $\ln(g^2/E)$, kar nam bo dalo robne pogoje za našo difuzijsko enačbo. Pri zgornji meji $\Delta_{2i-2} \sim g^2/E$, imenovalec naraste, kar spet zmanjša Δ_{2i} . Za naš naključni sprehod u to pomeni, da imamo odbijajočo bariero pri $u_{\max} = \ln(g^2/E)$. Pri spodnji meji, ko $\Delta_{2i-2} \sim E$ členi Δ_{2i} padajo, ko so enkrat pod E , pa se zgodi, da velja $\Delta_{2i+1} = g_{2i}/(E - \Delta_{2i}) > 0$. Eden izmed lihih členov, ki so do sedaj bili negativni torej spremeni predznak. Od tu naprej se zgodba ponavalja, členi spet zmanjšajo po predznaku, vendar so zdaj lihi tisti, ki so pozitivni, sodi pa negativni. Zdaj imamo torej naslednjo sliko razvoja členov Δ_i : Začnemo pri vrednosti g^2/E (ZAKAJ TU ZAČNEMO), nekaj časa padamo (ker smo na začetku pri odbijajoči barieri) in se začnemo naključno sprehajati. Ko enkrat pridemo približno na vrednost E , se absorbiramo. Po tem se cikel ponovi, le da se vloge lihih in sodih zamenjajo. Lahko vidimo, da potrebujemo dva cikla, da se eden izmed negativnih členov v alternirajoči vrsti pri $E = 0$ spremeni v pozitivnega. ZAKAJ DVA A SE NE PO ENEM? Torej če rečemo, da je \bar{n} povprečno število potrebnih mest, preko katerih se konča en cikel, imamo naslednjeno relacijo za število stanj pod E :

$$N(E) - N(0) = N(E) - 0.5 = 1/(2n) \quad (3.15)$$

Število \bar{n} lahko dobimo na naslednji način. Difuzijsko enačbo za ϕ opremimo z robnimi pogoji, katere smo izpeljali (bariera pri u_{\max} in absorbcija pri u_{\min})

$$\frac{\partial \phi}{\partial u} \Big|_{u=u_{\max}} = 0 \quad (3.16)$$

$$\phi \Big|_{u=u_{\min}} = 0 \quad (3.17)$$

Poglavlje 3. Sistemi z neredom

Z začetnim pogojem $\phi(u, 0) = \delta(u - u_{\max} - \epsilon)$. Ko difuzijsko enačbo rešimo (na primer s seperacijo spremenljivk), lahko izračunamo:

$$P(n) = \int_{u_{\min}}^{u_{\max}} \phi(u, n) du, \quad (3.18)$$

ki je verjetnost, da u ostane med u_{\min} in u_{\max} (torej se ne absorbira) po n korakih. Povprečno število ciklov je potem:

$$\bar{n} = \int_0^\infty n \left(-\frac{dP}{dn} \right) dn = \int_0^\infty P(n) dn, \quad (3.19)$$

kjer smo pri prvem enačaju uporabili definicijo pričakovane vrednosti v drugem pa integrirali per partes (robni členi so nič, saj seveda velja $P(\infty) = 0$). Rešitev je $n = \ln^2(g^2/E^2)/\sigma^2$ torej:

$$N(E) = 0.5(1 + \sigma^2/(\ln(g/E)^2)^2 \quad (3.20)$$

Kar pomeni, da je gostota stanj

$$g(E) = \frac{dN}{dE} = \frac{2\sigma^2}{E} \frac{1}{\ln^3(g/E)^2} = \frac{2\sigma^2}{E |\ln E^2|^3}, \quad (3.21)$$

kjer smo lahko g izpustili, saj predstavlja le (končno) aditivno konstantno divergirajočem imenovalcu.

Poglavlje 4

Model in metode dela

Kot rečeno, bomo v našem primeru dali v sklopite v verigi nered. Model, ki ga obravnavamo, je nekoliko modificiran SSH model in sicer obravnavamo naslednji Hamiltonjan:

$$\hat{H} = \sum_{n \in \mathbb{Z}} t_n \left(\frac{1}{2} \hat{c}_n^\dagger (\sigma_1 + i\sigma_2) \hat{c}_{n+1} + \text{h.c.} \right) + m_n \hat{c}_n^\dagger \sigma_2 \hat{c}_n. \quad (4.1)$$

Zaradi podobnosti z ostalimi deli na to temo [17] je notacija v tem razdelku drugačna kot v prej obdelanem SSH modelu, vendar lahko vseeno vidimo podobnosti: t_n tukaj ustreza sklopitvi med različnimi osnovnimi celicami (prej w), medtem ko sklopitvi v osnovni celici (prej v) ustreza $\pm im_n$. Ta model ni čisto enak kot SSH model, ker je ena izmed sklopitev imaginarna. Z c_n je označen vektor fermionskih operatorjev na obeh podmrežah, torej $\hat{c}_n = (\hat{c}_{n,A}, \hat{c}_{n,B})^T$. Model ima kiralno simetrijo [17], kjer je operator kiralne simetrije enak:

$$\hat{S} = \sum_{n \in \mathbb{Z}} \hat{c}_n^\dagger \sigma_3 \hat{c}_n. \quad (4.2)$$

Nered bomo realizirali s pomočjo dveh naključno porazdeljenih spremenljivk - ω_n in ω'_n . Ti sta neodvisni in porazdeljeni po enakomerni porazdelitvi v intervalu $[-0.5, 0.5]$:

$$\omega_n, \omega'_n \sim \mathcal{U}(-0.5, 0.5). \quad (4.3)$$

S temi naključnimi števili definiramo sklopite na naslednji način:

$$t_n = 1 + 0.5W\omega_n, \quad (4.4)$$

$$m_n = m + W\omega'_n. \quad (4.5)$$

Nered je torej centriran okoli vrednosti 1 oziroma m , njegovo jakost pa podaja število W . Če nered ni prisoten, imamo kot v SSH modelu na voljo dve topološki fazi, ki se ločita po ovojnem številu: $\nu = 1$, če $m \in (-1, 1)$ in $\nu = 0$ sicer.

Ureditveni parameter v prisotnosti nereda bo še vedno ovojno število, vendar je njen izračun tokrat nekoliko bolj zakompliciran. Spomnimo se, da smo imeli v čistem sistemu na voljo formulo:

$$\nu = \frac{1}{2\pi i} \int_0^{2\pi} \frac{\partial \log h(k)}{\partial k} dk = \frac{1}{2\pi i} \int_0^{2\pi} \frac{\partial h(k)}{\partial k} \frac{1}{h(k)} dk, \quad (4.6)$$

Poglavlje 4. Model in metode dela

kjer je $h(k)$ naddiagonalna komponenta Hamiltonjana v recipročnem prostoru. V prisotnosti nereda nimamo več translacijske invariance in torej tudi nimamo več Blochovega teorema / kristalnega valovnega vektorja. Očitno izraz za ovojno število v recipročnem prostoru ne bo dober, zato bomo zgornjo formulo zapisali v realnem prostoru. To storimo z naslednjima substitucijama:

$$\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} dk \rightarrow \frac{1}{N} \text{Tr}, \quad (4.7)$$

$$\frac{\partial}{\partial k} \rightarrow -i[\hat{X}, \cdot]. \quad (4.8)$$

Prva formula predstavlja le zapis sledi na enoto volumna v drugi bazi, MISLIM DA DRUGA FORMULA NAVSEZADNJE LE NI APLIKACIJA TISTE FORMULE IZ SIMETRIJ, KER TISTA VELJA ZA OPERATORJE, KI DELUJEJO KOT $A \rightarrow UAU^{-1}$, TUKAJ PA IMAMO SAMO ODVOD. drugo formulo pa lahko izpeljemo na naslednji način: Spomnimo se, da se v impulzni sliki operator kraja izraža kot $X = i\frac{\partial}{\partial k}$ (če postavimo $\hbar = 1$). Potem lahko takoj izračunamo: MOGOČE MANJKA REFERENCA ZA TA OPERATOR KRAJA, ALI TO NI POTREBNO?

$$-i[\hat{X}, f(k)]\psi(k) = \frac{\partial(f(k)\psi(k))}{\partial k} - f(k)\frac{\partial\psi(k)}{\partial k} = \frac{\partial f(k)}{\partial k}\psi(k), \quad (4.9)$$

s čimer smo pokazali želeno zvezo.

Pred spremembo baze smo imeli v integrandu izvendiagonalno komponento $h(k)$ Hamiltonjana v recipročnem prostoru. V realni bazi bo to sedaj večji izvendiagonalni blok Hamiltonjana. Lažje bo računati s homotopsko ekvivalentnim Hamiltonjanom (spomnimo se, da homotopije ohranjajo ovojno število) $\hat{Q} = \hat{P}_+ - \hat{P}_-$, kjer sta \hat{P}_\pm projektorja na pozitivni ozziroma negativni del spektra Hamiltonjana \hat{H} . Sedaj se spomnimo, da za operator kiralne simetrije \hat{S} velja $\hat{S}^\dagger = \hat{S}$ in $\hat{S}^2 = \hat{\mathbb{I}}$, kar pomeni, da so njegove lastne vrednosti enake ± 1 . Zato ga lahko zapišemo kot $\hat{S} = \hat{S}_+ - \hat{S}_-$, kjer so \hat{S}_\pm primerni sprektralni projektorji. Ker ima tudi Hamiltonjan \hat{Q} kiralno simetrijo, ga lahko zapišemo kot

$$\hat{Q} = \hat{S}_+ \hat{Q} \hat{S}_- + \hat{S}_- \hat{Q} \hat{S}_+ = \hat{Q}_{+-} + \hat{Q}_{-+}. \quad (4.10)$$

Izvendiagonalni blok Hamiltonjana je potem preprosto \hat{Q}_{+-} , njegov inverz pa $\hat{Q}_{+-}^{-1} = \hat{Q}_{-+}$. Sledi, da se formula za ovojno število glasi:

$$\nu = -\frac{1}{N} \text{Tr} \left(\hat{Q}_{-+} [\hat{X}, \hat{Q}_{-+}] \right). \quad (4.11)$$

Zgornja formula velja, če računamo ovojno število za končno verigo brez robnih pogojev. Če pa želimo izračunati ovojno število za sistem s periodičnimi robnimi pogoji, (kot jo bomo v nadaljevanju), se moramo v zgornji formuli rešiti operatorja \hat{X} , kajti pri sistemih s takimi robnimi pogoji je ta slabo definiran. V tem primeru izrazimo namesto substitucije $\partial_k \hat{Q}_{+-} \rightarrow -i[\hat{X}, \hat{Q}_{+-}]$ odvod po k s končnimi diferencami [18]:

$$\partial_k \hat{Q}_{+-}(k) = \sum_m c_m \hat{Q}_{+-}(k + m\Delta), \quad (4.12)$$

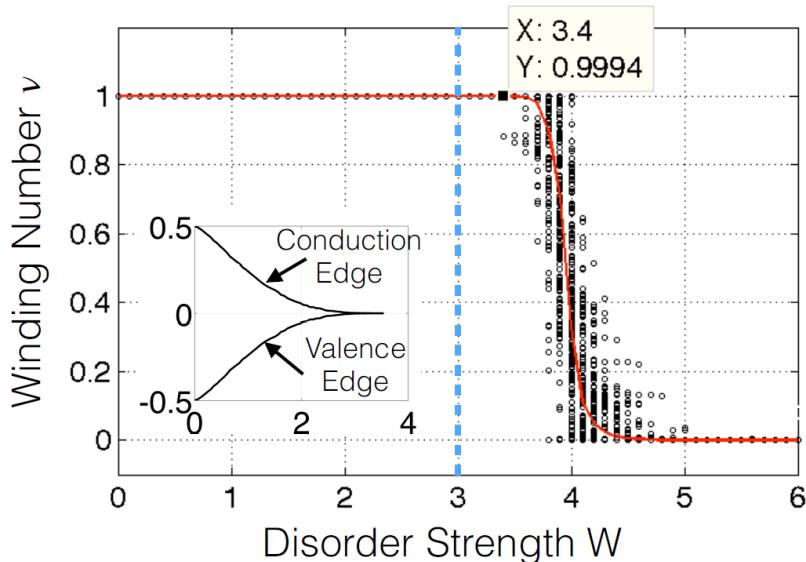
kjer je najmanjša možna diferenca valovnega vektorja enaka $\Delta = \frac{4\pi}{N}$, saj ima naš sistem $N/2$ osnovnih celic. Odvisnosti od k v operatorju \hat{Q}_{+-} se lahko znebimo s pomočjo operatorja $e^{ik\hat{x}}$, ki predstavlja translacijo za moment k :

$$\hat{Q}_{+-}(k + m\Delta) = e^{-im\Delta\hat{x}} \hat{Q}_{+-}(k) e^{im\Delta\hat{x}}. \quad (4.13)$$

Kot prej dobimo potem po prehodu v realni prostor formulo:

$$\nu = \frac{1}{N} \text{Tr} \left(\sum_m c_m \hat{Q}_{-+} e^{-im\Delta\hat{x}} \hat{Q}_{+-} e^{im\Delta\hat{x}} \right). \quad (4.14)$$

V zgornji formulni več težav z operatorjem \hat{X} , saj kompleksen eksponent poskrbi za periodičnost. Iz formule za ovojno število brez periodičnih robnih pogojev je razvidno, da je v limiti močnega nereda $W \rightarrow \infty$ ovojno število enako nič, saj v tem primeru vezi v osnovni celici dominirajo in je komutator v formuli enak nič (X označuje indeks osnovnih celic, ki so v tej limiti med sabo nesklopljene), medtem ko imamo po drugi strani pri $W = 0$ in $m \in (-1, 1)$ ovojno število enako ena. Ugotovili smo torej, da lahko med topološkimi fazami prehajamo tudi izključno z večanjem jakosti nereda. Tak prehod je prikazan na Sliki 4.1, na kateri se vidi, da ovojno število pri točki faznega prehoda $W = 4$ praktično takoj pada z 1 na 0. Na sliki je tudi oblika energijskih pasov (valenčnega in prevodnega), kjer vidimo, da se ovojno število spremeni šele po tem, ko se energijska reža zapre, kar se zgodi že pri $W = 3$.



Slika 4.1: ovojno število v odvisnosti od jakosti nereda pri $m = 0$, kjer smo povprečili po 200 realizacijah nereda. Opazimo nenadno spremembo pri približno $W = 4$, medtem ko se energijska reža zapre pri $W = 3$. Vir Slike: [17]

Izkaže se, da točke faznega prehoda Sovpadajo s točkami divergence lokalizacijske dolžine stanja z ničelno energijo. Zaradi Andersonove lokalizacije so stanja v prisotnosti nereda lokalizirana, a pride pri faznem prehodu do tranzicije v delokalizirano stanje pri energiji nič. To se da videti iz eksplicitne rešitve Schrödingerjeve enačbe pri energiji nič: vrednost valovne funkcije Ψ na n -ti osnovni celici verige, na podmreži α označimo s $\Psi_{n,\alpha}$, kjer $\alpha = 1$ ustreza podmreži A, $\alpha = -1$ pa podmreži B. Schrödingerjeva enačba se glasi:

$$H\Psi = 0, \quad (4.15)$$

$$t_n \psi_{n-\alpha,\alpha} + i\alpha m_n \Psi_{n,\alpha} = 0. \quad (4.16)$$

Iz zgornje enačbe lahko rekurzivno izrazimo rešitev:

$$\Psi_{n+\xi_\alpha, \alpha} = i^n \prod_{j=1}^n \left(\frac{t_j}{m_j} \right)^\alpha \Psi_{\xi_\alpha, \alpha}, \quad (4.17)$$

Poglavlje 4. Model in metode dela

kjer $\alpha = \pm 1$ ustreza $\xi_\alpha = 0, 1$. Za velike n definirajmo $|\Psi_{n+\xi_\alpha, \alpha}| = e^{-n/\Lambda} |\Psi_{\xi_\alpha, \alpha}|$, saj mora valovna funkcija eksponentno padati, če hočemo, da je normalizabilna. Z Λ smo označili lokalizacijsko dolžino stanja. Iz zgornje rekurzivne enačbe dobimo izraz zanjo:

$$\Lambda^{-1} = \left| -\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \log |\Psi_{n+\xi_\alpha, \alpha}| / |\Psi_{\xi_\alpha, \alpha}| \right|. \quad (4.18)$$

Izkaže se, da je izraz na desni neodvisen od izbire podmreže α (zgodi se le, da izraz znotraj absolutne vrednosti spremeni predznak). Če vstavimo rekurzivni izraz za $\Psi_{n+\xi_\alpha, \alpha}$, dobimo:

$$\Lambda^{-1} = \left| \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n (\log |t_j| - \log |m_j|) \right| \quad (4.19)$$

Zgornjo formulo bi radi poenostavili. TA DEL SEM SPREMENIL SEM ZA RAZLAGO NAŠEL DRUGO REFERENCO, S KATERO SE IZGONEMO NEPOTREBNIM DEFINICIJAM. To lahko naredimo s pomočjo Birkhoffovega ergodičnega izreka [19]:

Birkhoffov izrek. *Naj bo X stacionaren in ergodičen stohastični proces in f takšna funkcija, da velja $E(|f|) < \infty$. Potem velja:*

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n f(\theta_j x) = E(f), \quad (4.20)$$

kjer je $\theta_j(x_1, x_2, x_3, \dots) = (x_2, x_3, x_4, \dots)$ operator premika.

V našem primeru predstavlja stohastični proces X vzorce naših naključnih spremenljivk $X = ((t_1, m_1), (t_2, m_2), (t_3, m_3), \dots)$. Ta proces je stacionaren in ergodičen, saj so posamezni vzorci neodvisni in enako porazdeljeni [19] (teorem sicer velja tudi v splošnejših primerih, ko so vzorci na primer paroma korelirani). Funkcija f je v našem primeru enaka $f((x_1, y_1), (x_2, y_2), \dots) = \log|x_1| - \log|y_1|$. Poglejmo si pričakovano vrednost $|f|$:

$$E(|f|) = \int_{-0.5}^{0.5} d\omega \int_{-0.5}^{0.5} d\omega' |\log|1 + W_1\omega| - \log|m + W_2\omega'|||. \quad (4.21)$$

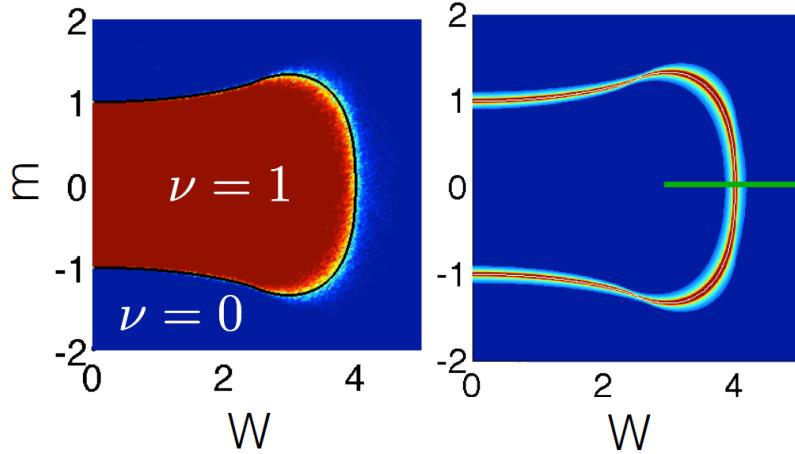
Ker integriramo po končnem intervalu, je morebiten problematičen del le tisti, kjer ima logaritem divergenco, na primer, ko velja $\omega \sim -\frac{1}{W_1}$. Ko primerno razbijemo integral na manjše intervale in se znebimo absolutne vrednosti v integrandu, dobi tak problematičen del obliko $\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{-\epsilon}^{\epsilon} \log|x| dx = 2 \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_0^\epsilon \log x dx = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} x(\log x - 1)|_0^\epsilon = 0$. Del blizu divergence torej k intergalu ne prispeva in velja $E(|f|) < \infty$.

Sedaj lahko direktno uporabimo Birkhoffov izrek, da dobimo:

$$\Lambda^{-1} = \left| \int_{-0.5}^{0.5} d\omega \int_{-0.5}^{0.5} d\omega' (\log|1 + W_1\omega| - \log|m + W_2\omega'|) \right|, \quad (4.22)$$

kar se da analitično izračunati. Rezultat je:

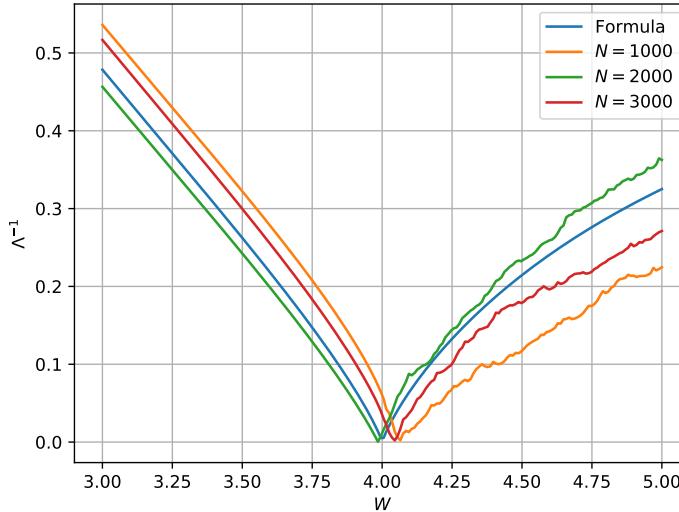
$$\Lambda^{-1} = \left| \log \left(\frac{|2 + W_1|^{1/W_1+0.5} |2m - W_2|^{m/W_2-0.5}}{|2 - W_1|^{1/W_1-0.5} |2m + W_2|^{m/W_2+0.5}} \right) \right|. \quad (4.23)$$



Slika 4.2: na levi je prikazan fazni diagram modela. Na desni je prikazana še lokalizacijska dolžina stanja z $E = 0$, ki divergira vzdolž faznega prehoda in je enaka 0 zunaj tega območja. Prav tako je na desni z zeleno črto označena pot, po kateri bomo pozneje izvedli preklop Hamiltonjana. Izračuni za ν so narejeni na verigi velikosti $N = 2000$ in povprečeni preko 10 realizacij nereda. Vir Slike: [17]

Na Sliki 4.2 je prikazan fazni diagram našega modela. Opazimo, da divergenca lokalizacijske dolžine pri ničelni energiji res sovпадa s točkami faznega prehoda. Kot prej povedano, lahko poleg prehajanja med fazama, ki smo ga videli že v SSH modelu, preidemo med fazama tudi z dovolj močno jakostjo nereda. Zanimali nas bodo preklopi Hamiltonjana čez fazni prehod, kjer bomo povečevali W pri $m = 0$, kot je na desnem grafu označeno z zeleno črto. Zaenkrat nekaj o tem faznem prehodu že vemo: Če razvijemo enačbo (4.23) okoli $W_C = 4$, pri $m = 0$, vidimo, da lokalizacijska dolžina v bližini faznega prehoda skalira kot $\Lambda \sim \frac{1}{|W-W_C| \log |W-W_C|}$. Kritični eksponent ν za ta prehod je torej enak ena z logaritemskim popravkom.

Oglejmo si obnašanje modela vzdolž poti, preko katere bomo izvedli preklop. Kot prvi test in občutek za potrebno velikost verige N , si poglejmo primerjavo empirične (4.19) in analitične (4.23) formule za lokalizacijsko dolžino vzdolž te poti za več velikosti sistema.



Slika 4.3: inverz lokalizacijske dolžine, pridobljen z empirično formulo za več velikosti sistema (N prikazuje število vseh atomov v verigi) in z analitično formulo za neskončno dolgo verigo vzdolž poti $W : 2 \rightarrow 6$ pri $m = 0$.

Na Sliki 4.3 vidimo, da za velikosti verige nekaj tisoč atomov še ne pridemo do točnega asimptotskega obnašanja - (poizkusil sem še večje verige in izkazalo se je, da bi zato rabili verigo, daljšo več 10^5 atomov) -, vendar je obnašanje lokalizacijske dolžine pri tako majhnih verigah vseeno kvalitativno zelo podobno obnašanju neskončne verige. Za večje N postane numerika zelo zahtevna, zato bom v nadaljevanju (če ne bo drugače rečeno) obravnaval verigo z $N = 1000$. Vse izračune, ki sledijo, sem ponovil za dvakrat daljšo verigo, kjer ni bilo opaziti bistvenih razlik. Poleg tega lahko na sliki opazimo še naslednje: ko imamo opravka z določeno realizacijo nereda, je število uporabljenih naključnih števil seveda končno in se divergenca lokalizacijske dolžine (in s tem fazni prehod) ne zgodi točno pri $W = 4$, kot narekuje asimptotska formula, temveč nekoliko pred to točko ali po njej. Izkaže se, da to ni problem, saj bomo pri eksitacijah rezultate tako ali tako povprečevali po dovolj veliko realizacijah nereda, da lahko privzamemo, da je povprečna točka faznega prehoda res $W = 4$.

Sedaj si poglejmo, kako izgledajo energijski nivoji vzdolž prej omenjene poti čez fazni prehod. V ta namen napišimo Hamiltonjan v matrični obliki:

$$H = \begin{bmatrix} 0 & im_1 & & & t_{N/2} \\ -im_1 & 0 & t_1 & & \\ & t_1 & 0 & im_2 & \\ & & -im_2 & 0 & \ddots \\ & & & \ddots & \ddots & im_{N/2} \\ t_{N/2} & & & -im_{N/2} & 0 \end{bmatrix}$$

Izbrali smo periodične robne pogoje, saj se hočemo čim bolj približati neskončni verigi. Energije bomo dobili z diagonalizacijo Hamiltonjana, za kar bom uporabil metodo eigh za diagonalizacijo hermitskih matrik iz SciPyjeve knjižnice za linearo

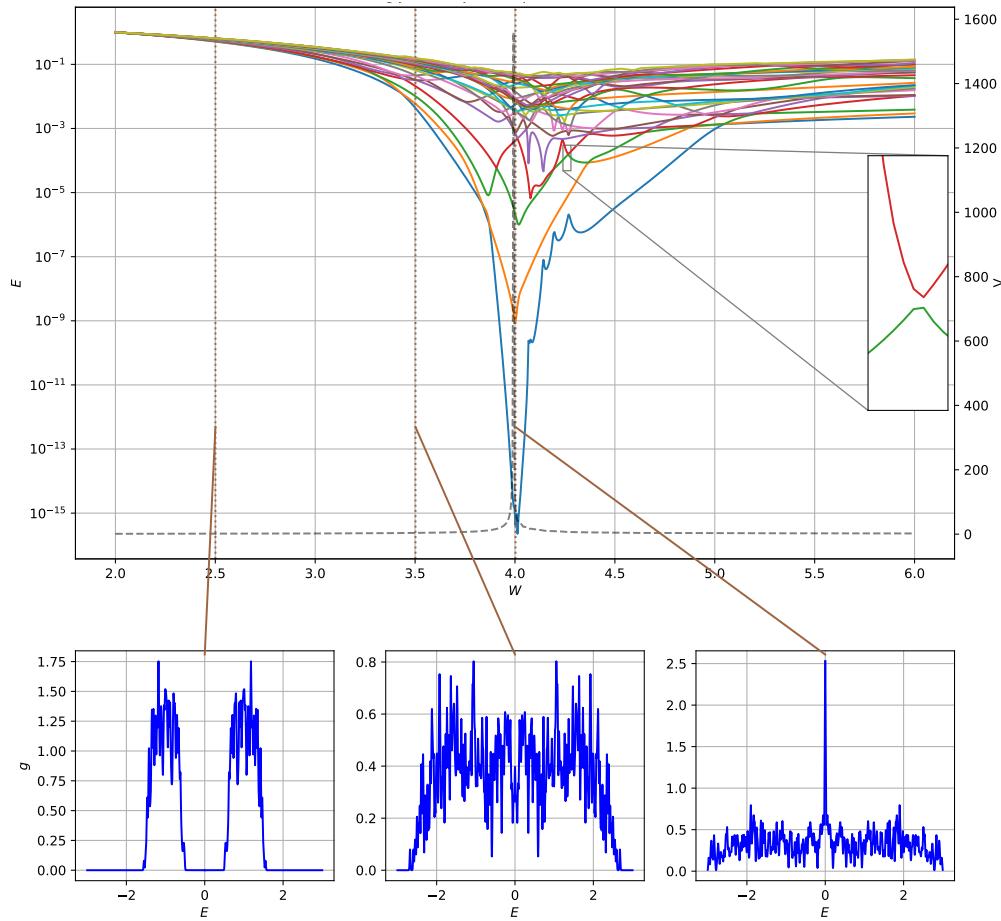
algebro (Python 3). Iz spektra lahko izračunamo tudi gostoto stanj. Formalno je to vsota Diracovih delta funkcij pri lastnih energijah:

$$g(E) = \sum_{i=1}^N \delta(E_i - E). \quad (4.24)$$

Za potrebe prikaza bom Diracove delte aproksimiral z Lorentzovo krivuljo:

$$\delta(x) = \lim_{\sigma \rightarrow 0} \frac{1}{\pi} \frac{\sigma}{\sigma^2 + x^2}. \quad (4.25)$$

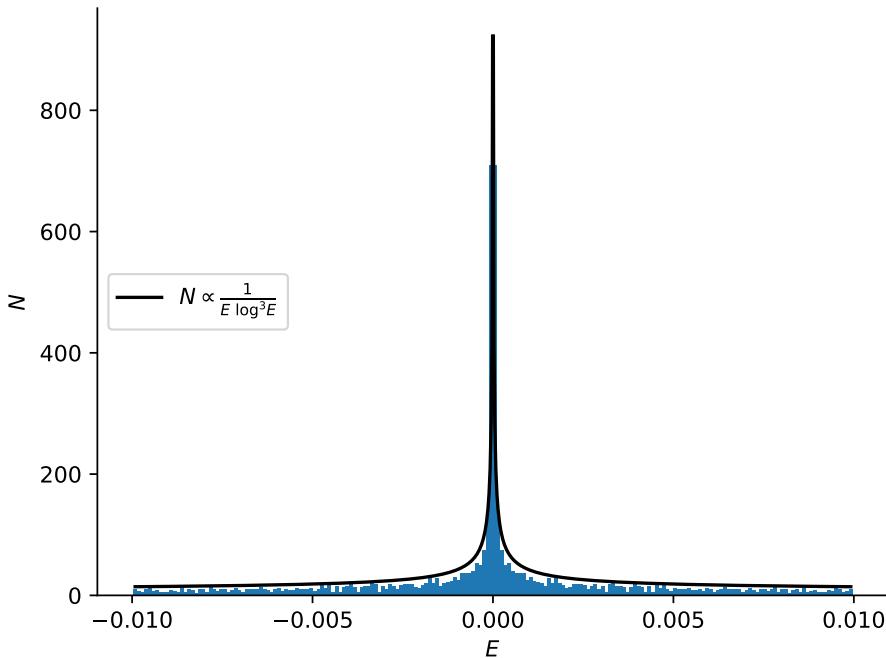
V mojih izračunih sem vzel vrednost $\sigma = 0.01$. Rezultati, ki jih da numerika, so sledeči:



Slika 4.4: na zgornjem grafu je prikazanih nekaj najnižjih lastnih energijskih nivojev vzdolž poti $W : 2 \rightarrow 6$ pri $m = 0$. S črno črtkano črto (desna y os) je narisana lokalizacijska dolžina za to realizacijo nereda. Na spodnjih treh grafih je za različna mesta vzdolž poti prikazana gostota stanj.

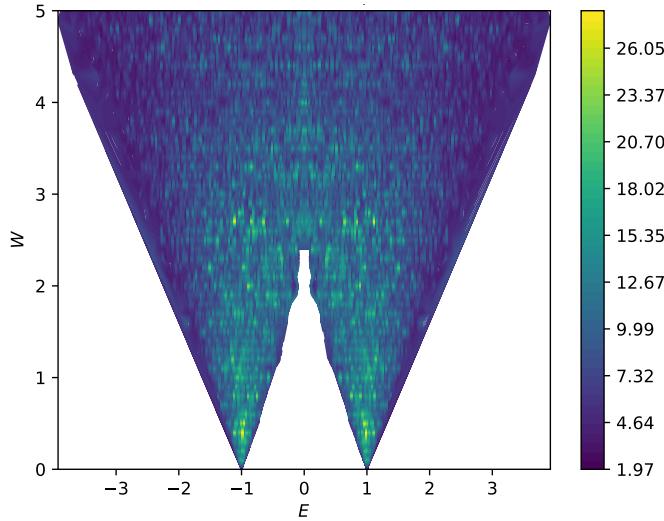
Na Sliki 4.4 vidimo nekaj najnižjih pozitivnih energijskih nivojev vzdolž poti, kjer bomo izvajali preklop. Slika za negativne je enaka, saj je zaradi kiralne simetrije spekter simetričen. Vidimo, da se pri približevanju kritični točki energijska reža res zapira. S primerjanjem gostot stanj pri večjih velikostih sistema smo potrdili,

da se reža zapre pri $W = 3$. Podrobnejše obnašanje energijskih nivojev je precej naključno, po prehodu skozi kritično točko pa se energijska reža odpira veliko počasneje in je v praksi kar še vedno zaprta. Opazimo, da se energijski nivoji med seboj večkrat sekajo, pogosto pa se zgodijo tudi avoiding crossingi SLOVENSKI IZRAZ?, kot je na primer prikazano na povečanem delu grafa. Na grafu je prikazana tudi lokalizacijska dolžina stanja z energijo nič in vidimo lahko, da se v točki, kjer ta divergira, energijski nivoji res najbolj približajo ničli, kar ustreza faznemu prehodu med topološkima fazama. V resnici gredo čisto na nič, vendar smo tu seveda omejeni z numeriko in torej končnim sistemom. Na spodnjih treh grafih je prikazana gostota stanj, pridobljena za tri točke vzdolž poti. Prva ustreza $W = 2$, kar je še daleč od kritične točke, kjer je energijska reža še odprta, kar vidimo v ničelni gostoti stanj okoli energije nič. Okoli $W = 3$ se energijska reža že zapira, kar lahko potrdimo s tem, da je gostota stanj pri $E = 0$ že neničelna. V kritični točki se v gostoti stanj pojavi divergenca pri energiji 0. Točno obliko te divergence pravzaprav že slutimo, saj v kritični točki velja, da so velikosti sklopitev t_n in m_n porazdeljene po isti porazdelitvi, kar pomeni, da bi lahko veljala formula, izpeljana v prejšnjem poglavju: $g(E) \propto \frac{1}{E \log^3 E}$. Situacija pa ni čisto ista kot v prejšnjem poglavju, saj je ena izmed sklopitev imaginarna. Histogram na Sliki 4.5 prikazuje porazdelitev števila stanj po energijah pri $W = 4$, pridobljen za zelo velik sistem z odprtimi pogoji, saj je pri takih robnih pogojih Hamiltonjan tridiagonalna matrika, kar lahko zelo učinkovito rešimo s SciPyjevo metodo eigh_tridiagonal. Število stanj v majhnem intervalu energije je sorazmerno povprečni gostoti stanj na sredini tega intervala, kar pomeni, da ima prikazani histogram isto obliko kot gostota stanj. Vidimo, da se prilagojena krivulja $g(E) \propto \frac{1}{E \log^3 E}$ s histogramom res ujema in da velja prej izpeljana formula za gostoto stanj tudi v našem primeru. TA HISTOGRAM JE NOV.



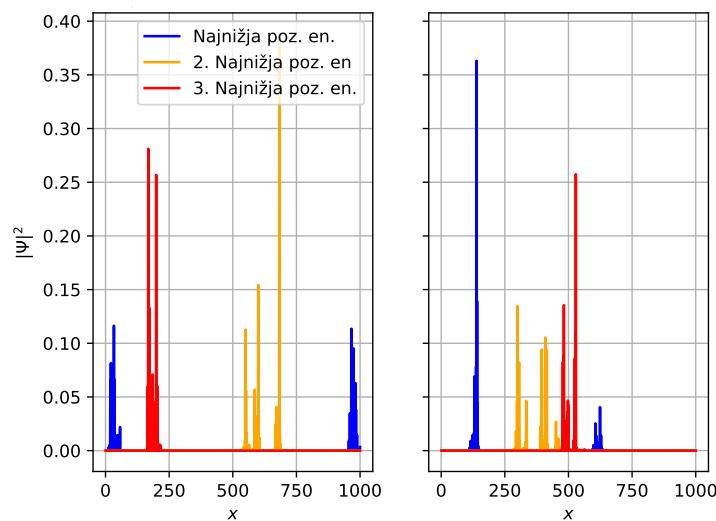
Slika 4.5: histogram lastnih energij za sistem velikosti $N = 75000$ pri odprtih robnih pogojih.

Na Sliki 4.6 je prikazan IPR za model, ki ga obravnavamo. Tu so že v čistem modelu stanja lokalizirana, saj čisti model ustreza eni izmed popolnoma dimeriziranih limit v SSH modelu. Ko dodamo nered, ostanejo stanja močno lokalizirana. Tudi v okolici točke $W = 4, E = 0$ ni videti nobene delokalizacije, kar se zdi v nasprotju z našo prejšnjo izpeljavo. Razlog za to je dejstvo, da velja delokalizacija točno v kritični točki in točno pri energiji nič, kar sta pogoja, katerima lahko z numeriko zadostimo le do določene natančnosti in torej tega v praksi ne opazimo.



Slika 4.6: IPR v odvisnosti od jakosti nereda W in energije E .

Na Sliki 4.7 so prikazane nekatere lastne funkcije modela pred točko faznega prehoda in v njej. Opazimo, da so vse lokalizirane, čeprav se v kritični točki že vidi, da ima stanje z najnižjo energijo, za razliko od ostalih, posamezna vrhova precej daleč narazen. V termodinamski limiti postane prav to stanje delokalizirano, vendar ga v končnih sistemih kot na Sliki 4.6 ne bomo našli.



Slika 4.7: na levi so prikazane prve 3 lastne funkcije s pozitivno energijo pri $W = 3.8$, na desni pa pri $W = 4$.

Sedaj se bomo posvetili preklopom Hamiltonjana čez fazni prehod, kar pomeni,

Poglavlje 4. Model in metode dela

da bomo spremljali časovni razvoj valovne funkcije, pri čemer bomo parametre Hamiltonjana linearno spreminjali vzdolž prej omenjene poti.

Preklop delamo med dvema vrednostima jakosti nareda, tako da začnemo pri vrednosti $W_{\text{zac}} < 4$, končamo pa, po določenem času prekopa T , pri vrednosti $W_{\text{kon}} > 4$. Časovno odvisnost jakosti nereda lahko torej zapišemo kot:

$$W(t) = W_{\text{zac}} + t/T(W_{\text{konc}} - W_{\text{zac}}). \quad (4.26)$$

Začnemo v izbranem lastnem stanjem pri W_{zac} in ga časovno razvijemo. Ker delamo preklop, je tudi Hamiltonjan odvisen od časa. Rešujemo torej časovno odvisno Schrödingerjevo enačbo:

$$i \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \hat{H}(t)\Psi. \quad (4.27)$$

Rešitev izrazimo s pomočjo operatorja časovnega razvoja $\hat{U}(t) = e^{-i\hat{H}(t)t}$ kot $\Psi(t + \tau) \approx \hat{U}(t)\Psi(t)$. Za numeričen izračun časovnega razvoja bomo uporabili implicitno metodo tipa Crank-Nicholson, ki zagotavlja, da je operator časovnega razvoja unitaren. Uporabili bomo Padéjevo aproksimacijo za eksponentno funkcijo:

$$\exp(-i\tau\hat{H}) = \left(\hat{\mathbb{I}} + i\frac{\tau}{2}\hat{H}\right)^{-1} \left(\hat{\mathbb{I}} - i\frac{\tau}{2}\hat{H}\right) + \mathcal{O}(\tau^3), \quad (4.28)$$

s čimer dobimo implicitno shemo:

$$\left(\hat{\mathbb{I}} + i\frac{\tau}{2}\hat{H}(t)\right)\Psi(t + \tau) = \left(\hat{\mathbb{I}} - i\frac{\tau}{2}\hat{H}(t)\right)\Psi(t). \quad (4.29)$$

V našem primeru bomo časovno razvijali več funkcij hkrati. To bi lahko storili tako, da bi zgornjo enačbo reševali za vsako izmed njih, a je učinkoviteje, če rešujemo matrično enačbo:

$$\left(\mathbb{I} + i\frac{\tau}{2}\hat{H}(t)\right)X(t + \tau) = \left(\mathbb{I} - i\frac{\tau}{2}\hat{H}(t)\right)X, \quad (4.30)$$

kjer so v matriki X lastni vektorji Ψ v stolpcih. Za učinkovito reševanje te enačbe bomo za množenje matrik uporabili SciPyjevo funkcijo za sparse matrike `scipy.sparse`, saj gre za sparse Hamiltonjan. V našem primeru bomo vzeli vrednost $\tau = 1$. Rezultate smo preverili tudi pri $\tau = 0.5$, kjer nismo opazili nobene razlike.

Med preklopom se pojavijo eksitacije v prevodnem pasu, saj je čas prekopa končen. Število eksitacij v i-to stanje oziroma zasedenost i-tega stanja izračunamo preprosto kot

$$N_i = \sum_j |\langle i | \Psi_j \rangle|^2, \quad (4.31)$$

kjer je Ψ_j časovno razvito j-to stanje iz valenčnega pasu, $|i\rangle$ pa predstavlja i-to lastno stanje Hamiltonjana ob nekem času. Vrednost $|\langle i | \Psi_j \rangle|^2$ je verjetnost, da preskoči elektron iz časovno razvitega stanja Ψ_j v lastno stanje $|i\rangle$. Celotno verjetnost za prehod v stanje $|i\rangle$ in s tem zasedenost tega stanja potem dobimo tako, da to seštejemo po vseh stanjih iz valenčnega pasu Ψ_j .

Pri obravnavi eksitacij bomo iskali odvisnosti oblike

$$N_{\text{eks}} = \alpha T^\beta, \quad (4.32)$$

pri čemer nas bo zanimala predvsem potenca β . Za natančno pridobitev le-te iz podatkov zgornjo enačbo najprej logaritmiramo

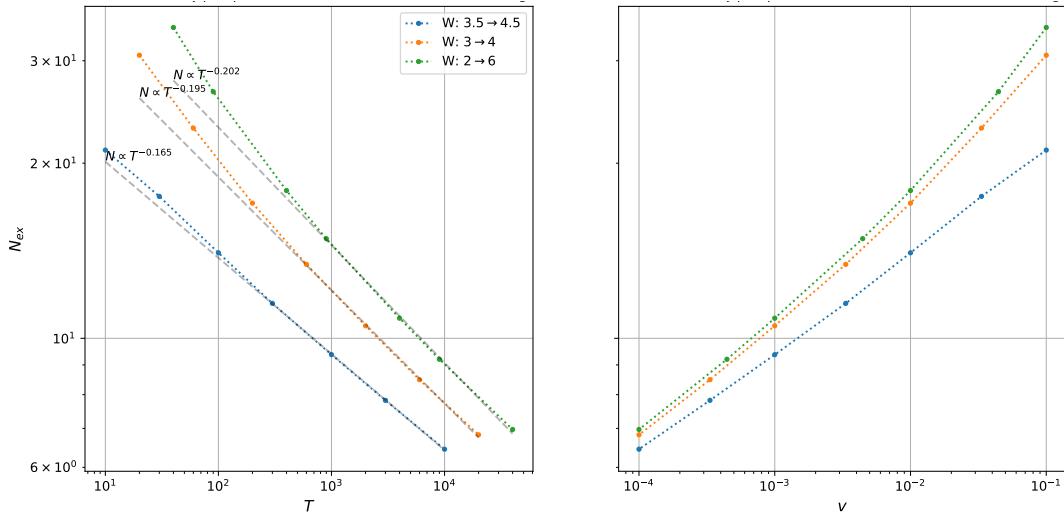
$$\log N_{\text{eks}} = \log \alpha + \beta \log T. \quad (4.33)$$

Z definicijami $y = \log N_{\text{eks}}$ in $x = \log T$, tako dobimo linearno funkcijo $y = \beta x + \log \alpha$, ki jo lahko natančno prilagajamo podatkom s pomočjo NumPy-jeve metode `polyfit`.

Poglavlje 5

Rezultati preklapljanja

Poglejmo, kolikšno je število eksitacij po preklopu za več različnih preklopov. Na levem grafu Slike 5 se vidi, da število eksitacij pada z dolžino preklopa, kar je smiselno, saj vemo, da adiabatski preklop ustreza neskončno dolgemu preklopu, v katerem se eksitacije ne pojavijo. Prav tako opazimo, da imamo več eksitacij, če preklapljam na večjem intervalu jakosti nereda $[W_{\text{zac}}, W_{\text{kon}}]$. To se zgodi, ker pri najmanjšem intervalu jakosti nereda preklopa ne začnemo dovolj globoko v topološki fazi in smo pravzaprav že na meji, kjer se energijska reža zapira, kot se bo pokazalo na Sliki 5. Vidimo lahko tudi, da število eksitacij na območju počasnejših preklopov skalira kot potenčni zakon, kjer je potenca odvisna od intervala jakosti nereda, preko katerega delamo preklop. Potenčno funkcijo sem tu prilagodil na tri najpočasnejše preklope. Kot bo vidno na Sliki 5, so hitrejši preklopi prehitri, kar povzroči, da imamo veliko eksitacij že takoj na začetku preklopa, podobno kot če preklapljam po premajhnem intervalu jakosti nereda.

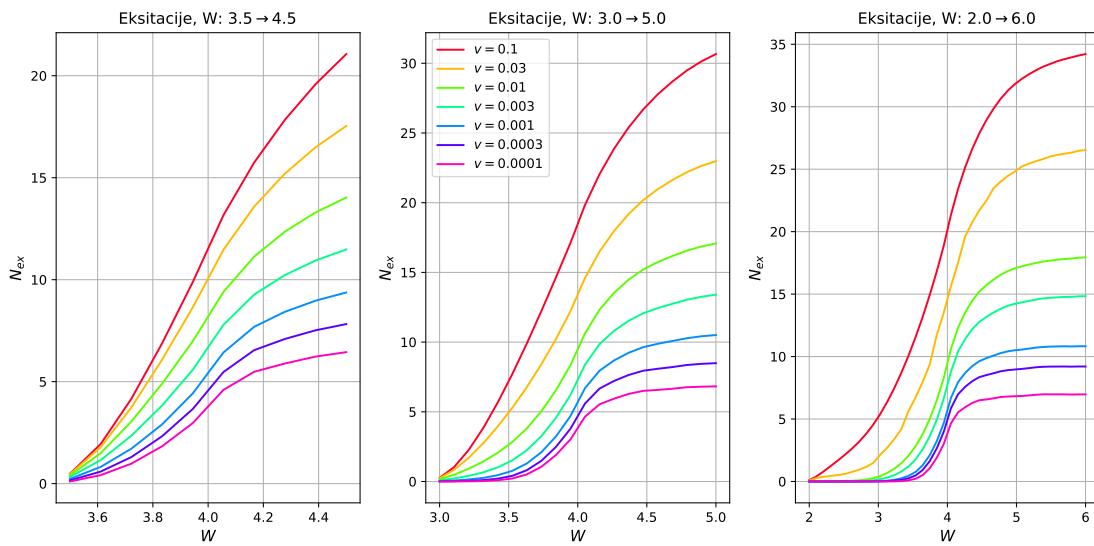


Slika 5.1: na levi je prikazano število vseh eksitacij po koncu preklopa v odvisnosti od njegovega časa trajanja T , na desni pa v odvisnosti od njegove hitrosti v . S črtanimi črtami je prikazana ekstrapolacija iz treh točk pri največjih časih T . Podatki so prikazani za 3 različne izbire W_{zac} in W_{kon} .

Pravzaprav je smiselneje gledati število eksitacij v odvisnosti od hitrosti preklopa (Namreč, preklop $3.5 \rightarrow 4.5$ pri $T = 10000$ je enako hiter kot preklop $2 \rightarrow 6$ pri

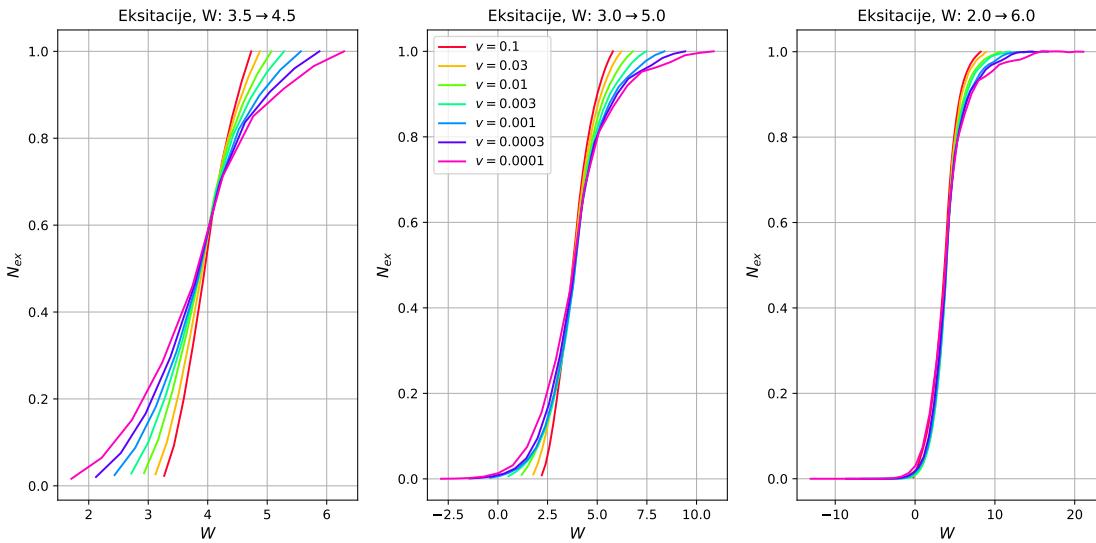
Poglavlje 5. Rezultati preklapljanja

$T = 40000$), kar je prikazano na desnem grafu Slike . Tu jasneje opazimo, da sta si preklopa na daljšem intervalu veliko bolj podobna v obnašanju - v primerjavi s preklopom na krajšem intervalu.



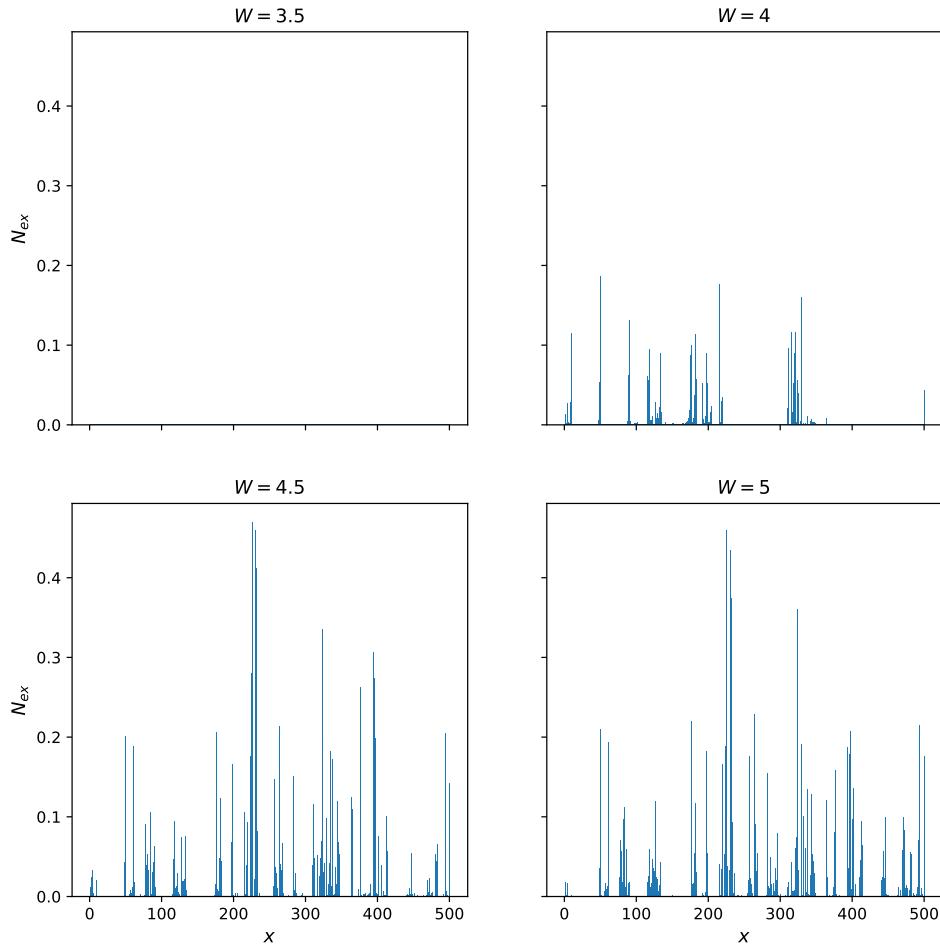
Slika 5.2: skupno število eksitacij med preklopom, prikazano za več različnih intervalov preklopa in njihovih hitrosti.

Na Sliki opazimo prej omenjeno hitro naraščanje števila eksitacij že takoj na začetku preklopa pri ozkem intervalu preklopa ter pri hitrih preklopih. Pri daljših intervalih in počasnejših preklopih vidimo, da je krivulja na začetku ravna, kar pomeni, da smo začeli dovolj globoko, ko je energijska reža še dovolj široka, da eksitacij ni. Podobno kot v energijskih nivojih se pojavi asimetrija območja pred in po kritični točki $W = 4$. Na Sliki 5.3 smo graf eksitacij skozi čas v x osi reskalirali s prej dobljenimi eksponenti za potenčno odvisnost števila eksitacij od dolžine preklopa. Opazimo univerzalno obnašanje krivulj pri preklopih na daljšem intervalu. Najhitrejši preklopi odstopajo iz tega obnašanja, vendar smo to pričakovali, saj smo že povedali, da spadajo ti v drugačen režim, kjer se veliko eksitacij pojavi že takoj na začetku preklopa.



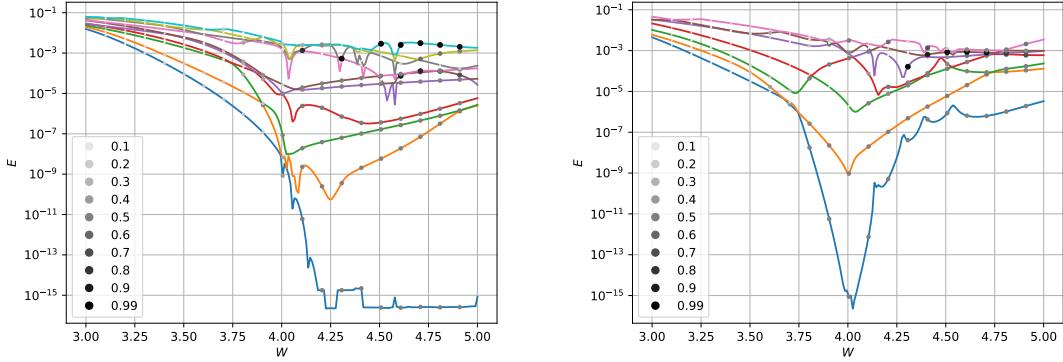
Slika 5.3: skupno število eksitacij med preklopom, prikazano za več različnih intervalov preklopa in njihovih hitrosti, kjer je vsak graf v x smeri reskaliran s primerno potenco, pridobljeno iz Slike 5.

Poglejmo si še, kje natančneje se pojavijo te eksitacije. Na Sliki 5.4 je prikazana krajevna porazdelitev eksitacij med preklopom. Vidimo, da se eksitacije pojavljajo postopoma po nekih naključnih osnovnih celicah.



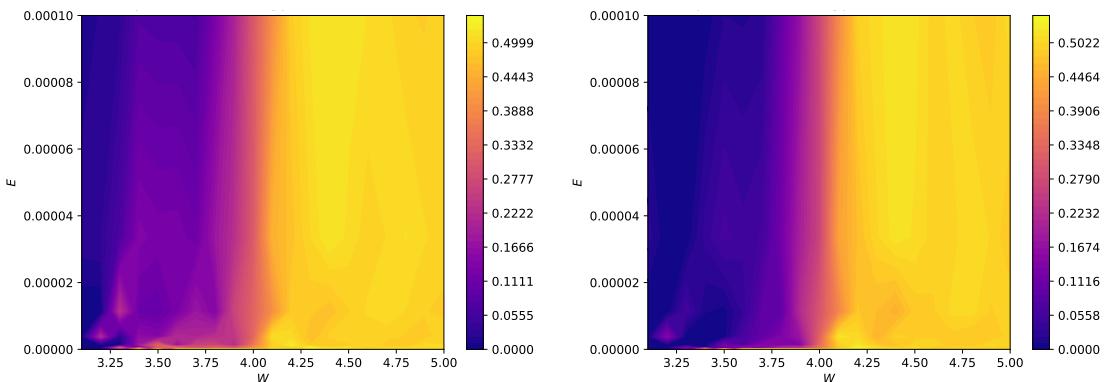
Slika 5.4: na sliki so histogrami krajevne porazdelitve eksitacij po indeksih na verigi s 500 osnovnimi celicami po koncu preklopa, ki traja $T = 6000$ in poteka na intervalu $W = [3, 5]$.

Poglejmo si še porazdelitev eksitacij po lastnih stanjih Hamiltonjana ob nekih fiksnih časih. To je prikazano na Sliki 5.5 za dve realizaciji nereda. Kot smo že videli, na začetku, ko je energijska reža še dovolj široka, še nimamo eksitacij. Nekje pri $W = 4$ se eksitacije začenjajo pojavljati in ostanejo še po preklopu.



Slika 5.5: energijski nivoji in eksitacije za dve realizaciji nereda. Število eksitacij predstavlja velikost in barva pikic. Hitrost preklopa je $v = 0.01$ na intervalu $W \in [3, 5]$.

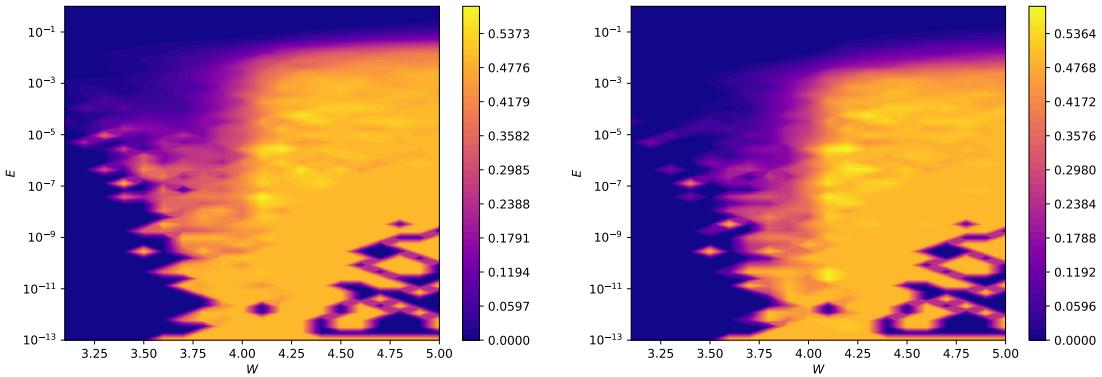
Na Sliki 5.6 smo interval energij $E \in [10^{-13}, 10^{-4}]$ v logaritemski skali razdelili enakomerno na 20 območij in opazovali eksitacije, ki padejo vanje, povprečene preko 100 realizacij nereda. Prikazana sta grafa za dve različni hitrosti preklopa. Ta grafa služita le kot nazornejša slika prej omenjenega dejstva, da je po kritični točki prisotnih veliko več eksitacij kot pred njo in da se začenjo pri hitrejšem preklopu eksitacije pojavljati že nekoliko preden se približamo kritični točki.



Slika 5.6: eksitacije na interval energije med preklopom. Interval $E \in [10^{-13}, 10^{-4}]$ sem razdelil na 20 delov enakomerno v logaritemski skali in narisal povprečno število eksitacij za vsak interval, povprečeno po 100 realizacijah nereda. Na levi je $v = 0.001$ na desni pa $v = 0.0001$.

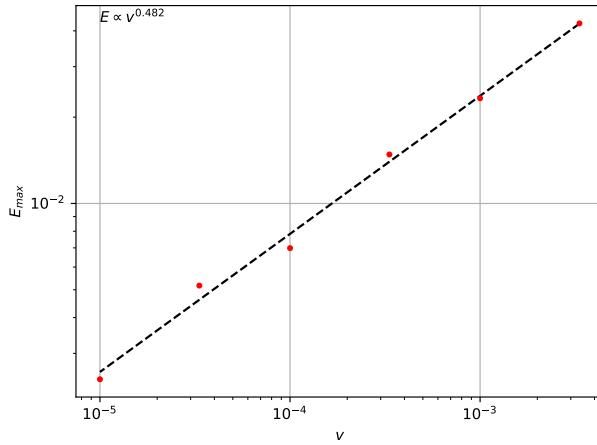
Na Sliki 5.7 vidimo podobna grafa, vendar tokrat za večji interval energije $E \in [10^{-13}, 1]$ in v logaritemski skali. Opazimo, da imajo pri počasnejšem preklopu na koncu najvišje eksitacije manjšo energijo, kot pri hitrejšem. Tudi to bi lahko pričakovali, saj že vemo, da imamo nasploh več eksitacij v hitrejših preklopih.

Poglavlje 5. Rezultati preklapljanja



Slika 5.7: eksitacije na interval energije med preklopom. Interval $E \in [10^{-13}, 1]$ sem razdelil na 50 delov enakomerno v logaritemski skali in narisal povprečno število eksitacij za vsak interval, povprečeno po 100 realizacijah nereda. Grafa sta tokrat v logaritemski skali. Leva $v = 0.001$, desna $v = 0.0001$.

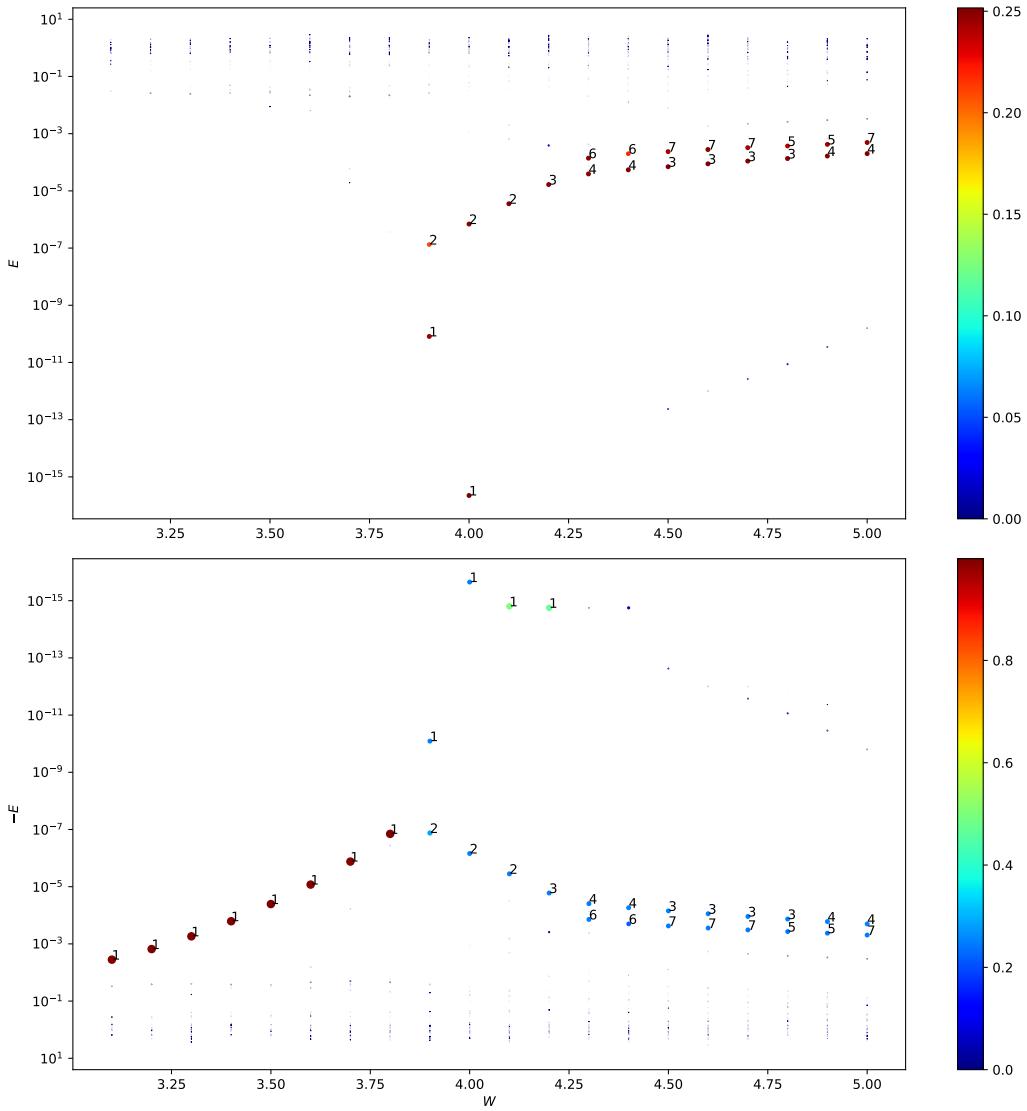
Na Sliki 5.8 si podrobneje pogledamo, kako je z ravnokar omenjenim višanjem energije končnih eksitacij s hitrostjo preklopa. Opazujemo, pri kateri energiji pade zasedenost stanj z 0.5 na 0.25, kar služi kot ocena za robno energijo, nad katero ni več veliko eksitacij. Če to narišemo v odvisnosti od hitrosti preklopa, opazimo, da je odvisnost spet potenčna, vendar je eksponent občutljiv na finost particije intervala energije in se giblje med 0.4 in 0.6. Takšna napaka eksponenta ni presenetljiva, saj je znano... TUKAJ BI DAL, ČE BI ŠLO, KAKŠNO REFERENCO NA TISTO DA SO EKSPONENTI PRI TEH STVAREH ZELO OBČUTLJIVI. ŠE NEKAJ: BI NA SPODNJI GRAF RAJE NARISAL ODVISNOSTI IN FITE ZA VEĆ IZBIR BINOV?



Slika 5.8: na grafu je prikazana energija najvišje zasedenih stanj po koncu preklopa za več njegovih hitrosti. To je energija, kjer eksitacije prvič padejo na 0.25. Rezultati so povprečeni po 100 realizacijah nereda, energijski interval pa je razdeljen na 500 delov. Preklop je potekal na intervalu $W : 3 \rightarrow 5$.

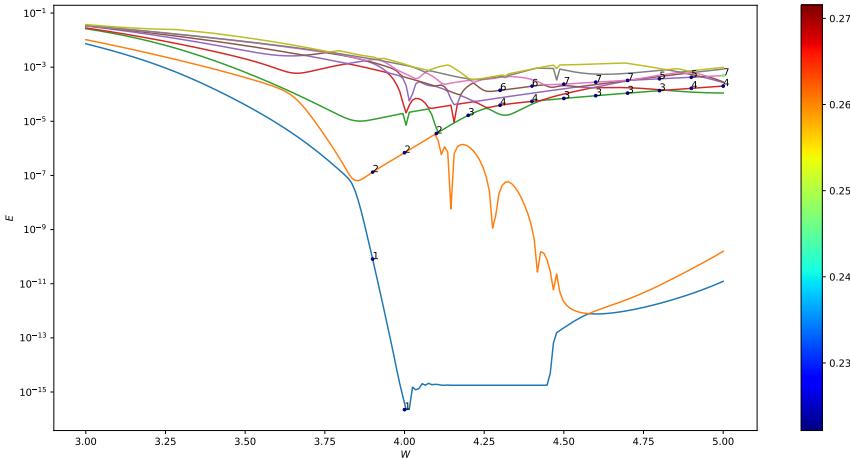
Na Sliki 5.9 lahko vidimo, kam točno prehaja elektron, ki je na začetku v nekem izbranem stanju. Na sliki je prikazano prvo stanje z negativno energijo, vendar je obnašanje podobno pri ostalih nizkoenergijskih stanjih. Opazimo, da preidemo po kritični točki z verjetnostjo približno 0.5 v prevodni pas, v katerem imamo praviloma

na voljo dve stanji, v kateri lahko preidemo z verjetnostjo 0.5, pogojno na dejstvo, da je prišlo do skoka v prevodni pas. Ti stanji, v kateri lahko skočimo, sta ravno kiralna partnerja stanj, v katerih ostanemo, če ne pride do skoka v prevodni pas.



Slika 5.9: na grafu je z barvo prikazana verjetnost za prehod v različna lastna stanja Hamiltonjana med preklopom, če preklapljam lastno stanje, ki ima na začetku najvišjo negativno energijo (torej prvo stanje v valenčnem pasu) pri neki realizaciji nereda. Zgornji graf prikazuje prevodni pas, spodnji pa valenčnega. Na grafu so označena tudi zaporedna števila stanj, v katera prehajamo.

Opazili smo, da se po prehodu skozi točko faznega prehoda lahko indeksi zasedenih stanj še nadalje spreminja. Razlago za to lahko vidimo na Sliki 5.10. Po prehodu ostanejo energijski nivoji tesno blizu in se pogosto križajo, kar povzroči, da se naše začetno stanje preimenuje v drugega. Poleg križanja se lahko pojavijo tudi avoided crossingi SPET, SLOVENSKI IZRAZ, pri katerih lahko elektron še nadalje skoči na naslednji energijski nivo.



Slika 5.10: na grafu je nekaj najnižjih energijskih nivojev v prevodnem pasu. S pikicami so označene verjetnosti za prehod v prevodni pas, če preklapljamо stanje z najvišjo energijo v valenčnem pasu.

TUKAJ SEM ZAČEL PISATI RAZLAGO ZA PREHOD V DVE STANJI. DOLOČENI KORAKI MI NISO 100% JASNI, NAJBRŽ JE KAJ TUDI NAROBE. Končno idejno razložimo, zakaj se ob faznem prehodu zgodi prehod v le dve stanji. To lahko vidimo, če naš model preslikamo na XX model, kar bomo storili s pomočjo Jordan - Wignerjeve transformacije [17]:

$$\hat{c}_{n,A} = (-i)^{n+1} \exp(i\pi \sum_{j=1}^{2n-1} \hat{S}_j^+ \hat{S}_j^-) \hat{S}_{2n}^-, \quad (5.1)$$

$$\hat{c}_{n,B} = (-i)^n \exp(i\pi \sum_{j=1}^{2n-2} \hat{S}_j^+ \hat{S}_j^-) \hat{S}_{2n-1}^-. \quad (5.2)$$

Ko zgornje izraze vstavimo v naš Hamiltonjan dobimo Hamiltonjan XX modela:

$$\hat{H} = \sum_i 2t_i (\hat{S}_{2i}^x \hat{S}_{2i+1}^x + \hat{S}_{2i}^y \hat{S}_{2i+1}^y) + 2m_i (\hat{S}_{2i}^x \hat{S}_{2i-1}^x + \hat{S}_{2i}^y \hat{S}_{2i-1}^y) = \sum_i J_i (\hat{S}_i^x \hat{S}_{i+1}^x + \hat{S}_i^y \hat{S}_{i+1}^y), \quad (5.3)$$

kjer smo v drugi enakosti vpeljali oznako J_i , ki je pogosteje uporabljena, ko imamo opravka z XX modelom. Lastna stanja zgornjega modela lahko dobimo s pomočjo decimacijske renormalizacijske grupe [20]. Recept poteka takole:

- Izberemo najmočnejšo sklopitev $\tilde{J} = \max_i \{J_i\}$. Recimo, da je ta med spinoma i_1 in i_2 .
- Spina na i_1 in i_2 tvorita singlet, ki je lastno stanje z energijo $-\tilde{J}$.
- Spina na i_1 in i_2 iz verige odstranimo, in med spinoma na $i_1 - 1$ in $i_2 + 1$ dodamo vez z jakostjo $J_{i_1-1} = J_{i_1-1} J_{i_2} / J_{i_1}$.

Z zgornjim postopkom bomo dobili lastna stanja in energija Hamiltonjana, ki bodo dobro opisovala sistem pri energijah, ki so veliko manjše od trenutnega \tilde{J} . V našem primeru imamo opravka z $m = 0$ in $W \approx 4$. V okolici te točke, so porazdelitve jakosti sklopitev J centrirane okoli vrednosti $J \approx 2$, torej bo zgornji recept dovolj

dober za opis prej obravnavanih nizko energijskih stanj. Pri $W < 4$ smo v topološki fazi, kjer so v povprečju močnejše sklopite med različnima osnovnima celicama, kar ustreza sodim sklopitvam $\{J_{2i}\}$. Pri $W < 4$ so torej lastna stanja singleti med različnima osnovnima celicama. Po drugi strani so pri $W > 4$ v povprečju močnejše sklopite znotraj iste osnovne celice torej $\{J_{2i+1}\}$. Lastna stanja so tokrat singleti v isti osnovni celici. Tik pred faznim prehodom smo v topološki fazi v nekem lastnem stanju $\frac{1}{\sqrt{2}}(|i_1\rangle - |i_2\rangle)$. Tik po prehodu smo še vedno v istem stanju, vendar ta spina tokrat pripadata različnima lastnima stanja Hamiltonjana: $\frac{1}{\sqrt{2}}(|i_1\rangle - |j_2\rangle)$ in $\frac{1}{\sqrt{2}}(|j_1\rangle - |i_2\rangle)$. Stanje v katerem se nahajamo, ima torej z vsako izmed teh dveh novih lastnih stanj Hamiltonjana le polovično prekrivanje, kar razloži dejstvo, da v točki faznega prehoda iz enega samega stanja dobimo par stanj.

Poglavlje 6

Zaključek

Obravnavali smo priejen SSH model z imaginarno sklopitvijo v osnovnih celicah. Model ustreza enodimenzionalnemu topološkemu izolatorju z dvema topološkima fazama, ki se razlikujeta po topološki invarianti - ovojnem številu. V sklopitve smo dodali nered, kar povzroči, da se lastna stanja lokalizirajo. Opazili smo, da lahko med fazama prehajamo tudi izključno z večanjem jakosti nereda in se osredotočili na lastnosti takšnega faznega prehoda. Na širšem območju okoli točke faznega prehoda je energijska reža zaprta, točno na točki faznega prehoda pa se pojavi delokalizirano lastno stanje pri energiji nič. Začenši v topološki fazi smo izvajali preklop preko te točke faznega prehoda in opazovali eksitacije v prevodnem pasu, ki se pri tem pojavi. Ugotovili smo, da za počasne preklope te skalirajo potenčno s hitrostjo preklopa z nenavadnimi potencami, ki so odvisne od intervala, preko katerega izvajamo preklop. Potenčni zakon smo opazili tudi pri skaliranju maksimalnih zasedenih energij po koncu preklopa, kjer smo opazili približno korensko odvisnost od hitrosti preklopa. Videli smo, da v točki faznega prehoda časovno razvito stanje iz valenčnega pasu praviloma preide v le dve različni stanji v prevodnem pasu z enako verjetnostjo ali pa ostane v prevodnem pasu v kiralmem partnerju enega izmed teh dveh stanj. To smo idejno razložili s preslikavo na XX model. Poglobljena analiza lastnosti našega modela preko te preslikave bi lahko bila dobro izhodišče za nadaljnje raziskave. SE NADALJUJE

Poglavlje 6. Zaključek

Poglavlje 7

Literatura

- [1] A. del Campo in W. H. Zurek, *Universality of phase transition dynamics: Topological defects from symmetry breaking*, International Journal of Modern Physics A **29**, 1430018 (2014).
- [2] A. R. L. Ulčakar, J. Mravlje in T. Rejec, *Slow quenches in two-dimensional time-reversal symmetric Z_2 topological insulators*, Physical Review B **97**, 10.1103/physrevb.97.195127 (2018).
- [3] J. M. L. Ulčakar in T. Rejec, *Slow quenches in Chern insulator ribbons*, Physical Review B **100**, 10.1103/physrevb.100.125110 (2019).
- [4] J. M. L. Ulčakar in T. Rejec, *Kibble-Zurek behavior in disordered Chern insulators* (2020), arXiv:2003.08439 [cond-mat.str-el].
- [5] J. R. S. W. P. Su in A. J. Heeger, *Solitons in Polyacetylene*, Phys. Rev. Lett. **42**, 1698 (1979).
- [6] N. W. Ashcroft in N. D. Mermin, *Solid state physics*, 1. izd., Solid State Physics (Holt, Rinehart and Winston, 1976).
- [7] A. Hatcher, *Algebraic topology*, 1. izd. (Cambridge University Press, 2001).
- [8] L. O. J. K. Asbóth in A. P. (auth.), *A Short Course on Topological Insulators: Band Structure and Edge States in One and Two Dimensions*, 1. izd., Lecture Notes in Physics 919 (Springer International Publishing, 2016).
- [9] N. Batra in G. Sheet, *Understanding Basic Concepts of Topological Insulators Through Su-Schrieffer-Heeger (SSH) Model* (2019), arXiv:1906.08435 [cond-mat.mes-hall].
- [10] B.-H. Chen in D.-W. Chiou, *An elementary rigorous proof of bulk-boundary correspondence in the generalized Su-Schrieffer-Heeger model*, Physics Letters A **384**, 126168 (2020).
- [11] J. P. Elliott in P. G. D. (auth.), *Symmetry in Physics: Volume 1: Principles and Simple Applications* (Macmillan Education UK, 1979).
- [12] C. Guan in X. Guan, *A brief introduction to Andesron Localization* (2019).

Poglavlje 7. Literatura

- [13] Y. L. L. (Eds.), *The Special Functions and Their Approximations*, Mathematics in Science and Engineering 53, Part 1 (Academic Press, Elsevier, 1969).
- [14] J. R. Norris, *Markov chains*, 1. izd., Cambridge series on statistical and probabilistic mathematics (Cambridge University Press, 1998).
- [15] T. P. Eggarter in R. Riedinger, *Singular behavior of tight-binding chains with off-diagonal disorder*, Phys. Rev. B **18**, 569 (1978).
- [16] G. R. Grimmett in D. R. Stirzaker, *Probability and random processes*, 3. izd. (Oxford University Press, 2001).
- [17] J. S. I. Mondragon-Shem, T. L. Hughes in E. Prodan, *Topological Criticality in the Chiral-Symmetric AIII Class at Strong Disorder*, Physical Review Letters **113**, 10.1103/physrevlett.113.046802 (2014).
- [18] E. Prodan, *Disordered topological insulators: a non-commutative geometry perspective*, Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical **44**, 113001 (2011).
- [19] K. Sigman, *Stationary sequences and Birkhoff's Ergodic Theorem* (2014).
- [20] R. A. Hyman, K. Yang, R. N. Bhatt in S. M. Girvin, *Random Bonds and Topological Stability in Gapped Quantum Spin Chains*, Physical Review Letters **76**, 839 (1996).