

Universidad de Alicante

FACULTAD DE CIENCIAS

PRÁCTICA 2: PYHTB PARA EL ESTUDIO DE LA APROXIMACIÓN DE ENLACE FUERTE. FASE DE BERRY.

Física Cuántica Avanzada

Gabriel Simón López

2022/2023

Índice

1. Objetivos	2
2. Introducción Teórica	2
2.1. Enlace fuerte	2
2.2. Fase de Berry	2
3. Primer ejercicio	3
4. Segundo ejercicio	4
5. Tercer ejercicio	5
5.1. ¿Qué pasa si cambio el signo de α ?	8
6. Bibliografía	10

1. Objetivos

En esta práctica vamos a usar la librería PythTB en python para estudiar la aproximación de enlace fuerte y su relación con la fase de berry. Para ello realizaremos una breve introducción teórica de los conceptos necesarios para la correcta comprensión de la práctica.

2. Introducción Teórica

2.1. Enlace fuerte

La aproximación de enlace fuerte es un método de cálculo en la Física del Estado Sólido que se utiliza para describir la estructura electrónica de los materiales. Esta aproximación se basa en la idea de que los electrones en un sólido están fuertemente ligados a los iones del cristal y que los orbitales atómicos se combinan para formar orbitales moleculares que se extienden por todo el sólido.

En la aproximación de enlace fuerte, se supone que los electrones están localizados cerca de los iones del cristal y que la interacción entre ellos es más fuerte que la interacción con los electrones de los iones vecinos. En consecuencia, los orbitales atómicos de los iones vecinos se superponen y se combinan para formar nuevos orbitales moleculares que se extienden por todo el sólido.

Estos orbitales moleculares se agrupan en bandas de energía, que pueden estar parcial o totalmente llenas de electrones. El comportamiento de los electrones en estas bandas determina muchas de las propiedades electrónicas de los materiales, como la conductividad eléctrica y térmica, la absorción de luz y las propiedades magnéticas.

2.2. Fase de Berry

La fase de Berry se manifiesta como un cambio de fase en la función de onda de un sistema cuántico cuando se realiza una transformación adiabática de los parámetros externos que lo rodean. Es decir, si el sistema se lleva de vuelta a su estado inicial después de una transformación lenta y suave de los parámetros, la fase geométrica de Berry se acumula y se puede medir como una diferencia de fase en la función de onda.

Este fenómeno es importante en la física de materiales, la teoría de la información cuántica y otras áreas de la física cuántica. La fase geométrica de Berry puede ser una herramienta útil para controlar y manipular los estados cuánticos en diferentes aplicaciones, desde el diseño de nuevos materiales hasta la computación cuántica.

La relación entre la fase de Berry y la aproximación de enlace fuerte surge porque la fase de Berry puede tener una influencia significativa en la estructura electrónica de los materiales. En particular, la fase de Berry puede dar lugar a efectos cuánticos como la anomalía del efecto Hall cuántico y la ruptura espontánea de simetría en los materiales topológicos. Estos efectos a menudo se pueden entender en términos de la teoría de bandas de la aproximación de enlace fuerte.

3. Primer ejercicio

El primer caso analizaremos una fila de átomos en 1D. Con $r_\alpha = r_1 = 0$, $i = 1$ y cuyo Hamiltoniano en el k-espacio es $H^k = \sum e^{iK \cdot R} H(R) = -t(e^{iK \cdot \hat{x}} + e^{-iK \cdot \hat{x}}) = -2t \cos k$, teniendo en cuenta que $H(R = \pm \hat{x} = -t)$ $H(R \neq \pm \hat{x} = 0)$.

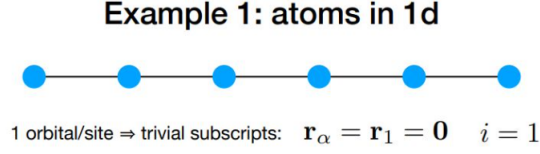


Figura 1: Red unidimensional de átomos

Tal y como se puede ver en el código que se adjunta a este informe, definiremos los vectores y la dimensionalidad de la red, tras esto colocaremos los átomos con sus orbitales en la posición deseada y definiremos el salto que queremos que se produzca entre ellos. De esta manera representaremos los saltos dados en la red y el espectro de energías producido:

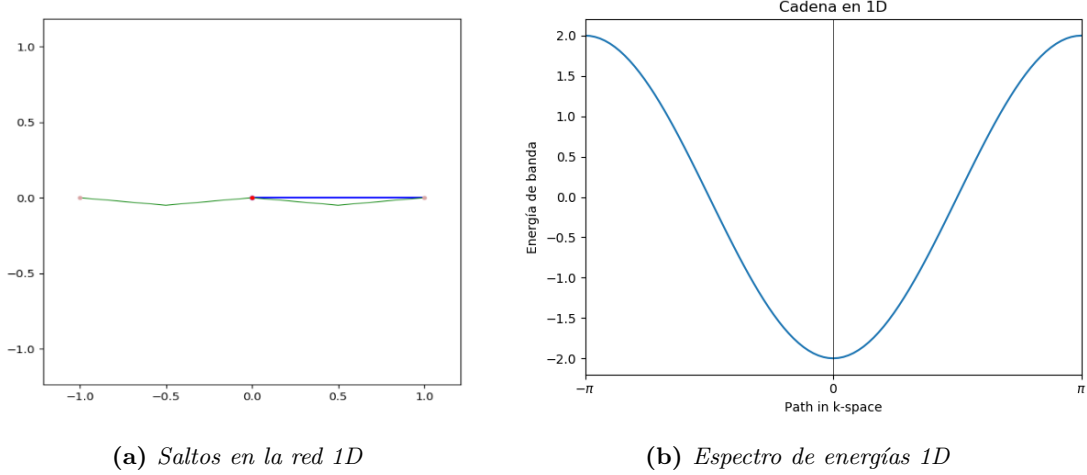


Figura 2: Red 1D

En el gráfico 2a podemos observar los saltos realizados en la simulación, de tal manera, que como cabría esperar, estos se realizan en horizontal.

Al resolver el modelo con el hamiltoniano propuesto obtendremos el espectro de energías en el k-espacio 3, el cual nos proporciona el gráfico 2b, en el cual podemos observar que existe un mínimo de energía en la posición de nuestro orbital. Que como podemos ver en la expresión 3, con $t = 1$ al tratarse de un coseno entre $-\pi$ y π , tendremos sus máximos en esos valores siendo su mínimo en el 0, ya comentado anteriormente.

4. Segundo ejercicio

En este caso analizaremos un cuadrado en 2D. Su hamiltoniano en el k -espacio será: $H^k = -2t(\cos k_x + \cos k_y)$. Con

$$H(R) = \begin{cases} -t, & \text{si } R = \pm\hat{x}, \pm\hat{y} \\ 0, & \text{en otro caso} \end{cases} \quad (1)$$

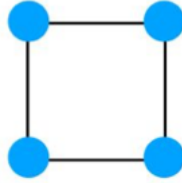


Figura 3: Red cuadrada

En este segundo ejemplo definimos una red en 2D en forma de cuadrado, en el que además de lo realizado en el apartado anterior, hemos cambiado el camino de los saltos para que se realicen de la forma deseada 3. Análogamente al ejercicio anterior obtendremos una gráfica que representa los saltos dados en la red y otra que representa el espectro de energías producido:

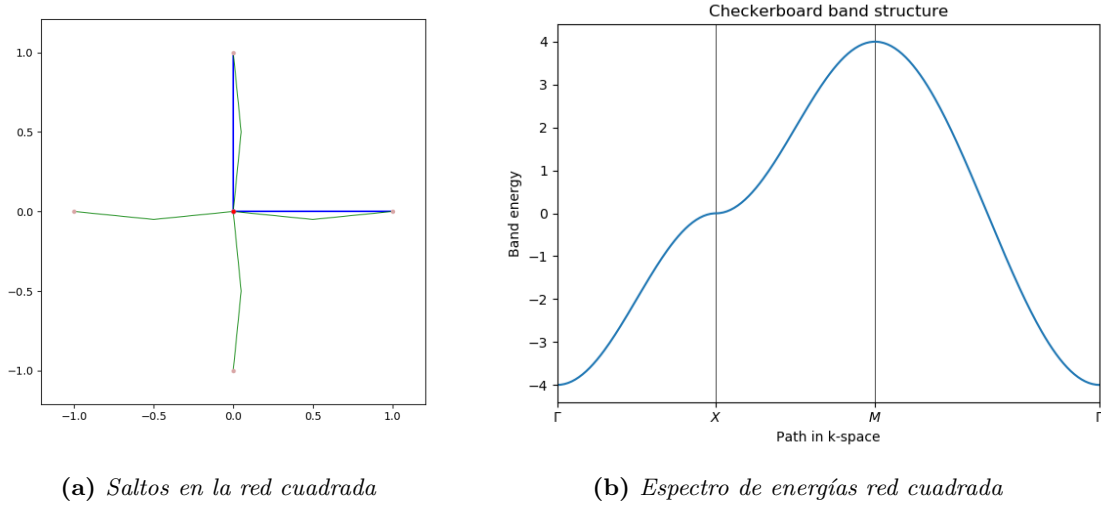


Figura 4: Red cuadrada 2D

En la gráfica 4b podremos ver la resolución del hamiltoniano en el k -espacio propuesto, de tal manera que podemos ver como partimos de un mínimo en la posición \mathbf{R} , la cual es el $(0,0)$, y aumenta hasta el valor 0 en la posición \mathbf{X} , la cual será el $(0,1)$. Sigue aumentando hasta alcanzar un máximo en la posición \mathbf{M} ya que se hace máximo el coseno de la expresión del hamiltoniano y, finalmente vuelve a la posición \mathbf{R} , volviendo así a ser mínimo de nuevo.

5. Tercer ejercicio

Por último analizaremos el caso de una molécula triatómica sometida al ciclo de distorsiones dadas por:

$$t_{01} = t_0 + s \cdot \cos \phi \quad (2)$$

$$t_{12} = t_0 + s \cdot \cos \phi - 2\pi/3 \quad (3)$$

$$t_{20} = t_0 + s \cdot \cos \phi - 4\pi/3 \quad (4)$$

Con $t_0 = -1$ y $s = -0,4$.

Usaremos el código proporcionado en la práctica, el cual también se adjuntará en la entrega del informe.

Estudiaremos dos casos uno en el que calcularemos la fase de Berry para el estado de mínima energía de esta molécula 5 y otro en el que multiplicaremos uno a uno los distintos t_{ij} por $e^{i\alpha}$ que equivale al paso de una fracción $\alpha/2\pi$ 6.

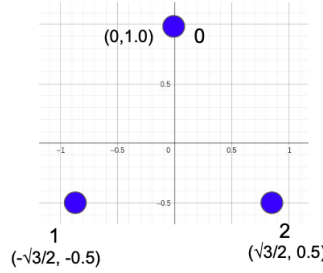


Figura 5: Ciclo parametrizado de la molécula en mínima energía.

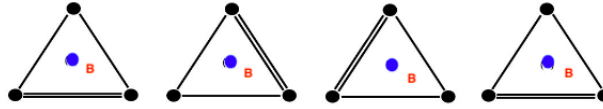


Figura 6: Ciclo parametrizado de la molécula en con flujo magnético a través.

El hamiltoniano asociado al sistema anterior, será el descrito por la siguiente ecuación:

$$H = \sum \epsilon_0 |i\rangle \langle i| = t_{01}[|0\rangle \langle 1| + |1\rangle \langle 0|] + t_{12}[|1\rangle \langle 2| + |2\rangle \langle 1|] + t_{20}[|2\rangle \langle 0| + e^{-i\beta} |0\rangle \langle 2|] \quad (5)$$

Tras expresar el hamiltoniano en forma matricial y la posterior diagonalización de este, hallaremos cuales son los valores propios de energía y los vectores propios, los cuales serán los autoestados del problema, los cuales dependerán de las variables α y β . Que usando las expresiones siguientes podremos calcular sus valores:

$$A_{n,\beta} = \langle n, \beta, \phi | \frac{\partial}{\partial \beta} | n, \beta, \phi \rangle \quad (6)$$

$$A_{n,\phi} = \langle n, \beta, \phi | \frac{\partial}{\partial \phi} | n, \beta, \phi \rangle \quad (7)$$

Posteriormente, a partir de los valores $A_{n,\phi}$ y n, β , podremos calcular el valor de las fases de Berry a partir de las siguientes expresiones:

$$\gamma(\phi) = \oint A_{n,\phi}(\beta, \phi) d\phi \quad (8)$$

$$\gamma(\beta) = \oint A_{n,\beta}(\beta, \phi) d\beta \quad (9)$$

Estos cálculos o bien se pueden realizar de forma numérica o computacional, en nuestro hemos usado la librería PythTB, la cual proporciona los siguientes comandos:

- **pythtb.wf_array(model, mesh_arr, nsta_arr=None):** esta clase sirve para almacenar y manipular funciones de onda del pythtb.tb_model
- **pythtb.wf_array.berry_phase:** que calcula la fase de Berry a lo largo de una dirección de matriz dada y para un conjunto de estados dado. Sustituyendo el cálculo numérico de 8 y 9.
- **pythtb.wf_array.berry_flux(occ='All', dirs=None, individual_phases=False):** que en el caso de una matriz bidimensional, wf_array calcula la integral de la curvatura de Berry en todo el plano. Si individual_phases=True devolverá un valor de la curvatura de Berry por cada porción del arreglo de funciones de onda sobre el que se aplica.
- **pythtb.wf_array.impose_loop(mesh_dir):** que si el usuario sabe que el primer y el último punto a lo largo de la dirección mesh_dir corresponden al mismo hamiltoniano (esto no está marcado), entonces esta rutina se puede usar para igualar los vectores propios (con la misma fase), reemplazando el último vector propio con el primero (para cada banda, y para cada otra dirección de malla, si las hay).

Primero analizaremos el caso en el multiplicamos uno a uno los distintos t_{ij} por $e^{i\alpha}$ que equivale al paso de una fracción $\alpha/2\pi$.

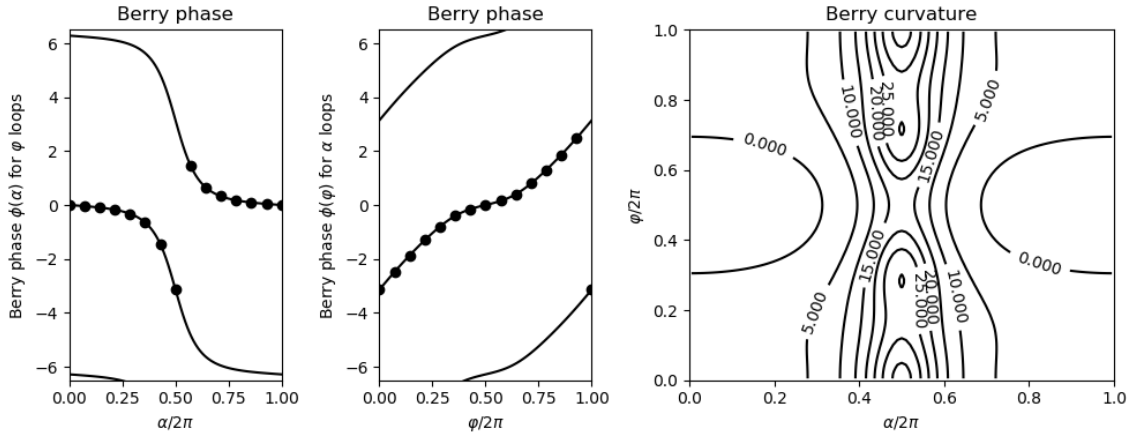


Figura 7: Fase de Berry en función de α , en función de ϕ y la curvatura de Berry aplicada a t_{01}

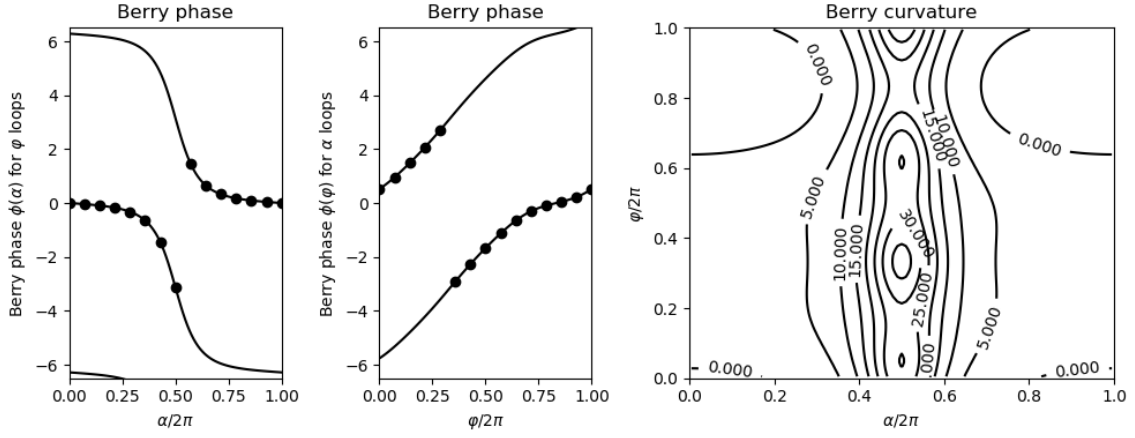


Figura 8: Fase de Berry en función de α , en función de ϕ y la curvatura de Berry aplicada a t_{12}

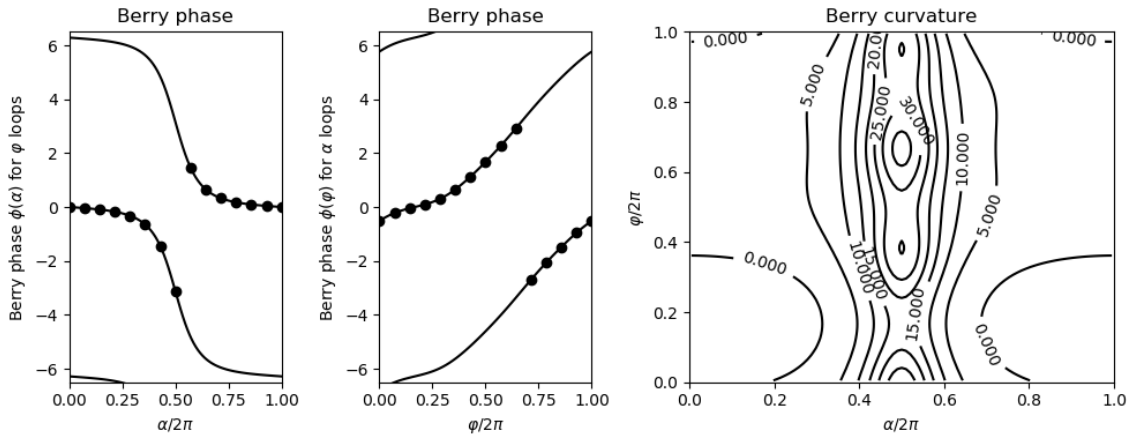


Figura 9: Fase de Berry en función de α , en función de ϕ y la curvatura de Berry aplicada a t_{20}

En las dos primeras gráficas podemos ver representado los valores numéricos calculados en puntos y además una línea continua que nos aproxima la forma de la fase de Berry, en donde se encuentran representados una cantidad definida de puntos que representan las distintas fases de Berry entre el intervalo $[-\pi, \pi]$. Analizaremos únicamente uno de los valores de n , ya que la variación de la fase de Berry es la misma tomemos el autovector que tomemos.

En la primera gráfica de las tres figuras 7, 8, 9, veremos que la representación con los valores continuos empieza en cero decrece hasta llegar al valor -2π , lo que significará que su número de Chern tenderá a -1, debido a que este se trata de la fase geométrica de la fase de berry. Observamos como la disminución ocurre de manera abrupta cuando se acerca al valor de π , salta abruptamente $+2\pi$ y vuelve a decrecer a 0 cuando la variable se acerca al valor 2π .

En la segunda gráfica veremos que conforme aumentamos el valor de ϕ la fase de Berry aumenta, acercándose al valor 2π cuando la variable se acerca al valor de 2π . De esta forma, podemos afirmar que para este caso, el valor del número de Chern debe de ser 1, ya que el número de Chern es un factor de fase métrica geográfica asociada con el punto de degeneración singular, es decir, el número de Chern será 2π multiplicado a la densidad de la fase de Berry.

En el caso de spin $1/2$ tenemos que ese punto de degeneración singular esta únicamente degenerado, y de ahí que el valor del número de Chern fuera 1, de manera que para este caso que el número vale lo mismo, tendremos de nuevo una degeneración singular que está únicamente degenerado.

En la tercera gráfica se encontrará graficada la curvatura de Berry, la cual se calcula o bien con el comando 5 o resolviendo 6. En donde al estar multiplicando por un factor $e^{i\alpha}$ estaremos variando el campo magnético y obtendremos un valor complejo en los elementos del hamiltoniano.

En el caso del cálculo explícito de la fase de Berry en los tres casos es de -0.079, esto es debido a que como estamos aplicando el mismo factor a una molécula simétrica, no importa en cual de las partículas empecemos.

Dado que con el método `berry.flux(individual_phases=false)` calculamos el número de Chern* 2π , que en las gráficas hemos visto la variación de la fase de Berry entre el inicio y el final del recorrido de 0 a 2π , podemos calcular explícitamente la variación de este número de Chern con los outputs del programa dividiéndolo por un factor 2π .

Para el caso de la mínima energía 5 tendremos las siguientes gráficas:

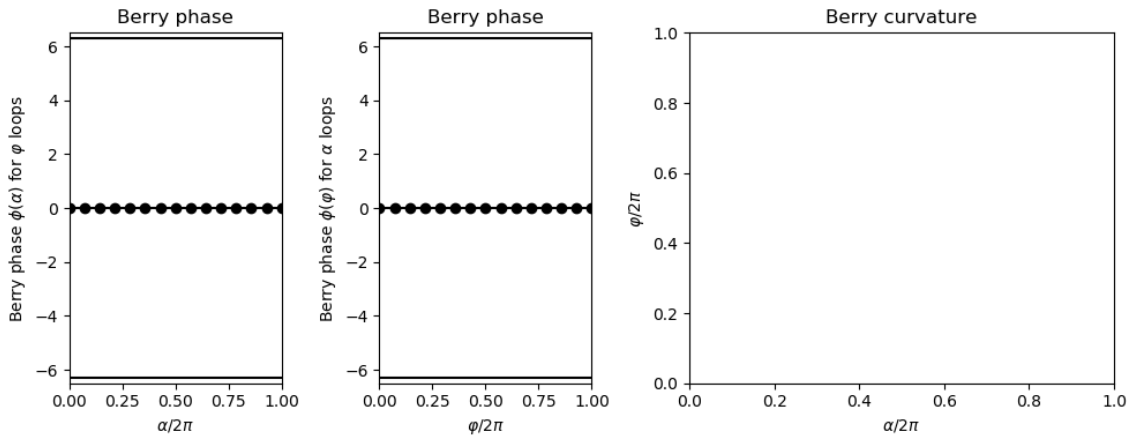


Figura 10: Fase de Berry en función de α , en función de ϕ y la curvatura de Berry.

En este caso la fase de Berry en las dos primeras gráficas es 0, ya que como no estamos multiplicando ningún salto por la fase los elementos que forman la matriz del Hamiltoniano son todos reales 11, por lo que las autofunciones también lo serán y por tanto, la fase de Berry será nula. Por último comentar que, dado que la fase de Berry es nula, la curvatura de Berry también lo será, por lo que no se grafica nada.

```
site energies:
# 0 ==> 0.0
# 1 ==> 0.0
# 2 ==> 0.0
hoppings:
< 0 | H | 1 > ==> -1.4 + 0.0 i
< 1 | H | 2 > ==> -0.8 + 0.0 i
< 2 | H | 0 > ==> -0.8 + 0.0 i
hopping distances:
| pos( 0 ) - pos( 1 ) | = 1.7321
| pos( 1 ) - pos( 2 ) | = 1.7321
| pos( 2 ) - pos( 0 ) | = 1.7321
Explicitly computed phi Berry phase at alpha=pi/4 is -0.000
```

Figura 11: Output caso mínima energía

5.1. ¿Qué pasa si cambio el signo de α ?

”Cuando un sólido posee topología no trivial, esta está caracterizada por un factor de fase no dinámico que surge en los autoestados del Hamiltoniano al recorrer adiabáticamente en un espacio de parámetros, una trayectoria cerrada [2]. Este espacio de parámetros puede estar conformado por diferentes magnitudes físicas, como un campo magnético, eléctrico, flujo, etc.” (Pág 4 Barceló Rubio, Victor (2018). Aislantes Topológicos.)

”Esta fase añade al sistema físico un grado de libertad con estructura $U(1)$ mediante un factor $e^{i\alpha}$ y es análoga al resultado obtenido en la experiencia de Aharonov y Bohm[3]. Ahí, la fase obtenida depende

únicamente del flujo magnético encerrado por la trayectoria recorrida, y por tanto, del gauge escogido para el potencial electromagnético. En el caso de Berry, la fase depende únicamente del cambio en los autoestados cuando se recorre una trayectoria cerrada en el espacio de parámetros.” (Pág 4 Barceló Rubio, Victor (2018). Aislantes Topológicos.)

De tal manera que por ser la fase de Berry invariante, no depende del comportamiento de la fase a lo largo del camino de integración.

6. Bibliografía

- [1] <https://www.ucm.es/data/cont/media/www/pag-17833/Guiones20Fisica20del20Estado20Solido20I.pdf>
- [2] M. V. Berry. Proceedings of the Royal Society of London Series A, 392:45–57, March 1984.
- [3] Y. Aharonov and D. Bohm. Physical Review, 115:485–491, August 1959.
- [4] de Grado, T. de F. (2018). Aislantes Topológicos. Unizar.es. <https://zaguan.unizar.es/record/69202/files/TAZ-TFG-2018-155.pdf>