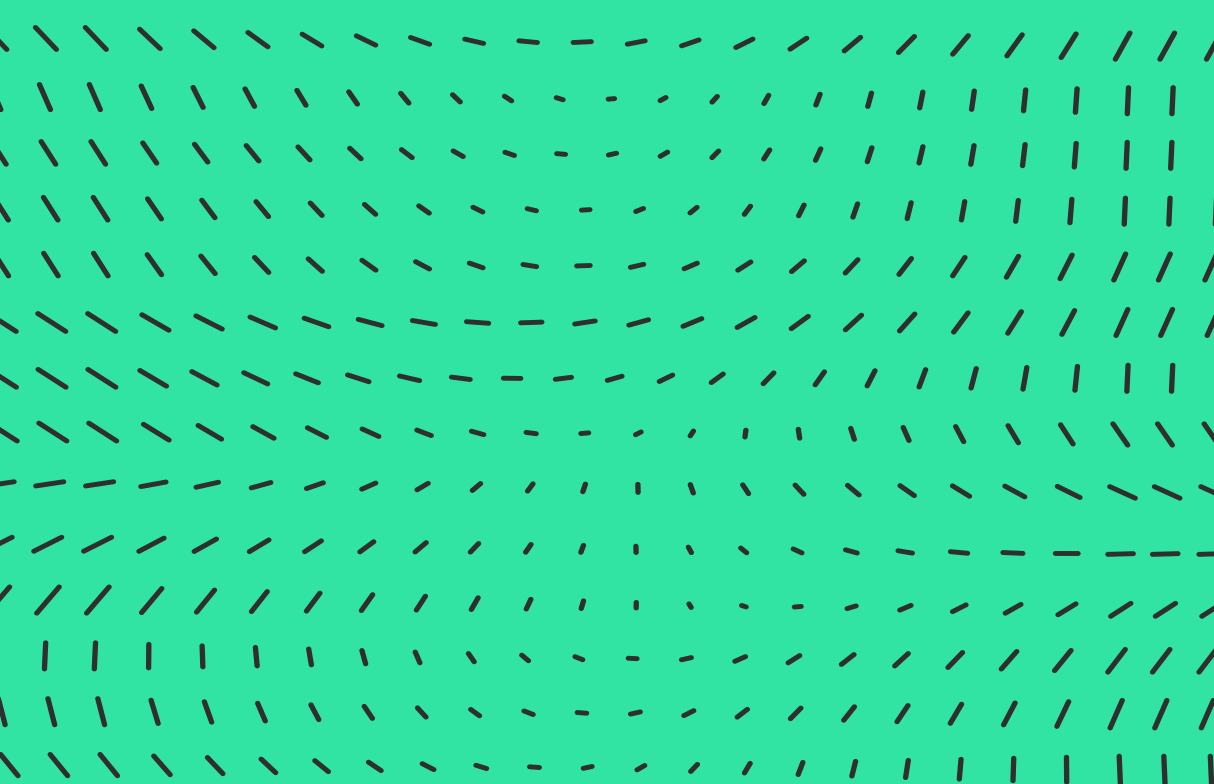
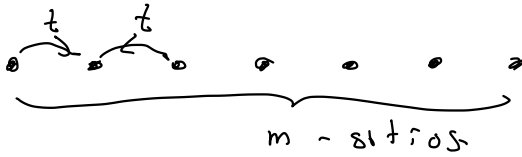


Tight-binding en 1D

Ejemplos sencillos y SSH



Consideremos una partícula en 1D, sujeta a un potencial periódico, con condiciones periódicas a la frontera



El Hamiltoniano del sistema es

$$\hat{H} = -t \left(\sum_{i=1}^m \hat{b}_{i+1}^\dagger \hat{b}_i + \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_{i+1} \right), \text{ donde } \hat{b}_i \text{ y } \hat{b}_i^\dagger \text{ son los}$$

operadores de aniquilación y creación en el sitio i , aquí $|N_1, N_2, \dots, N_j, \dots, N_m\rangle$ es la base de números de ocupación de cada sitio.

Claramente, \hat{H} no es diagonal en esta base.

Introducimos

$$\hat{b}_j = \frac{1}{\sqrt{m}} \sum_{\ell} \hat{b}_{\ell} e^{i p_{\ell} a j}$$

donde $p_{\ell} = -\frac{\pi}{2} + \frac{2\pi}{am} \ell$ con $\ell \in (0, m)$, siendo $m \in \mathbb{N}_+$

$$\hat{b}_j^\dagger = \frac{1}{\sqrt{m}} \sum_{\ell} \hat{b}_{\ell}^\dagger e^{-i p_{\ell} a j}, \text{ en esta base}$$

por simplicidad se denota $p_{\ell} \equiv p$, Entonces

$$\begin{aligned} \hat{H} = & -t \sum_{j=1}^m \left[\left(\frac{1}{\sqrt{m}} \sum_p \hat{b}_p^\dagger e^{-i p a (j+1)} \right) \left(\frac{1}{\sqrt{m}} \sum_{p'} \hat{b}_{p'} e^{i p' a j} \right) + \right. \\ & \left. + \left(\frac{1}{\sqrt{m}} \sum_{p'} \hat{b}_{p'}^\dagger e^{-i p' a j} \right) \left(\frac{1}{\sqrt{m}} \sum_p \hat{b}_p e^{i p a (j+1)} \right) \right] = \end{aligned}$$

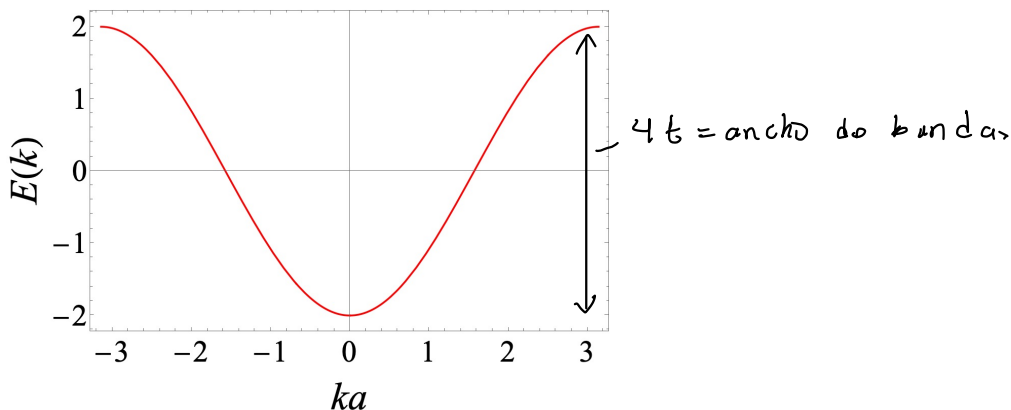
$$= -t \sum_{p,p'} \left[\underbrace{\left(\frac{1}{m} \sum_j e^{i(p'-p)ja} \right)}_{\delta_{p,p'}} e^{ipa} \hat{b}_p^\dagger \hat{b}_{p'} + \underbrace{\left(\frac{1}{m} \sum_j e^{-i(p'-p)ja} \right)}_{\delta_{p,p'}} e^{ipa} \hat{b}_{p'}^\dagger \hat{b}_p \right]$$

$$> -t \sum_p (e^{-ipa} + e^{ipa}) \hat{b}_p^\dagger \hat{b}_p = -2t \sum_p \cos(pa) \hat{b}_p^\dagger \hat{b}_p$$

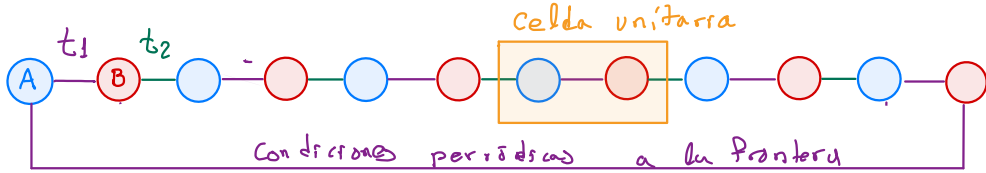
$$= -2t \sum_p \cos(pa) \hat{N}_p = \sum_p E(p) \hat{N}_p$$

En este caso, el Hamiltoniano es diagonal en la base $|N_0, \dots, N_p, \dots\rangle$ del espacio recíproco.

A $E(p) = -2t \cos(pa)$ se le conoce como **relación de dispersión**.



El modelo Su-Schrieffer-Heger (SSH) inicialmente para describir tunelaje de electrones en una red con dos tipos de sitios: A y B. El tunelaje, es alternado.



El Hamiltoniano del sistema es:

$$\hat{H} = - \underbrace{t_1 \sum_j (\hat{a}_j^\dagger \hat{b}_j + \hat{b}_j^\dagger \hat{a}_j)}_{\text{tunelaje en la misma celda unitaria}}$$

$$- \underbrace{t_2 \sum_j (\hat{a}_{j+1}^\dagger \hat{b}_j + \hat{b}_j^\dagger \hat{a}_{j+1})}_{\text{tunelaje entre celdas unitarias adyacentes}}$$

donde \hat{a}_j crea un electrón en el sitio (j, A), y

\hat{b}_j crea un electrón en el sitio (j, B).

Escribimos $\hat{a}_j = \frac{1}{\sqrt{m}} \sum_p e^{ipj} \hat{a}_p$ y $\hat{b}_j = \frac{1}{\sqrt{m}} \sum_p e^{ipj} \hat{b}_p$

$$\hat{H} = - t_1 \sum_{p,p'} \left[\left(\sum_j e^{i(p'-p)ja} \frac{1}{m} \right) \hat{a}_p^\dagger \hat{b}_{p'} + \left(\sum_{j'} e^{i(p-p')ja} \frac{1}{m} \right) \hat{b}_{p'}^\dagger \hat{a}_{p'} \right]$$

$$- t_2 \sum_{p,p'} \left[\left(\sum_j e^{i(p'-p)ja} \frac{1}{m} \right) e^{ipa} \hat{a}_p^\dagger \hat{b}_{p'} + \left(\sum_{j'} e^{i(p-p')ja} \frac{1}{m} \right) \hat{b}_{p'}^\dagger \hat{a}_p \right]$$

$$\begin{aligned}
 &= -t_1 \sum_p \left(\hat{a}_p^\dagger \hat{b}_p + \hat{b}_p^\dagger \hat{a}_p \right) - t_2 \sum_p \left(e^{ipa} \hat{a}_p^\dagger \hat{b}_p + e^{-ipa} \hat{b}_p^\dagger \hat{a}_p \right) \\
 &= \sum_p \begin{bmatrix} \hat{a}_p^\dagger & \hat{b}_p^\dagger \end{bmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -t_1 - t_2 e^{ipa} \\ -t_1 - t_2 e^{-ipa} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{a}_p \\ \hat{b}_p \end{pmatrix}
 \end{aligned}$$

$$= \sum_p \begin{bmatrix} \hat{a}_p^\dagger & \hat{b}_p^\dagger \end{bmatrix} \cdot \hat{h}(\bar{p}) \begin{pmatrix} \hat{a}_p \\ \hat{b}_p \end{pmatrix}$$

ek
0:
=
-2*
Co
s[k]

$$\text{con } \hat{h}(p) \begin{pmatrix} 0 & -t_1 - t_2 e^{ipa} \\ -t_1 - t_2 e^{-ipa} & 0 \end{pmatrix} = \vec{h}(p) \cdot \hat{\sigma}$$

con $\hat{\sigma} = (\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z)$, con $\hat{\sigma}_0$ la identidad de 2×2 , y $\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z$ las matrices de Pauli.

Vemos que $h_0(p) = 0$, $h_z(p) = 0$, y

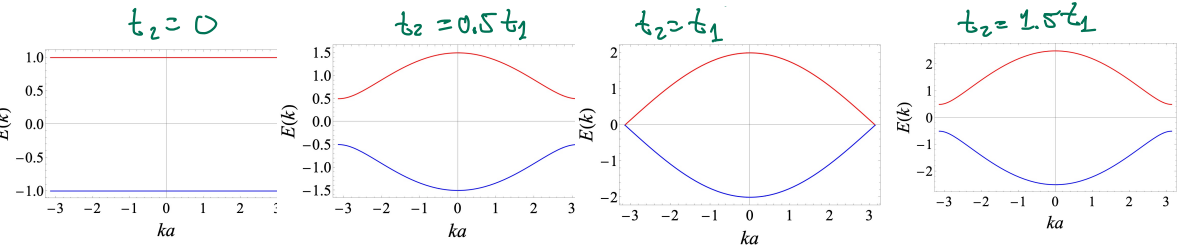
$$h_x(p) = -t_1 - t_2 \cos(pa)$$

$$h_y(p) = -t_2 \sin(pa)$$

Por otro lado, los eigenestados del sistema son

$$\begin{aligned}
 E_{\pm}(p) &= \pm |h(p)| = \pm \sqrt{h_x^2(p) + h_y^2(p)} = \pm \sqrt{(t_1 + t_2 \cos pa)^2 + t_2^2 \sin^2 pa} \\
 &= \pm \sqrt{t_1^2 + t_2^2 \cos^2 pa + 2t_1 t_2 \cos pa + t_2^2 \sin^2 pa} = \\
 &= \pm \sqrt{t_1^2 + t_2^2 + 2t_1 t_2 \cos(pa)}
 \end{aligned}$$

Gráfiquemos las energías para los casos relevantes



Claramente
si $t_2 = 0$ entonces
no se pueden
mover los electrones
de celda a
celda.

arabunde
con una
brecha.

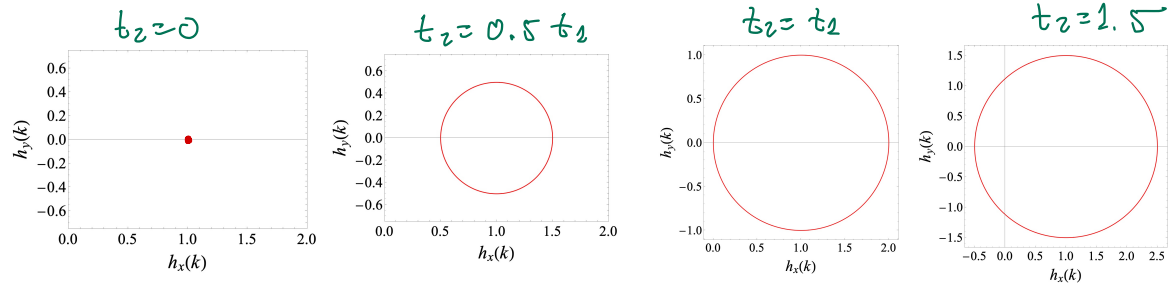
Se tocan las
bandas en
 $ka = \pi$

Se vuelve
a abrir
la brecha.

Para los mismos casos, graficamos de forma paramétrica

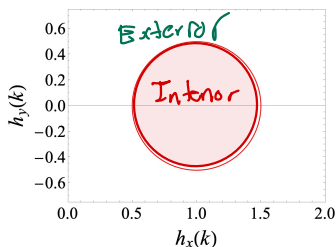
$$h_x(p) = t_1 + t_2 \cos(pa)$$

$$h_y(p) = t_2 \sin(pa)$$



Vemos que cuando $t_2 < t_1$, el círculo que dibuja
de forma paramétrica h_x y h_y no cruza el origen.

Winding number



el infinito. Cada que cruce del exterior al

interior, sumamos 1,
y cada que la línea cruce del interior al exterior sumamos -1

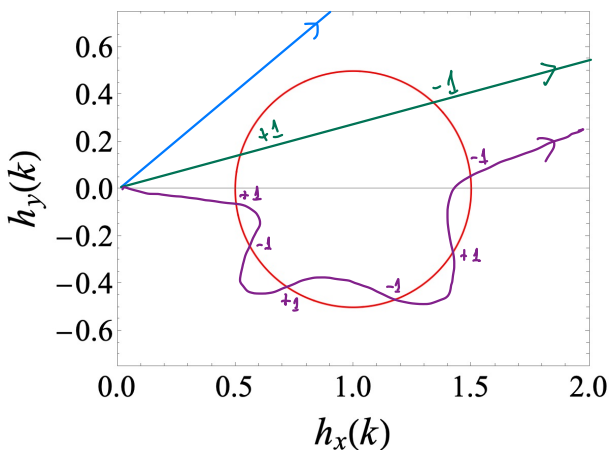
Para el ejemplo que graficamos

$$W = 0$$

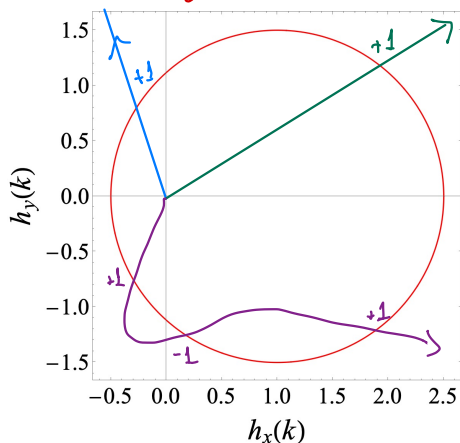
$$W = 1 + (-1)$$

$$W = 1 + (-1) + 1 + (-1) + (-1) + (-1) = 0$$

Cualquier línea tiene $w=0$
si $t_1 > t_2$



Para $t_2 > t_1$



Para $t_2 > t_1$, vemos que repitiendo el procedimiento

$$W = 1$$

$$W = 1$$

$$W = 1 + 1 + (-1)$$

Todas las líneas tienen $w=1$

Matemáticamente, el winding number se define como

$$w = \frac{1}{2\pi i} \oint dp A(p) \quad \text{con} \quad A(p) = i \langle \Psi_-(p) | \partial_p \Psi_-(p) \rangle$$

con $|\Psi_-(p)\rangle$, el eigenestado de $\hat{h}(p)$ con menor energía.

Escribiendo a $\hat{h}(p) = -\vec{h}(p) \cdot \vec{\sigma}$, escribiendo a

$\vec{h}(p) = |\vec{h}(p)| (\cos \phi_p \sin \Theta_p, \sin \phi_p \sin \Theta_p, \cos \Theta_p)$, entonces

$$|\Psi_-(p)\rangle = \begin{pmatrix} \cos \Theta_p/2 \\ \sin \Theta_p/2 e^{-i\phi_p} \end{pmatrix};$$

Tight-binding: SSH y modelos sencillos

Representación de cadenas finitas. Consideremos una cadena finita con N celdas unitarias, es decir, $2N$ sitios



condiciones abiertas a la frontera

Queremos representar al Hamiltoniano

$$\hat{H} = -t_1 \sum_i (\hat{a}_i \hat{b}_i + \hat{b}_i \hat{a}_i) - t_2 \sum_i (\hat{a}_{i+1} \hat{b}_i + \hat{b}_i \hat{a}_{i+1})$$

en la base de número de ocupación la cual es orthonormal como

$$|N_1^{(A)}, N_2^{(B)}, N_2^{(A)}, N_2^{(B)}, N_3^{(A)}, \dots, N_n^{(A)}, N_m^{(B)}\rangle, \text{ si consideramos un}$$

solo electrón en la cadena, entonces, los números de ocupación relevantes son:

$$\left. \begin{array}{l} |1, 0, 0, \dots, 0\rangle \equiv |1\rangle \\ |0, 1, 0, \dots, 0\rangle \equiv |2\rangle \\ |0, 0, 1, \dots, 0\rangle \equiv |3\rangle \\ \vdots \\ |0, \dots, 0, 1\rangle \equiv |2N\rangle \end{array} \right\} \begin{array}{l} 2N \text{ estados los} \\ \text{cuales renombramos como} \\ |1\rangle, |2\rangle, \dots, |2N\rangle \end{array}$$

Vemos que los únicos elementos de matriz $\langle i | \hat{H} | j \rangle$ distintos de cero son:

$$-t_1 = \langle 2i-1 | \hat{H} | 2i \rangle = \langle 2i | \hat{H} | 2i-1 \rangle, \text{ para } i=1, \dots, N$$

$$-t_2 = \langle 2i+1 | \hat{H} | 2i \rangle = \langle 2i | \hat{H} | 2i+1 \rangle, \text{ para } i=1, \dots, N-1$$

Tight-binding: SSH y modelos sencillos

```
function SSH_Hamiltonian
```

```
%Numero de celdas unitarias  
N=20;
```

```
t1=1;  
contador=0;  
for l=1:100
```

```
    t2=2*t1*l/100;
```

```
    for i=1:N
```

```
        h(2*i-1,2*i)=-t1;
```

```
        h(2*i,2*i-1)=-t1;
```

```
        if(i<N)
```

```
            h(2*i+1,2*i)=-t2;
```

```
            h(2*i,2*i+1)=-t2;
```

```
        end
```

```
        eigeval=eig(h);
```

```
    end
```

```
    for m=1:2*N
```

```
        contador=contador+1
```

```
        eigenvalue(contador,1)=t2;
```

```
        eigenvalue(contador,2)=eigeval(m);
```

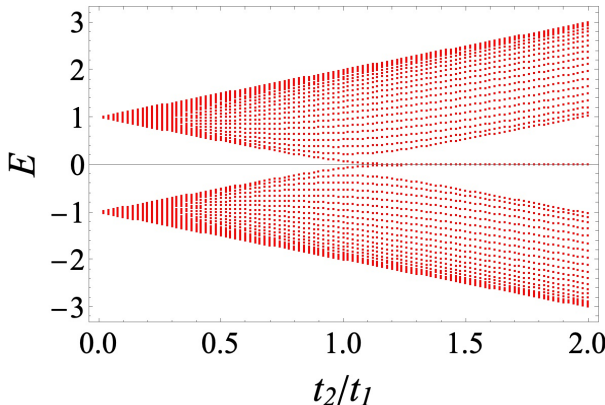
```
    end
```

```
end
```

Este Hamiltoniano es muy fácil de programar, por ejemplo, en Matlab es posible expresar al Hamiltoniano en su forma matricial

Forma matricial de $h(i,j)$

Con ello podemos graficar el espectro de valores propios como función de t_2/t_1 . Vemos que para $t_2 > t_1$ aparecen estados con energía cero



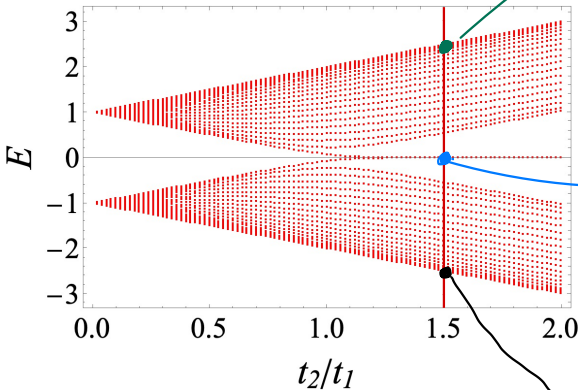
Tight-binding: SSH y modelos sencillos

Para entender mejor la naturaleza de los estados de borde,

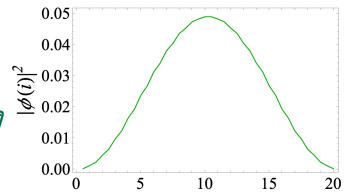
Escribimos a un eigenestado dado

$$|E_n\rangle = \sum_i \phi_n(i) |i\rangle, \text{ con}$$

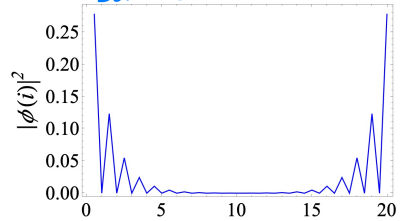
$$\hat{A}|E_n\rangle = E_n|E_n\rangle \text{ eigenestado de } \hat{A}.$$



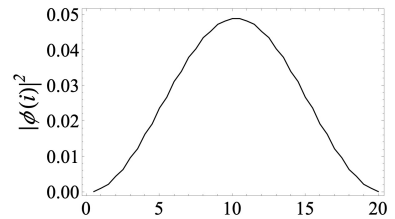
Estado extendido



Estado localizado en los bordes.



Estado extendido

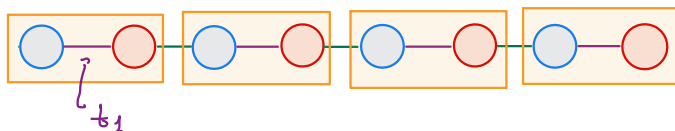


Vemos entonces, que los estados con energía se localizan en los bordes, y decaen rápidamente al alejarnos de los bordes

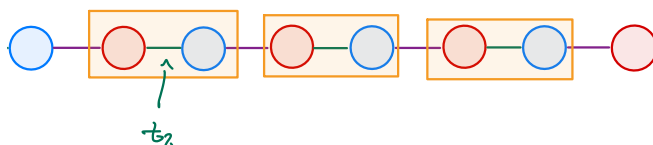
A estos estados con energía cero y localización espacial en los bordes de la cadena, se les conoce como **estados de borde**.

Tight-binding: SSH y modelos sencillos

Para $t_2 < t_1$ el sistema se dimeriza como se ilustra en la figura, en particular, si $t_2 = 0$, entonces se forman dímeros en cada celda unitaria.



Para $t_2 > t_1$ aparecen estados de "borde", en los cuales la dimerización ocurre entre un sitio A y B ligados con t_2 .



Esto da lugar a los dos sitios $i = (1, A)$ y al sitio $i = (N, B)$ sin pareja.

Esto da lugar a los estados con energía cero.

Artículo original
de Su-Schrieffer
y Heger.

VOLUME 42, NUMBER 25

PHYSICAL REVIEW LETTERS

18 JUNE 1979

Solitons in Polyacetylene

W. P. Su, J. R. Schrieffer, and A. J. Heeger

Department of Physics, University of Pennsylvania, Philadelphia, Pennsylvania 19104

(Received 15 March 1979)

We present a theoretical study of soliton formation in long-chain polyenes, including the energy of formation, length, mass, and activation energy for motion. The results provide an explanation of the mobile neutral defect observed in undoped $(CH)_x$. Since the soliton formation energy is less than that needed to create band excitation, solitons play a fundamental role in the charge-transfer doping mechanism.

A la fecha,
el modelo

SSH ha

sido realizado experimentalmente en el contexto de
estado sólido, fotónica, y análisis mecánicos