

اثر برهم کنش اسپین مدار یکنواخت و میدان مغناطیسی یکنواخت بر خواص توپولوژیکی یک نانو سیم یک بعدی کوانتومی

مسعود بهاری و میروحید حسینی

گروه فیزیک، دانشکده علوم، دانشگاه زنجان، زنجان

پست الکترونیکی: mv.hosseini@znu.ac.ir

(دریافت مقاله: ۱۳۹۴/۰۹/۱۱؛ دریافت نسخه نهایی: ۱۳۹۶/۰۳/۰۹)

چکیده

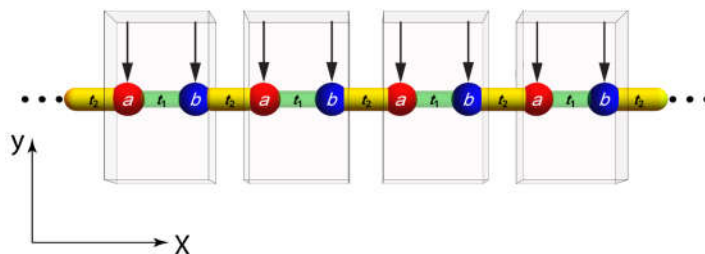
در این مطالعه، به صورت نظری اثر متقابل میان برهم کنش اسپین مدار یکنواخت و میدان زمین یکنواخت بر خواص توپولوژیکی یک نانو سیم یک بعدی که به مدل SSH معروف است، بررسی شده است. سامانه در غیاب میدان مغناطیسی یکنواخت و در حضور برهم کنش اسپین مدار یکنواخت، با توجه به مقادیر پرش ها و شدت برهم کنش اسپین مدار، در فازهای توپولوژیکی بدیهی/ غیر بدیهی قرار می گیرد. در این حالت فازهای توپولوژیک این سامانه با عدد صحیح Z مشخص می شود که با فاز زاگ نوارهای اشغال شده مرتبط است. در فضای فاز سامانه، سه ناحیه وجود دارد که از لحاظ توپولوژیک متفاوت است. دو ناحیه مربوط به فاز توپولوژیک غیر بدیهی و یک ناحیه مربوط به فاز توپولوژیک بدیهی است. با استفاده از میدان مغناطیسی زمین یکنواخت نشان داده شده است که می توان فاز توپولوژیک بدیهی را به فاز توپولوژیک غیر بدیهی تبدیل کرد. تعداد حالت های مرزی توپولوژیکی با انرژی صفر که با تقارن های موجود در سامانه محافظت می شوند، نیز محاسبه شده اند. فازهای توپولوژیک سامانه در حضور برهم کنش های اسپین مدار یکنواخت و میدان مغناطیسی زمین یکنواخت با عدد Z_p مشخص می شود. علاوه بر این، دسته بندی فازهای توپولوژیک سامانه در حضور/ عدم حضور برهم کنش های میدان مغناطیسی زمین یکنواخت با توجه به تقارن های معکوس زمانی، الکترون حفره، کایرال و معکوس فضایی موجود در کلاس BDI قرار می گیرد.

واژه های کلیدی: عایق توپولوژیک یک بعدی، تقریب تنگ بست، برهم کنش اسپین مدار یکنواخت، میدان زمین یکنواخت، فاز زاگ

۱. مقدمه

برای درک و پیش بینی رفتار مواد ایجاد می کند. فازهای توپولوژیک و متعاقبا ناوردهای مربوط با آن که مرتبط با طیف انرژی و ویژه حالت های یک سامانه است، می توانند در سامانه های ماده چگال آشکار شوند. فازهای توپولوژیک به دلیل پایداری در برابر اختلال های محیطی، این پتانسیل را دارند که در محاسبات توپولوژیکی - کوانتومی مورد استفاده قرار گیرند

مطالعات اخیر در زمینه محاسبات و رایانه های توپولوژیکی - کوانتومی بر پایه سامانه های ماده چگال روند رو به افزایشی را نشان می دهد [۱-۵]. پس از کشف اثر کوانتومی هال [۶]، مفهوم توپولوژی بسیار محبوبیت یافت. دسته بندی فازهای الکترونی مطابق با ناوردهای توپولوژیکی ابزار قدرتمندی را



شکل ۱. (رنگی در نسخه الکترونیکی) پیکربندی طرح‌واره سامانه در حضور میدان مغناطیسی زمین. نانو سیم دارای دو زیر شبکه a و b در هر سلول واحد است که دارای پرش درون سلولی t_1 و پرش بین سلولی t_2 است. میدان مغناطیسی زمین در راستای محور y با پیکان سیاه بر زیر شبکه‌های سامانه اعمال شده است.

زمانی، الکترون- حفره، کایرال و معکوس فضایی^۲ در سامانه موجود دارند. حالت‌های مرزی با انرژی صفر، که نشان می‌دهند سامانه در فاز توپولوژیک غیر بدیهی قرار دارد، با شکستن تقارن‌های کایرال و معکوس فضایی مورد مطالعه قرار گرفته اند. در این پژوهش روند مطالعات به این شرح است: در بخش ۱ مدل تنگ بست نانو سیم مورد مطالعه را معرفی می‌کنیم. در بخش ۲ اثر برهم‌کنش اسپین مدار یکنواخت بر فازهای توپولوژیک، در بخش ۳ تقارن‌های ناشی از آن و در بخش ۴ حضور میدان مغناطیسی زمین را در تولید فازهای توپولوژیک نانو سیم بررسی خواهیم کرد. در بخش آخر نتیجه‌گیری پژوهش ارائه شده است.

۲. مدل

نانو سیم مورد مطالعه از یک شبکه یک بعدی از اتم‌ها تشکیل شده است که دارای دو زیر شبکه در هر سلول واحد است (شکل ۱). همچنین، برهم‌کنش اسپین مدار و میدان مغناطیسی زمین در راستای x و y بر نانو سیم اعمال می‌شوند. هامیلتونی سامانه را در نمایش کوانتوم دوم و تقریب تنگ بست به صورت زیر در نظر می‌گیریم،

$$H_{total} = H_{hopping} + H_{Spin-orbit} + H_B,$$

$$H_{hopping} = -\left(\sum_{n,\sigma} t_1 a_{n,\sigma}^\dagger b_{n,\sigma} + \sum_{n,\sigma} t_2 a_{n,\sigma}^\dagger b_{n-1,\sigma}\right) + h.c., \quad (1)$$

$$H_{Spin-orbit} = \lambda \left(\sum_{n,\sigma} a_{n,\sigma}^\dagger b_{n,-\sigma} - \sum_{n,\sigma} a_{n,\sigma}^\dagger b_{n-1,-\sigma}\right) + h.c., \quad (2)$$

[۷-۱۰]. یکی از موادی که می‌تواند میزبان فازهای توپولوژیک باشد، عایق توپولوژیک نام دارد [۱]. عایق توپولوژیک ماده‌ای است که در حجم دارای گاف و در مرزها دارای حالت‌های بدون گافی است که با تقارن‌های موجود در شبکه کریستالی محافظت می‌شوند. در این میان عایق توپولوژیک یک بعدی بسیار مورد توجه قرار گرفته است و به تازگی در این زمینه، حضور شکافتگی زمین و ابرسانایی در یک نانوسیم با برهم‌کنش اسپین مدار [۱۱]، تأثیر تقارن پنهان در یک شبکه تک اتمی [۱۲]، فازهای توپولوژیک در یک شبکه چهار اتمی [۱۳] و حالت‌های مرزی در زنجیره‌ای از اتم‌های فرومغناطیس روی ابرسانا [۱۴] مورد مطالعه قرار گرفته‌اند.

ما در این پژوهش اثر متقابل برهم‌کنش‌های اسپین مدار یکنواخت و میدان مغناطیسی زمین یکنواخت را در ایجاد فازهای توپولوژیک در یک شبکه یک بعدی با حضور دو زیر شبکه در هر سلول واحد که به مدل SSH^۱ معروف است [۱۵-۱۶]، مورد مطالعه قرار می‌دهیم. این مدل در ابتدا برای توصیف پلی‌استیلن یک بعدی معرفی شد. نشان خواهیم داد که حضور برهم‌کنش اسپین مدار، فازهای توپولوژیک بدیهی و غیر بدیهی را تولید می‌کند. آنچه که این پژوهش را متمایز می‌کند، تولید فاز توپولوژیک غیر بدیهی با استفاده از میدان مغناطیسی زمین یکنواخت می‌باشد، در شرایطی که سامانه در غیاب چنین میدانی در فاز توپولوژیک بدیهی قرار می‌گیرد. علاوه بر آن، نقش تقارن‌های گسسته در این سامانه به تفصیل مورد بررسی قرار گرفته است و نشان داده شده است که تقارن‌های معکوس

۲. Inversion symmetry

۱. Su-Schrieffer-Heeger (SSH) model

$$\alpha(k) = M_{y,a}^* + M_{y,b}^* + \tau s_k^* s_k + \zeta_k^* \zeta_k,$$

$$\beta(k) = M_{y,a}^* + M_{y,b}^* + M_{y,a} M_{y,b} + \lambda (s_k^* s_k - \zeta_k^* \zeta_k) - \tau + (M_{y,a} + \tau M_{y,b}) (s_k^* s_k + \zeta_k^* \zeta_k) + \tau (s_k^* \zeta_k + \zeta_k^* s_k).$$

رابطه (۶) مشخص کننده چهار نوار انرژی است که دونوار، مربوط به نوار رسانش با انرژی مثبت و دو نوار دیگر مربوط به نوار ظرفیت با انرژی منفی است.

شرط لازم برای ایجاد گذار فاز توپولوژیکی، باز و بسته شدن گاف انرژی است [۱۳]. در غیاب میدان زمین و برهم کنش اسپین مدار یعنی $\lambda = M_{y,a} = M_{y,b} = 0$ طیف انرژی به $E(k) = \pm \sqrt{s_k^* s_k}$ کاهش می یابد. در این حالت، گاف انرژی با شرط $t_1 = t_2$ در نقطه $k = \pm \pi$ (مرز منطقه اول بریلون) بسته می شود. حضور جمله مربوط به برهم کنش اسپین مدار شرط بسته شدن گاف انرژی را تغییر می دهد و در نتیجه زمانی که $M_{y,a} = M_{y,b} = 0$ باشد، گاف انرژی تحت شرط،

$$|\delta t| = \lambda, \tag{7}$$

در نقطه $k = \pm \pi$ بسته می شود. در حالت کلی، اعمال میدان زمین در حضور برهم کنش اسپین مدار رابطه بسته شدن گاف انرژی را در نقطه $k = 0$ به صورت،

$$M_{y,a} M_{y,b} = \tau (\delta t^2 - \lambda^2), \tag{8}$$

و در نقطه $k = \pm \pi$ به صورت

$$M_{y,a} M_{y,b} = \tau, \tag{9}$$

تغییر می دهد.

در ادامه، فازهای توپولوژیک سامانه را به صورت نظام مند و مرحله به مرحله مورد بررسی قرار می دهیم. ابتدا فقط اثر برهم کنش اسپین مدار یکنواخت بر روی فازهای توپولوژیکی بررسی می شود و سپس با اضافه کردن میدان مغناطیسی زمین یکنواخت، اثر تقابل بین این دو پدیده را مطالعه خواهیم کرد. قابل توجه است که اثر میدان زمین به تنهایی (در غیاب برهم کنش اسپین مدار یکنواخت) سبب تخریب هرگونه فاز توپولوژیک غیر بدیهی می شود [۱۷].

$$H_B = \sum_{n, \left(\begin{smallmatrix} \sigma = \uparrow, \downarrow \\ c = a, b \\ q = x, y \end{smallmatrix} \right)} c_{n, \sigma}^\dagger (M_{n, c, q} \tau_q) c_{n, \sigma} \tag{3}$$

در روابط بالا $(b_{n, \sigma}) a_{n, \sigma}^\dagger$ عملگر خلق (فنا) فرمیونی در زیر شبکه a (b) با درجه آزادی اسپین $\sigma = \uparrow, \downarrow$ می باشد. n نمایانگر شماره سلول واحد است. در رابطه (۱)، که نشان دهنده هامیلتونی پرش الکترون های شبکه می باشد، t_1 شدت پرش درون سلولی و t_2 شدت پرش بین سلولی است. به منظور کنترل شدت پرش ها $t_1 = t(1 - \frac{\delta t}{t})$ و $t_2 = t(1 + \frac{\delta t}{t})$ در نظر گرفته شده است. $t = 1$ به عنوان واحد انرژی می باشد و δt پارامتری برای کنترل تغییرات شدت پرش ها است. رابطه (۲)، هامیلتونی برهم کنش اسپین مدار یکنواخت با شدت برهم کنش λ است. رابطه (۳) هامیلتونی مربوط به میدان مغناطیسی زمین است. q جهت میدان مغناطیسی، M_c بردار میدان مغناطیسی در زیر شبکه $(a, b) = c$ می باشد و τ_q مشخص کننده ماتریس پائولی می باشد.

ابتدا اثر میدان زمین را در راستای y در نظر می گیریم، لذا $M_{x, a} = M_{x, b} = 0$. در ادامه، اثر مؤلفه x میدان زمین را نیز بررسی خواهیم کرد. با استفاده از شرط مرزی دوره ای و اعمال تبدیل فوریه از فضای مستقیم به فضای تکانه می رویم، پس هامیلتونی سامانه به صورت زیر به دست می آید:

$$H = \sum_k \psi_k^\dagger h(k) \psi_k$$

که $\psi_k^\dagger = (a_{k, \uparrow}, a_{k, \downarrow}, b_{k, \uparrow}, b_{k, \downarrow})^\dagger$ است و

$$h(k) = \begin{pmatrix} 0 & -iM_{y, a} & s_k & \zeta_k \\ iM_{y, a}^* & 0 & \zeta_k^* & s_k \\ s_k^* & \zeta_k^* & 0 & -iM_{y, b} \\ \zeta_k & s_k & iM_{y, b} & 0 \end{pmatrix}, \tag{4}$$

$$s_k = -t_1 - t_2 e^{ik}, \zeta_k = \lambda(1 - e^{ik}), \tag{5}$$

با قطری کردن رابطه (۴) طیف انرژی سامانه در فضای تکانه به سادگی به صورت زیر به دست می آید:

$$E(k) = \pm \frac{\sqrt{\alpha(k)} \pm \sqrt{\beta(k)}}{\sqrt{\tau}}, \tag{6}$$

$$z_i = (-1)^{F_i}, \quad (11)$$

که $\Gamma_i = \phi_{Zak_i} / \pi$ و $i = 1, 2$ می‌باشد. قابل توجه اینکه، در حضور تقارن معکوس فضایی، Γ_i یک عدد صحیح می‌باشد [۱۳، ۱۸]. بنابراین ناوردای کلی توپولوژیک سامانه به صورت $Z = z_1 + z_2$ در نظر گرفته می‌شود. z_1 مطابق با رابطه (۱۱) ناوردای توپولوژیک نوار ظرفیت بالایی (پایینی) است. ناوردای کلی توپولوژیک سامانه می‌تواند مقادیر $Z = 0, 1, 2$ را در حضور تقارن معکوس فضایی داشته باشد. زمانی که $Z = 0$ است، سامانه در فاز توپولوژیک بدیهی قرار دارد و لذا یک عایق معمولی است. برای $Z = 1, 2$ سامانه یک عایق توپولوژیک غیر بدیهی است. تفاوت بین وضعیت‌های $Z = 1$ و $Z = 2$ ناشی از تفاوت در تعداد حالت‌های مرزی، درون گاف می‌باشد. برای $Z = 1(2)$ ، یک جفت (دو جفت) حالت مرزی با انرژی صفر درون گاف انرژی، تحت شرط مرزی آزاد وجود دارد.

حال فازهای توپولوژیک که بر اساس حضور برهم‌کنش اسپین مدار یکنواخت تولید می‌شوند را مورد بررسی قرار می‌دهیم. باز و بسته شدن بی‌درروی گاف انرژی منجر به گذار فاز توپولوژیک و تغییر توپولوژی ساختار نواری می‌شود. بدین منظور با انتخاب مقادیری برای پارامترهای مسئله در مناطقی که گاف باز است، ناوردهای توپولوژیک را (همان طور که در ادامه بحث می‌شود) محاسبه می‌کنیم.

ابتدا فاز توپولوژیک سامانه را در منطقه $\lambda > \delta t$ و $-\delta t < \lambda$ مورد بررسی قرار می‌دهیم. بدین منظور $\delta t = -1$ و $\lambda = 2$ را در نظر می‌گیریم. با استفاده از رابطه (۴) در غیاب میدان مغناطیسی یعنی $M_{y,a} = M_{y,b} = 0$ ، ویژه توابع مربوط به نوارهای ظرفیت بالایی u_k و پایینی u_{k^*} به صورت زیر در می‌آید،

$$u_k = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \frac{e^{-ik} \sqrt{-2e^{ik} + 5e^{2ik} - 2e^{3ik}}}{-2 + e^{ik}}, \\ \frac{e^{-ik} \sqrt{-2e^{ik} + 5e^{2ik} - 2e^{3ik}}}{-2 + e^{ik}}, -1 \end{pmatrix}, \quad (12)$$

$$u_{k^*} = \frac{1}{2} (e^{-ik}, e^{-ik}, 1), \quad (13)$$

با استفاده از رابطه (۱۰) و پس از انجام محاسبات، فاز زا

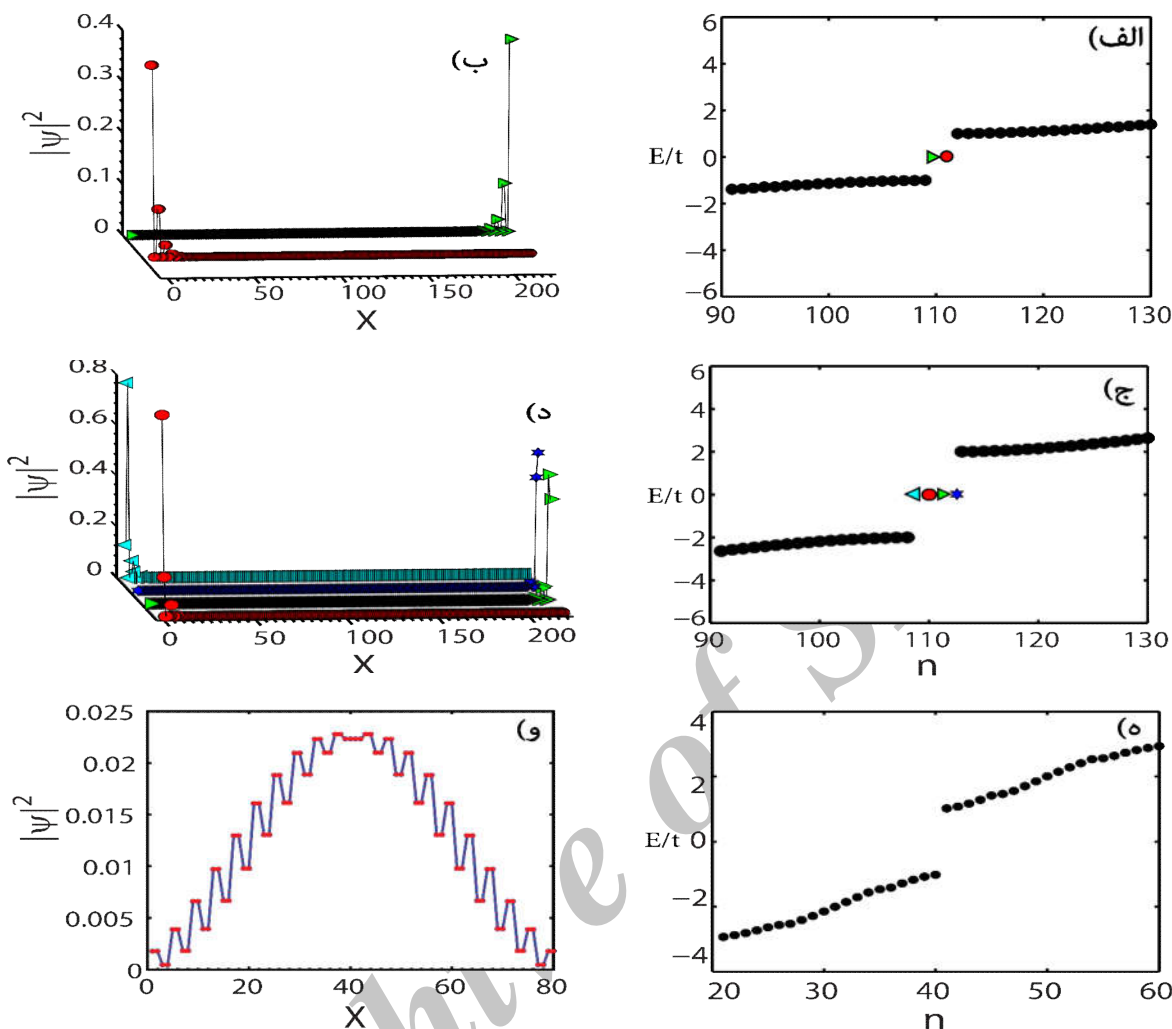
۳. اثر برهم‌کنش اسپین مدار بر فازهای توپولوژیک

سامانه در غیاب میدان مغناطیسی زمین و در حضور برهم‌کنش اسپین مدار دستخوش تغییرات زیادی می‌شود. برهم‌کنش اسپین مدار تهگنی نوارهای انرژی را از بین می‌برد و مطابق با رابطه (۷) گاف انرژی بسته می‌شود. به منظور مشخص کردن توپولوژی سامانه، باید توپولوژی نوارهای اشغال شده را با استفاده از فاز زا [۱۸-۱۹] محاسبه کنیم. قابل توجه است که اخیراً فاز زا به صورت تجربی نیز مورد بررسی قرار گرفته است [۲۰]. از آنجایی که در سامانه مورد مطالعه، پتانسیل شیمیایی در انتهای بالایی نوار ظرفیت قرار دارد، لذا تنها نوارهای مذکور توسط الکترون‌ها اشغال شده‌اند و در محاسبه فاز زا سهم دارند. فاز زا برای نوارهای ظرفیت در حضور درجه آزادی اسپینی به صورت زیر تعریف می‌شود [۱۸-۲۰]:

$$\phi_{Zak} = i \sum_{\sigma} \int_{-\pi}^{\pi} (u_{k,\sigma}^* \partial_k u_{k,\sigma} + u_{k,\sigma}^* \partial_k u_{k,\sigma}), \quad (10)$$

که $u_{k,\sigma}$ و $u_{k,\sigma}^*$ چهار مؤلفه اسپینوری $U_k = (u_{k,\uparrow}, u_{k,\downarrow}, u_{k,\uparrow}^*, u_{k,\downarrow}^*)^T$ ویژه تابع هامیلتونی در فضای وارون است که از رابطه $h(k)U_k = E(k)U_k$ به دست می‌آید.

در غیاب برهم‌کنش اسپین مدار، با شرط $t_1 > t_2$ فاز زا $\phi_{Zak} = 0$ به دست می‌آید و سامانه در این حالت یک عایق معمولی است، همچنین زمانی که $t_1 < t_2$ ، فاز زا $\phi_{Zak} = \pi$ است. در این وضعیت سامانه یک عایق توپولوژیک است و میزان یک جفت مد مرزی با انرژی صفر می‌باشد. از آنجایی که حضور برهم‌کنش اسپین مدار باعث ترکیب زیر نوارهای اسپینی می‌شود، به طوری که نوارهای ظرفیت با یکدیگر هم‌پوشانی نخواهند داشت، لذا فاز زا را برای هر کدام از نوارهای ظرفیت به طور جداگانه محاسبه می‌کنیم و همچنین آن را به عنوان ناوردای توپولوژیک مربوط به هر نوار ظرفیت مورد استفاده قرار می‌دهیم. بدین منظور برای هر یک از نوارهای ظرفیت، ناوردای توپولوژیک زیر را تعریف می‌کنیم،



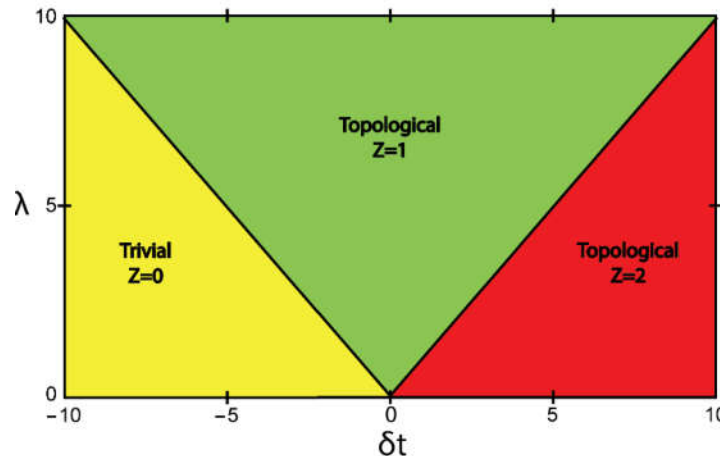
شکل ۲. (رنگی در نسخه الکترونیکی) احتمال ویژه حالت‌های مرزی بر حسب مکان X (ستون سمت چپ) به همراه ویژه مقادیر انرژی بر حسب اندیس تابع موج (ستون سمت راست) تحت شرط مرزی آزاد با مقادیر: الف و ب) $\lambda = 2, \delta t = \frac{1}{2}, N = 50$. سامانه در این وضعیت یک عایق توپولوژیک ($Z = 1$) با یک جفت حالت مرزی با انرژی صفر بین گاف است. ج و د) $\lambda = 1, \delta t = 2, N = 50$. سامانه در این وضعیت یک عایق توپولوژیک ($Z = 2$) با دو جفت حالت مرزی بین گاف با انرژی صفر است. رنگ و شکل حالت‌های مرزی با انرژی صفر مرتبط است. هـ، و) $\lambda = 4, \delta t = -7, N = 20$. سامانه در این وضعیت یک عایق معمولی است.

حفره و کایرال محافظت می‌شود و در مقابل اختلال‌های محیطی پایدار خواهند بود (شکل ۲. الف و ۲. ب) (بررسی تقارن‌ها و پایداری آن‌ها را در بخش بعدی مورد بررسی قرار خواهیم داد). همان طور که در شکل ۲. الف دیده می‌شود، یک جفت ویژه حالت انرژی با مقدار صفر در وسط گاف انرژی وجود دارد. در شکل ۲. ب نشان داده شده است که احتمال حضور ویژه حالت‌های موجود در گاف انرژی در مرزهای نانو سیم پیشینه

نوار بالای $\varphi_{Zak} = 0$ ($z_1 = 0$) و فاز زاک نوار پایینی $\varphi_{Zak} = \pi$ ($z_1 = 1$) به دست می‌آید. در نتیجه ناوردای کلی توپولوژیک سامانه به صورت،

$$Z = z_1 + z_2 = 1 \quad (14)$$

به دست می‌آید. این مقدار نشان دهنده وجود یک جفت حالت مجاز توپولوژیک در گاف انرژی با مقدار انرژی صفر می‌باشد که با تقارن‌های معکوس زمانی، معکوس فضایی، الکترون-



شکل ۳. (رنگی در نسخه الکترونیکی) فضای فاز سامانه بر حسب شدت برهم‌کنش اسپین مدار یکنواخت و پارامتر کنترلی شدت پُرش‌ها δt .

به دست می‌آید. در این منطقه $Z=0$ می‌باشد و سامانه در این منطقه یک عایق معمولی است، بنابراین هیچ حالتی با انرژی صفر در بین گاف وجود نخواهد داشت و به دلیل تکراری بودن محاسبات از بیان آن در مقاله خودداری می‌کنیم. شکل ۲. ه ویژه مقادیر انرژی را در شرایطی که $Z=0$ است نشان می‌دهد، همان طور که دیده می‌شود درون گاف انرژی هیچ حالت مجازی وجود ندارد. همچنین همان طور که در شکل ۲. و نشان داده شده است، احتمال حضور حامل‌ها روی مرزهای نانوسیم کم‌ترین مقدار را دارد. با توجه به مشخص کردن توپولوژی نواحی مختلف بر اساس بحث‌های بالا، فضای فاز سامانه بر حسب شدت برهم‌کنش اسپین مدار یکنواخت و پارامتر کنترلی شدت پُرش مطابق با شکل ۳ به دست می‌آید. نواحی که در آن گاف انرژی سامانه بسته می‌باشد (مطابق با رابطه ۷)، با خط ممند سیاه نشان داده شده است. در مناطقی که گاف انرژی باز است، ناوردای توپولوژیک سامانه مطابق با روابط (۱۴) و (۱۷) محاسبه شده است. ناحیه قرمز (سبز) رنگ نشان دهنده فاز توپولوژیک غیر بدیهی با دو جفت (یک جفت) حالت مجاز توپولوژیکی درون گاف انرژی است. ناحیه زرد رنگ فاز توپولوژیک بدیهی را نشان می‌دهد. در این منطقه، سامانه یک عایق معمولی است و در نتیجه نوار ظرفیت و رسانش با یک گاف انرژی از یکدیگر جدا می‌شوند.

است. ویژه مقادیر انرژی سامانه و احتمال حضور حالت‌ها با استفاده از قطری کردن هامیلتونی در فضای مستقیم تحت شرط مرزی آزاد به دست آمده است.

حال فاز توپولوژیک سامانه را در منطقه $\delta t > 0$ و $\delta t < \lambda$ مورد بررسی قرار می‌دهیم، پس $\delta t = 2$ و $\lambda = 1$ را انتخاب می‌کنیم. در این حالت، ویژه توابع مربوط به نوارهای ظرفیت بالایی u_{k_1} و پایینی u_{k_2} به صورت زیر در می‌آید:

$$u_{k_1} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \frac{e^{-ik} \sqrt{-2e^{ik} + 5e^{ik} - 2e^{ik}}}{-1 + 2e^{ik}}, \\ \frac{e^{-ik} \sqrt{-2e^{ik} + 5e^{ik} - 2e^{ik}}}{-1 + 2e^{ik}}, \\ 1, 1 \end{pmatrix}, \quad (15)$$

$$u_{k_2} = \frac{1}{2} (-e^{-ik}, e^{-ik}, -1, 1). \quad (16)$$

با استفاده از رابطه (۱۰) و پس از انجام محاسبات، فاز زاگ نوار ظرفیت بالایی $\varphi_{Zak_1} = \pi$ ($z_1 = 1$) و فاز زاگ نوار ظرفیت پایینی $\varphi_{Zak_2} = \pi$ ($z_2 = 1$) به دست می‌آید. حال با استفاده از رابطه (۱۱) ناوردای کلی توپولوژیک سامانه به صورت:

$$Z = z_1 + z_2 = 2 \quad (17)$$

به دست می‌آید. بدین ترتیب دو جفت حالت مجاز توپولوژیکی با انرژی صفر در بین گاف خواهیم داشت (شکل ۲. ج) و متناظرًا دو جفت حالت جایگزیده در لبه‌های سیم حضور دارند (شکل ۲. د). همچنین، فاز توپولوژیک سامانه نیز در منطقه $\delta t < 0$ و $\lambda < -\delta t$ نیز به روش یاد شده در بالا،

۴. بررسی تقارن‌های سامانه در حضور برهم کنش

اسپین مدار

حالات‌های مجاز توپولوژیکی درون گاف انرژی اساساً با حضور تقارن‌هایی محافظت می‌شوند. با بررسی هامیلتونی سامانه، تقارن‌های موجود تعیین می‌شود و سپس از طریق آن کلاس‌بندی و ناوردای توپولوژیکی متناظر را می‌توان مشخص کرد. عملگر مربوط به تقارن معکوس فضایی (U_1) برای سامانه و جابه‌جا پذیر بودن آن با هامیلتونی (۴) زمانی که $M_{y,a} = M_{y,b} = 0$ به صورت زیر تعریف می‌شود:

$$U_1 = \sigma_x \otimes \sigma_x, \quad U_1 U_1^\dagger = 1, \quad U_1 h(k) U_1^\dagger = h(-k). \quad (18)$$

همچنین سامانه دارای تقارن معکوس-زمانی (U_2) و الکترون-حفره (U_3) است که با عملگرهای پادیکانی به ترتیب زیر قابل تعریف می‌باشند،

$$U_2 = K, \quad U_2^\dagger = 1, \quad U_2 h(k) U_2^\dagger = h(-k), \quad (19)$$

$$U_3 = \sigma_z \otimes \sigma_x, \quad U_3^\dagger = 1, \quad U_3 h(k) U_3^\dagger = -h(-k), \quad (20)$$

که در روابط (۱۹) و (۲۰)، k همیوگ مختلط‌گیر است. همچنین سامانه دارای تقارن کایرال (U_4) می‌باشد که به صورت زیر بیان می‌شود:

$$U_4 = U_2 U_3 = \sigma_z \otimes \sigma_x, \quad U_4 h(k) U_4^\dagger = -h(k). \quad (21)$$

حضور تقارن الکترون-حفره و کایرال این اطمینان را ایجاد می‌کند که طیف انرژی نسبت به انرژی فرمی (که در این سامانه صفر در نظر گرفته شده است) متقارن است. با توجه به تقارن‌های موجود، فازهای توپولوژیک سامانه در دسته بندی کلاس BDI قرار می‌گیرد [۱۲، ۲۰] که ناوردای توپولوژیک آن در یک بعد با عدد صحیح Z تعریف می‌شود. باید بیان کرد که مدل SSH نیز از لحاظ توپولوژیکی در کلاس BDI واقع می‌شود [۲۱]. همچنین، اخیراً فازهای توپولوژیک در حضور تقارن‌های معکوس فضایی و آینه‌ای نیز دسته‌بندی و تکمیل شده‌اند [۲۲-۲۴].

۴. اثر برهم کنش میدان زیمن و برهم کنش اسپین مدار

میدان مغناطیسی زیمن اعمال شده بر سامانه، نقاط بسته شدن

گاف انرژی را مطابق با روابط (۸) و (۹) تغییر می‌دهد. در بخش قبل، با توجه به محاسبات و فضای فاز نشان داده شده در شکل ۳، دریافتیم که به ازای مقادیری از پارامتر کترلی شدت پرش و شدت برهم کنش اسپین مدار یکنواخت، سامانه یک عایق معمولی است. حال در این بخش سعی داریم که با استفاده از میدان مغناطیسی زیمن، منطقه‌ای که در غیاب میدان زیمن، سامانه یک عایق معمولی است را با استفاده از اعمال چنین میدانی به عایق توپولوژیک تبدیل کنیم.

سامانه در غیاب میدان مغناطیسی زیمن و در منطقه $\delta t < 0$ و $\lambda < -\delta t$ (ناحیه زرد رنگ فضای فاز شکل ۳) یک عایق معمولی است. اکنون با توجه به رابطه (۸) حاصل ضرب میدان‌های اعمالی در زیر شبکه‌های متفاوت، بزرگ‌تر از صفر خواهد بود ($M_{y,a} M_{y,b} > 0$). با توجه به مطلب قبل، برای بستن گاف انرژی و تغییر توپولوژی سامانه، نیاز به میدان مغناطیسی زیمنی است که در یک جهت بر زیر شبکه‌ها اعمال شود.

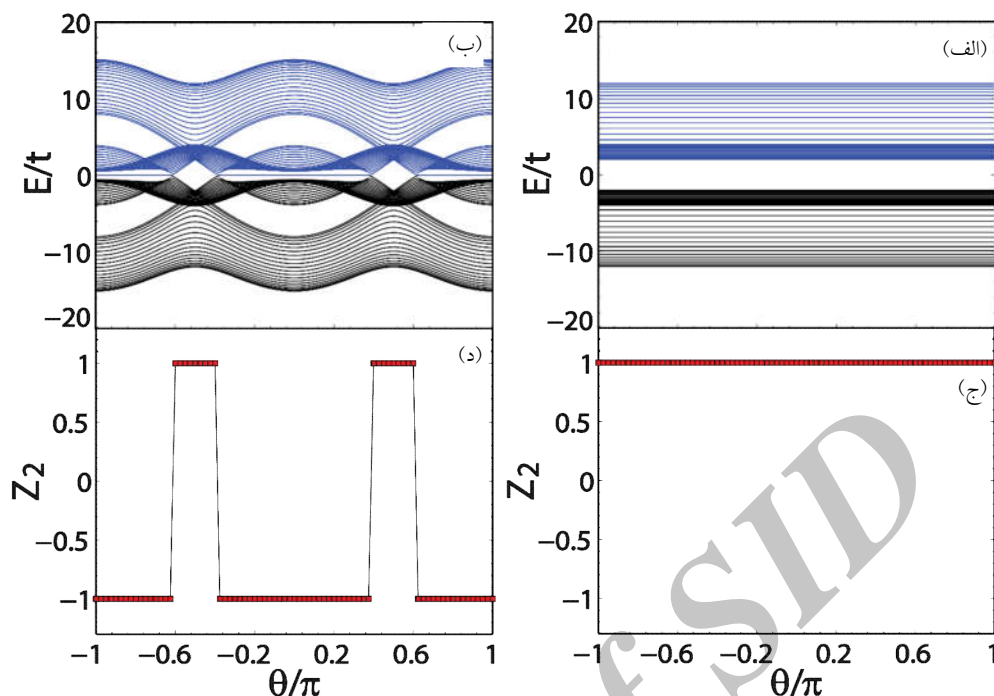
به منظور پابرجا نگه داشتن تقارن معکوس فضایی، نیاز است که میدان‌های مغناطیسی اعمالی بر زیر شبکه‌ها دارای شدت یکسانی باشند؛ یعنی $|M_{y,a}| = |M_{y,b}|$ ، از این رو عملگر تقارن معکوس فضایی به صورت

$$U_5 = \sigma_x \otimes \mathbb{1} \quad (22)$$

به دست می‌آید. همچنین تقارن‌های معکوس زمانی U_6 ، الکترون-حفره U_7 و کایرال U_8 در حضور میدان زیمن برقرار می‌مانند که عملگرهایشان به ترتیب زیر خواهد بود:

$$U_6 = \mathbb{1} \otimes \sigma_x, \quad U_7 = \sigma_z \otimes \mathbb{1}, \quad U_8 = \sigma_z \otimes \sigma_x \quad (23)$$

بیان این نکته جالب است که معمولاً انتظار می‌رود تقارن معکوس زمانی در حضور میدان مغناطیسی زیمن شکسته شود، اما در سامانه مورد مطالعه این اتفاق رخ نمی‌دهد. حضور درجه آزادی زیر شبکه منجر به پابرجا نگه داشتن تقارن معکوس زمانی می‌شود به طوری که $U_6^\dagger = 1$ است. بنابراین، فازهای توپولوژیک سامانه همچنان در دسته‌بندی کلاس BDI باقی می‌ماند. همچنین، کلاس دسته بندی سامانه در حضور و یا غیاب مؤلفه y میدان زیمن تغییری نمی‌کند، با این تفاوت که ناوردای



شکل ۴. (رنگی در نسخه الکترونیکی) طیف انرژی سامانه برای $\lambda = 2$, $\delta t = -4$, $N = 8$, $\delta t = -4$ (الف: $h = 0$) در این وضعیت سامانه یک عایق معمولی است. (ب) $h = \sqrt{35}$ به ازای مقادیری از θ که در شکل نشان داده شده است، سامانه به یک عایق توپولوژیک تبدیل شده است. (ج) و (د) نمودار مربوط به ناوردهای توپولوژیک سامانه که مرتبط با نمودارهای الف و ج است.

سامانه با شرط

$$2 < |M_{y,a}| < \sqrt{4(\delta t)^2 - \lambda^2}, \quad (26)$$

همیشه در فاز توپولوژیک غیر بدیهی خواهد بود و فاز زا $\phi_{Zak} = \pi$ ($Z_2 = -1$) می‌باشد. در شکل‌های ۴ الف و ۴ ب طیف انرژی سامانه بر حسب θ تحت شرط مرزی آزاد برای دو مقدار متفاوت شدت میدان زمین $h = \sqrt{35}$ و $h = 0$ رسم شده است. همان طوری که در شکل ۴ الف دیده می‌شود، در غیاب میدان مغناطیسی هیچ حالتی با انرژی صفر وجود ندارد و نوارهای رسانش و ظرفیت به واسطه یک گاف انرژی از یکدیگر جدا شده‌اند، اما در شکل ۴ ج وجود میدان زمین باعث تغییر ساختار نوار انرژی شده است به طوری که در گستره خاصی از θ درون گاف انرژی، حالت‌های مرزی با انرژی صفر پدیدار شده‌اند که نوار رسانش و ظرفیت را به هم متصل کرده‌اند. به منظور مطالعه فاز توپولوژیک، عدد Z_2 مربوط به هر کدام از ساختارهای نواری بر حسب θ محاسبه و در شکل

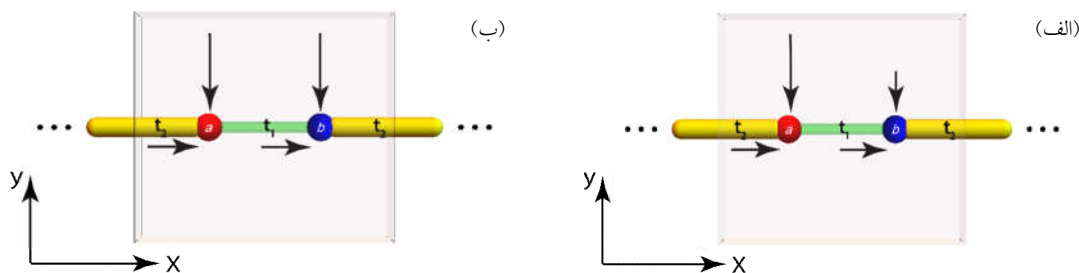
توپولوژیک، همان طور که در ادامه نشان خواهیم داد، تنها با دو مقدار صحیح مشخص می‌شود و از این رو به آن Z_2 (که زیر مجموعه‌ای از Z است) گفته می‌شود [۲۱-۲۴]. از آنجایی که نوارهای ظرفیت با اعمال میدان زمین با یکدیگر همپوشانی خواهند داشت، نمی‌توان فاز زا را به طور جداگانه برای هر نوار اشغال شده محاسبه کرد [۱۹]، لذا، فاز زا را برای هر دو نوار اشغال شده محاسبه می‌کنیم. فاز زا سامانه با ناوردهای توپولوژیک Z_2 طبق رابطه زیر تعیین می‌شود،

$$Z_2 = (-1)^\Gamma \quad (24)$$

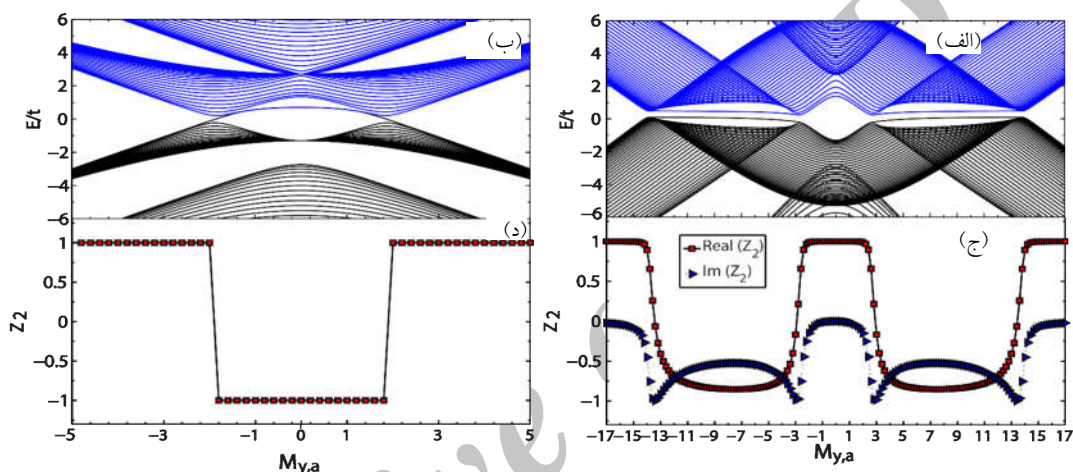
که $\Gamma = \phi_{Zak} / \pi$ است. فازهای توپولوژیک غیر بدیهی که با اعمال میدان ایجاد می‌شوند، سامانه را میزبان یک جفت حالت مرزی می‌کند. برای نشان دادن نتایج، میدان را به صورت زیر در نظر می‌گیریم که با پارامتر θ تغییر می‌کند،

$$M_{y,a} = M_{y,b} = h \cos(\theta) \quad (25)$$

h پارامتری برای کنترل شدت برهم‌کنش میدان زمین است.



شکل ۵. (رنگی در نسخه الکترونیکی) پیکربندی طرح‌واره شبکه ۱ بعدی با دو اتم a و b در سلول واحد با حضور میدان‌های مغناطیسی زمین. الف) اعمال میدان (پیکان سیاه) در راستای محور x با شدت یکسان و در راستای محور y با شدت متفاوت. ب) میدان‌های اعمالی در راستای محورهای x با شدت یکسان و y با شدت یکسان.



شکل ۶. (رنگی در نسخه الکترونیکی) طیف انرژی سامانه تحت شرط مرزی آزاد بر حسب شدت میدان مغناطیسی زمین در راستای y به ازای $N = 40$.

الف) $\delta t = 5/5$, $\lambda = 2/5$, $M_{y,a} = \frac{M_{y,b}}{2}$, $M_{x,a} = M_{x,b} = 0/7$ ب) $\delta t = 1/5$, $\lambda = 2/5$, $M_{y,a} = M_{y,b}$, $M_{x,a} = M_{x,b} = 0/7$ ج) ناوردای توپولوژیک مرتبط با شکل الف. د) ناوردای توپولوژیک مرتبط با شکل ب.

تغییرات حالت‌های مرزی را مورد بررسی قرار دهیم. برای شکستن این تقارن‌ها، علاوه بر مؤلفه y ، مؤلفه x میدان مغناطیسی زمین را نیز اعمال می‌کنیم. اعمال میدان زمین در راستای x به طوری که جهت و شدت آن در هر زیر شبکه یکسان باشد، در حالی که شدت‌های میدان اعمالی در راستای y برای زیر شبکه a و b متفاوت باشند (شکل ۵. الف را ببینید)، تقارن کایرال و تقارن معکوس فضایی را می‌شکند. ساختار نواری انرژی چنین وضعیتی در شکل ۶. الف نشان داده شده است. شکست تقارن معکوس فضایی منجر به باز شدن گاف و از بین رفتن حالت‌های مرزی میان گاف می‌شود. در این وضعیت فاز زاک به غیر از صفر و π مقادیر متفاوتی را نیز

۴. ج و ۴. د رسم شده است. همان طوری که در شکل ۴. ج دیده می‌شود به ازای تمامی مقادیر شدت میدان، مقادیر $Z_2 = 1$ است که نشان می‌دهد سامانه در فاز توپولوژیک بدیهی قرار دارد و در نتیجه یک عایق معمولی است، اما در شکل (۴. د) ناوردای توپولوژیک در بازه‌های متفاوتی از مقدار $Z_2 = -1$ را نشان می‌دهد. مقدار یاد شده در بازه‌ای برقرار است که بین نوار رسانش و ظرفیت گاف انرژی وجود ندارد. در این وضعیت سامانه یک عایق توپولوژیک است.

همان طور که بیان کردیم، سامانه دارای تقارن‌های معکوس زمانی، معکوس فضایی، کایرال و الکترون-حفره می‌باشد. حال قصد داریم با شکست تقارن‌های معکوس فضایی و کایرال

در حضور برهم‌کنش اسپین مدار یکنواخت، به ازای مقادیری از پرش‌ها و شدت برهم‌کنش اسپین مدار در فاز توپولوژیک بدیهی / غیر بدیهی قرار می‌گیرد. فازهای توپولوژیک سامانه با استفاده از عدد Z مشخص می‌شوند که سه مقدار صحیح دارد. همچنین نشان داده شد که با استفاده از میدان مغناطیسی زمین یکنواخت و همگن، می‌توان سامانه را که در غیاب میدان در فاز توپولوژیک بدیهی است، به فاز غیر بدیهی تبدیل کرد. در این شرایط سامانه در فاز توپولوژیک غیر بدیهی دارای یک جفت حالت مرزی است. به منظور دسته‌بندی فازهای توپولوژیک سامانه از ناوردای Z_7 استفاده کردیم که تنها دو مقدار صحیح دارد. به دلیل وجود تقارن‌های معکوس زمانی، معکوس فضایی، کایرال و الکترون-حفره در حضور و یا عدم حضور مؤلفه y میدان مغناطیسی زمین، سامانه از لحاظ دسته‌بندی توپولوژیکی همچنان در کلاس BDI قرار می‌گیرد. در انتها فازهای توپولوژیک سامانه را با اضافه کردن میدان زمین در راستای x که سبب شکستن تقارن معکوس فضایی و کایرال می‌شود، مورد بررسی قرار دادیم که نشان می‌دهد حالت‌های مرزی به شدت نیازمند محافظت شدن با تقارن معکوس فضایی است. شکست تقارن معکوس فضایی، نوارهای توپولوژیکی مسطح با انرژی صفر را از بین می‌برد و گاف انرژی باز می‌شود.

کسب می‌کند، بنابراین مطابق با رابطه (۲۴)، ناوردای توپولوژیک نه تنها دارای دو مقدار نخواهد بود بلکه موهومی نیز می‌باشد (شکل ۶. ب).

میدان در راستای x و y با شدت برابر در هر زیر شبکه (شکل ۵. ج)، تقارن معکوس فضایی با رابطه (۲۲) را حفظ می‌کند، اما تقارن کایرال را می‌شکند. همان طور که در شکل ۶. ب نشان داده شده است، انرژی حالت‌های مرزی در این وضعیت ناپایدار است، اما، به دلیل حضور تقارن معکوس فضایی گاف انرژی باز نمی‌شود ولی حالت‌های مرزی که نوار ظرفیت و رسانش را به هم متصل کرده‌اند، انرژیشان دقیقاً صفر نیست و همچنان که در شکل ۶. د دیده می‌شود، در این گستره از میدان زمین، ناوردای توپولوژیک $Z_7 = -1$ است که نشان دهنده فاز توپولوژیک غیر بدیهی است. آنچه که در این مسئله بسیار با اهمیت است حضور تقارن معکوس فضایی است. شکست این تقارن حالت‌های توپولوژیکی غیر بدیهی و در نتیجه حالت‌های مرزی را از بین می‌برد.

۴. نتیجه‌گیری

در این مقاله حضور برهم‌کنش اسپین مدار یکنواخت و میدان مغناطیسی زمین یکنواخت را در یک شبکه یک بعدی که شامل دو اتم در هر سلول واحد است، مورد بررسی قرار دادیم. نشان دادیم که سامانه در غیاب میدان مغناطیسی زمین یکنواخت و

مراجع

1. M Z Hasan, and C L Kane, *Rev. Mod. Phys.* **82** (2010) 3045.
2. X Zhu, W Chen, R Shen and D Y Xing, Majorana and fractionally charged bound states in 1-D Rashba nanowire under spatially varying Zeeman fields, arXiv: 1409. 6058.
3. N Sedlmayr, J M. Aguiar-Hualde, and C Bena, *Phys. Rev. B* **91** (2015) 115415.
4. C Dutreix, M Guigou, D Chevallier and C Bena, *Eur. Phys. J. B* **87** (2014) 296.
5. L J Lang, X Cai and Sh Chen, *Phys. Rev. Lett.* **108** (2012) 220401.
6. K Klitzing, G Dorda and M Pepper, *Phys. Rev. Lett.* **45** (1980) 494.
7. A Y Kitaev, *AIP Conf. Proc.* **1134** (2009) 22.
8. A Y Kitaev, *Ann. Phys.* (N.Y.) **303** (2003) 2.
9. A Y Kitaev, *Phys.-Usp.* **44** (2001) 131.
10. Z Yan and S Wan, *Europhys. Lett.* **107** (2014) 47007.
11. S Tewari and J D Sau, *Phys. Rev. Lett.* **109** (2012) 150408.
12. L Li and Sh Chen, *Europhys. Lett.* **115** (2014) 809.
13. H Guo and Sh Chen, *Phys. Rev. B* **115** (2015) 809.
14. S Nadj-Perge, I K Drozdov, J Li, H Chen, S Jeon, J Seo, A H MacDonald, B A Bernevig, A Yazdani, *Science* **346** (2014) 6209.
15. W P Su and J R Schrieffer, *Phys. Rev. Lett.* **46** (1981) 738.
16. W P Su, J R. Schrieffer and A J Heeger, *Phys. Rev. B* **22** (1980) 2099.

۱۷. م. بهاری، م و حسینی، بررسی اثر میدان زمین بر مدل سو-

21. A Altland and M R Zirnbauer, *Phys. Rev. B* **55** (1997) 1142.
22. A P Schnyder, Sh Ryu, A Furusaki and A W W Ludwig, *Phys. Rev. B* **78** (2008) 195125.
23. Y M Lum and D H Lee, Inversion symmetry protected topological insulators and superconductors, arXiv: 1403.5558.
24. C K Chiu, H. Yao, and Sh Ryu, *Phys. Rev. B* **88** (2013) 075142.
- شریفی، بیست و یکمین گردهمایی فیزیک ماده چگال و مدرسه سیالات پیچیده، دانشگاه تحصیلات تکمیلی علوم پایه زنجان، زنجان.
18. J Zak, *Phys. Rev. Lett.* **62** (1989) 2747.
19. R Resta, *Rev. Mod. Phys.* **66** (1994) 899.
20. M Atala, M Aidelsburger, J T Barreiro, D Abanin, T Kitagawa, E Demler and I Bloch, *Nat. Phys.*, **9** (2013) 795.

Archive of SID