

ივანე ჯავახიშვილის სახელობის თბილისის სახელმწიფო
უნივერსიტეტი



დავით კერესელიძე
(მაგისტრანტი)

სუ-შრიფერ-ჰიგერის მოდელის განზოგადება

ზუსტ და საბუნებისმეტყველო მეცნიერებათა ფაკულტეტი
ფუნდამენტური ფიზიკის სამაგისტრო პროგრამა

ნაშრომი შესრულებულია ფუნდამენტური ფიზიკის მაგისტრის აკადემიური
ხარისხის მოსაპოვებლად

ხელმძღვანელი: ფიზ-მათ. მეცნ. დოქტორი,
ასისტენტ პროფესორი, გიორგი ციციშვილი

თბილისი

2016

~ 1 ~

ანოტაცია

ქვანტური მექანიკისა და მყარი სხეულის ფიზიკის შექმნიდან 70 წლის შემდეგ, თეორიულმა და ექსპერიმენტულმა კვლევებმა გვიჩვენა, რომ იზოლატორები ორ ჯგუფად იყოფა. აქედან ერთ-ერთს „ჩვეულებრივს“ უწოდებენ, ხოლო მეორეს – „ტოპოლოგიურს“. პირველი მათგანის სავალენტო ზონა ელექტრონებით სრულადაა შევსებული. გამტარობის ზონა კი მისგან ენერგეტიკული ღრეჩოთია გამოყოფილი. სწორედ ამგვარ მასალებს მიეკუთვნება ალმასი. მეორე ჯგუფის იზოლატორთა ენერგეტიკული ღრეჩო, ძლიერი სპინ-ორბიტალური ურთიერთქმედების გამო იცვლება. ეს იმას ნიშნავს, რომ ამ შემთხვევაში დიდი ენერგიის მქონე ელექტრონული მდგომარეობები ღრეჩოს ქვემოთ თავსდება და პირიქით. ამის გამო, ტოპოლოგიური იზოლატორის ზედაპირზე გამტარი მდგომარეობები ჭარბად წარმოიქმნება. ისინი ჩვეულებრივ დეფექტებზე გაბნევის მიმართ საკმარისად მდგრადია და მაღალ ენერგეტიკულ ბარიერთა არსებობის შემთხვევაშიც კი ატარებს ელექტრულ დენს. ე. ი. ტოპოლოგიური იზოლატორი კრისტალური მასალაა, რომელიც მოცულობაში დიელექტრიკია, ხოლო ზედაპირზე – გამტარი. აღსანიშნავია, რომ ტოპოლოგიურ იზოლატორებში მუხტის გადამტან ნაწილაკთა რიცხვი მუდმივია. სწორედ ამ ნიშნით განსხვავდება იგი ჩვეულებრივი იზოლატორებისაგან.

არაურთიერთქმედი ტოპოლოგიური იზოლატორის მოცულობაში, ელექტრონული ზონური სტრუქტურა – ჩვეულებრივის მსგავსია. ფერმის დონე, ასევე ზედაპირული განსაკუთრებული მდგომარეობები, მოცულობით ენერგეტიკულ ღრეჩოში ხვდება და ამიტომ მეტალური ზედაპირი ყალიბდება.

ტოპოლოგიურ იზოლატორთა თეორიულად და ექსპერიმენტულად შესწავლა ჯერ კიდევ 1987 წელს დაიწყო და კვლავ აქტუალურია, რადგან მსგავსი სტრუქტურები ბუნებაშიც არსებობს, მაგალითად კავაცულიტის მინერალი. ასე მაგალითად, *Bi*-ის შემცველი 3D მასალების მთავარ არეში ჩვეულებრივი იზოლატორული ან ტოპოლოგიური მდგომარეობები არსებობს (Nature Physics, 2014წ.). 2012 წელს კი, მეცნიერთა რამდენიმე ჯგუფმა ადრეული თეორიული შედეგების გათვალისწინებით განსაზღვრა, რომ სამარიუმის ჰექსაბორი-

დი ტოპოლოგიურ იზოლატორებს მიეკუთვნება. გარდა ამისა, ასეთ სტრუქტურებში შესაძლებელია ისეთი უმასო რელატივისტური კვაზინაწილაკების დამზერა, როგორც – დირაკის სპირალური ფერმიონებია.

რადგან ზემოთ აღნიშნული კრისტალური სტრუქტურები დიდი პოპულარობით სარგებლობს თანამედროვე მყარი სხეულის ფიზიკაში, ამიტომ უცვლელი პირობებისას, ჩვენ ტოპოლოგიურ იზოლატორთა ისეთი თვალსაჩინო მაგალითი განვაზოგადეთ, როგორც სუ-შრიფერ-ჰიგერის მოდელია. ამ შემთხვევაში, საკმარისად გრძელი კვაზი 1D კრისტალური მესრის მთავარი ნაწილი, ოთხი განსხვავებული გადახტომის ამპლიტუდისათვის თეორიულად შევისწავლეთ.

უფრო კონკრეტულად კი, ანალიზურად განვსაზღვრეთ იმპულსური წარმოდგენის მატრიცული ჰამილტონიანი, შესაბამისი საკუთარი ფუნქცია და დისპერსიული თანაფარდობა. ამის შემდეგ ავაგეთ დისპერსიული მრუდები და დავადგინეთ პირობები, რომელთა შესრულების შემთხვევაშიც, იზოლატორული ფაზებისაგან – მეტალური მიიღება. ე. ი. სხვა სიტყვებით რომ ვთქვათ, საქმე ფაზურ გარდაქმნებთან გვაქვს.

გარდა ზემოთ ხსენებულისა, საკმარისად გრძელი კვაზი 1D კრისტალური მესრისათვის დახვევის რიცხვი განვსაზღვრეთ, რომლის თითოეული შესაკრები გარეგნულად სუ-შრიფერ-ჰიგერის მოდელისათვის ნაპოვნი იმავე სიდიდის შესაბამის გამოსახულებას ჰგავს. ამ პარამეტრით შესაძლებელია სრულყოფილად დავახასიათოთ ნებისმიერი ფაზა.

ბოლოს კი, გადახტომის ამპლიტუდების პარამეტრიზებითა და დახვევის რიცხვის გამოსათვლელი ფორმულით, სუ-შრიფერ-ჰიგერის განზოგადებული მოდელისათვის, ფაზური დიაგრამები ავაგეთ. როგორც აღმოჩნდა, ერთი იზოლატორული ფაზიდან – მეორეში გადასვლა, ხან მეტალური საზღვრის გადაკვეთითაა შესაძლებელი და ხანაც – იზოლატორულის გავლით.

Abstract

Theoretical and experimental researches have shown that insulators divide into two groups, after 70 years from creation of quantum mechanics and solid state physics. One of these is “ordinary insulators” and others – “topological”. Valence band is fully occupied by electrons which belong to the first group of insulators, but conduction band is separated from valence band by energetic gap. Such kind of material is diamond. For the other group of insulators, energetic gap changes by the strong spin-orbital interaction. It means that electronic states of high energy are situated under the energetic gap and vice versa. For this reason, on the surface of the topological insulators, create many conduction states. They are the stable enough toward scattering on the ordinary defects. Even if exist high energetic barriers, surface states flow current. In this case we say that topological insulator is a crystalline material, which is conductor on the surface and it is insulator within the volume. It must be note that the number of charge carriers is constant in the topological insulators. It differs from ordinary insulators by this sign.

The electronic band structure of non-interacting topological insulator within the volume looks like to the ordinary one. The Fermi's level and the special surface states are dropped into the volume energetic gap and create the metallic surface.

At 1987 firstly has started to study experimentally and theoretically topological insulators and it's still timely. Such materials exist in the nature, for example Kawazulite mineral. Thereby, in the bulk part of the *Bi*-based 3D materials exist ordinary insulating or topological states (Nature Physics 2014). At 2012, several group of scientist suggest that samarium hexaboride is a topological insulator in accordance to the earlier theoretical predictions. Beside this, it's possible to observe helical Dirac's fermions in such structures and these quasiparticles are massless relativistic objects.

There are highly popular above-mentioned crystalline structures in the modern solid state physics. For this reason, we've generalized such prominent example of topological insulators as Su-Schrieffer-Heeger's (SSH) model. In this case, we've studied theoretically especially the long bulk part of quasi 1D chain by the four different hopping amplitudes.

More concrete, we've derived analytically bulk matrix Hamiltonian in the momentum-space with its eigenfunction and dispersion relation. After this, we've constructed dispersion curves and evaluated conditions, which define the metallic phases from insulators. On the other hand, we speak about the phase transitions.

We've defined the winding number for especially the long quasi 1D chain beside the above-mentioned things. Its every member of sum looks like to the same value expression of the SSH model outwardly. We can perfectly define any phase with this parameter.

At last, we've constructed the phase diagrams with parametrization of hopping amplitudes and by calculation formula of winding number for the generalization model of SSH.

As it defined, from one insulator phase transition to another is possible to cross metallic border in one case and via insulator border – on the other case.

სარჩევი

შესავალი -----	7
სუ-შრიფერ-ჰიგერის მოდელი -----	10
ჰალდენის მოდელი -----	16
სუ-შრიფერ-ჰიგერის განზოგადებული მოდელი -----	22
დასკვნა -----	29
გამოყენებული ლიტერატურა -----	30

შესავალი

1920 წელს, ელექტრული გამტარობის ზონური თეორიის შექმნით, ქვანტურმა მექანიკამ თავდაპირველი წარმატება მოიპოვა. ამ მოძღვრებით ადვილად აიხსნა, თუ რატომ არის ზოგიერთი კრისტალური ნივთიერება ელექტრული იზოლატორი, როცა ელექტრონები ერთი ატომიდან მეორეზე გადადის.

კრისტალურ ნიმუშს, რომლის კარგად განსაზღვრული სავალენტო ზონები აგრეთვე კარგად განსაზღვრული გამტარობის ზონებისაგან ენერგეტიკული ღრეჩოებითაა გამოყოფილი, ზონური იზოლატორი ეწოდება. ასეთი მასალის მთავარ ნაწილში, ელექტრონთა არსებობა დასაშვებია და ამის გამო ენერგეტიკული ზონები ყალიბდება. ზონურ იზოლატორში ნაწილობრივ შევსებული ზონები არ არსებობს. ასე რომ, სრულად შევსებული ზონა – ცარიელისაგან ენერგეტიკული ღრეჩოთია გამოყოფილი. ნაწილობრივ შევსებული ზონების მქონე კრისტალურ ნივთიერებებს კი – გამტარები ეწოდება. ამგვარი ნივთიერებების მთავარ ნაწილში, ბრტყელტალღოვანი მდგომარეობების წყალობით, საკმარისად მცირე ენერჯის ელექტრონთა გადაადგილებაა შესაძლებელი.

ზემოთ განხილული მასალების გარდა, არსებობს კრისტალური ნივთიერებები, რომლებიც ზონური თეორიით ვერ აღიწერება (მაგალითად, ე. წ. მოტის იზოლატორები). ამგვარი ობიექტების შესწავლა, თანამედროვე მყარი სხეულის ფიზიკისათვის ერთ-ერთ მნიშვნელოვან გამოწვევას წარმოადგენს.

1980 წელს, კლაუს ვონ კლიცინგის მიერ ჰოლის კვანტური ეფექტის აღმოჩენამ გვიჩვენა, რომ ზონურ იზოლატორებსა და მეტალებს შორის არსებული განსხვავება, ზონური თეორიის ჭეშმარიტებას არ უარყოფს. ამ ეფექტის თანახმად, ძლიერი განივი მაგნიტური ველი ელექტრონთა მოძრაობას კრისტალური სტრუქტურის ძირითად ნაწილში ზღუდავს და ზედაპირზე დელოკალიზებული კიდურა მდგომარეობების დაკავებას აიძულებს [6]. ამის გამო ჰოლის გამტარობა იკვანტება, ხოლო გრძივი წინაღობა – ქრება [7]. მასალის მთავარ არეში, ელექტრონული მდგომარეობები ერთმანეთისაგან დიდი ღრეჩოებით დაშორებულ ლანდაუს დონეებზეა განაწილებული. ეს კი იმას ნიშნავს, რომ $2D$ ნიმუშის ძირითადი

ნაწილი ძლიერი განივი მაგნიტური ველის ზემოქმედებით იზოლატორი ხდება, ხოლო ზედაპირის გასწვრივ, სრულიად ღია კიდურა მდგომარეობების არხთა სასრული რაოდენობის გამო – გამტარი (ლანდაუერ-ბუტიკერის ფორმალიზმის თანახმად).

არხთა რაოდენობა კი ჩერნის 1-ელ რიცხვს უკავშირდება [8], რომელიც შევსებული ზონების ტოპოლოგიურ ინვარიანტს წარმოადგენს. როგორც აღმოჩნდა, ჰოლის დაკვანტული გამტარობა სწორედ ამ სიდიდის პროპორციულია. რაც შეეხება ჩერნის იზოლატორებს, მათი სახელწოდება ჩერნის 1-ლი რიცხვიდან მომდინარეობს.

უკანასკნელი 20 წელია, რაც ხელოვნური სისტემების თეორიული შესწავლით დადგინდა, რომ იზოლატორებში რეალური გამტარი კიდურა მდგომარეობების შესაქმნელად გარეშე მაგნიტური ველი საჭირო არ არის.

ტოპოლოგიურ იზოლატორებს გარემოს ფაზებს უწოდებენ, რომლებიც ინდივიდუალური მოწესრიგებით ხასიათდება. ამგვარი წესრიგი კი, სავალენტო ზონათა ანსამბლის თვისებას წარმოადგენს. უფრო მეტიც, 1982 წელს თულესმა, კომოტომ, ნაითინგილმა და დე ნიჯსმა [8] აჩვენეს, რომ ძლიერი განივი მაგნიტური ველის ზემოქმედებით, კვაზი $2D$ ელექტრონულ აირში ჰოლის კვანტური ეფექტის წარმოშობა, შევსებული ზონის ტოპოლოგიურ თვისებას უკავშირდება [17, 18].

ტოპოლოგიური კლასიფიკაციის თანახმად, ყველა იზოლატორი ერთმანეთის ექვივალენტურია. ე. ი. მათი სავალენტო ზონების ანსამბლი ერთმანეთში შეიძლება ღრეჩოს დაუკეტავად, უწყვეტად გარდაიქმნას.

იზოლატორები ე. წ. ტოპოლოგიური ინდექსით კლასიფიცირდება. ეს პარამეტრი, სტანდარტულ იზოლატორებს – ტოპოლოგიურისაგან განარჩევს. ასეთი ინდექსის მაგალითი, $2D$ სტრუქტურის ეილერ-ჰუანკარეს მახასიათებელია [5], რომელიც ნიმუშში „ხვრელთა“ რაოდენობას საზღვრავს. მაშასადამე, ორი იზოლატორი ეილერის მახასიათებლის ერთნაირი მნიშვნელობებით, ერთმანეთში შეიძლება უწყვეტად გარდაიქმნას, ხოლო განსხვავებული მნიშვნელობების შემთხვევაში კი – ეს შეუძლებელია. აღსანიშნავია, რომ ტოპოლოგიური იზოლატორის ძირითადი ნაწილის არატრივიალური ტოპოლოგიის უნივერსალური გამოვლინება, უღრეჩო კიდურა ან ზედაპირული მდგომარეობების არსებობაა. სხვა

სიტყვებით რომ ვთქვათ, ტოპოლოგიური იზოლატორის ზედაპირი აუცილებლად მეტალური უნდა იყოს.

თეორიული ჰიპოთეზის თანახმად (ბერნევიგი, ჰიუჯესი და ზანგი, 2006წ. [1]), $HgTe$ -ის თხელ ფენაში ელექტრონული გადატანის მოვლენის ექსპერიმენტულად შესწავლით დადგინდა, რომ იგი ტოპოლოგიურ იზოლატორებს მიეკუთვნება (კიონიგი, 2007წ. [2]). ასეთივე ჯგუფში ერთიანდება $3D$ დეფორმირებული $HgTe$ -ც [14, 15, 16]. ასე მაგალითად 2007 წელს, თეორეტიკოსთა 3-მა სხვადასხვა ჯგუფმა აჩვენა, რომ $3D$ იზოლატორები შეიძლება ტოპოლოგიური მოწესრიგებით ხასიათდებოდეს [11, 12, 13]. ამ დროიდან მოყოლებული, მრავალი კრისტალური ნივთიერება გამოიკვლიეს, რომელიც $3D$ ტოპოლოგიური იზოლატორი აღმოჩნდა, ხოლო თხელი ფირები და ქვანტური მავთულები კი – შესაბამისად $2D$ და $1D$ [3].

დღეისათვის ცნობილია, რომ ტოპოლოგიური იზოლატორები ე. წ. „ტოპოლოგიურ იზოლატორთა პერიოდული სისტემით“ კლასიფიცირდება [4], რომელიც მათემატიკურად არამკაცრია.

ტოპოლოგიური იზოლატორების შესწავლა თანამედროვე მყარი სხეულის ფიზიკის უმნიშვნელოვანესი ამოცანაა. ეს მიმართულება მრავალი ექსპერიმენტის ჩატარებასა და ისეთი თეორიული პრობლემების გადაჭრას მოითხოვს, როგორცაა: ელექტრონ-ელექტრონული ურთიერთქმედების ეფექტები, დამატებითი კრისტალური სიმეტრიები, გარემოსთან დაწყვილება და ა. შ.

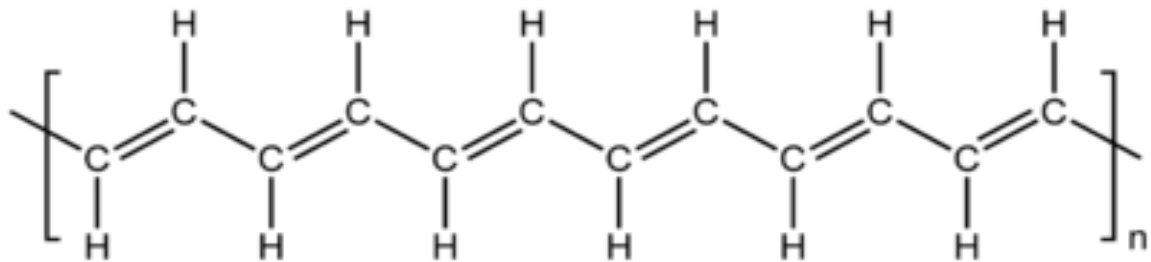
მოცემულ სამუშაოში, ჩვენ ტოპოლოგიურ იზოლატორთა ისეთ მაგალითებს მიმოვიხილავთ, როგორცაა სუ-შრიფერ-ჰიგერისა და ჰალდეინის მოდელები. ამის შემდეგ კი, სუ-შრიფერ-ჰიგერის მოდელს განვაზოგადებთ, რისთვისაც იმპულსურ წარმოდგენაში განსაზღვრულ ჰამილტონიანსა და მის საკუთარ ფუნქციას მატრიცული ფორმით ჩავწერთ. აგრეთვე, ჰამილტონიანის დიაგონალიზაციით დავადგენთ მის საკუთარ მნიშვნელობას, ანუ დისპერსიულ თანაფარდობას. ამის შემდეგ, ე.წ. დახვევის რიცხვს გამოვთვლით, რომელიც ქვანტური მავთულებისათვის ისეთივე სიდიდეა, როგორც ჩერნის 1-ლი რიცხვი – თხელი ფირებისათვის. ამ სიდიდით ფაზურ დიაგრამებს ავაგებთ და ბოლოს, მიღებულ შედეგებს

სუ-შრიფერ-ჰიგერის მოდელისათვის განსაზღვრულ ანალოგიურ მახასიათებლებს შევადარებთ, რითაც განზოგადებულ შემთხვევაში ჩვენი თეორიის სამართლიანობას დავადასტურებთ.

წინასწარვე შევთანხმდეთ, რომ მოცემულ ნაშრომში ერთეულთა ნატურალური სისტემით ვისარგებლებთ, როცა $\hbar=1$ და სიგრძეს მესრის მუდმივათი გამოვსახავთ. ფორმულებს კი, $N \rightarrow \infty$ პირობისთვის დავწერთ.

სუ-შრიფერ-ჰიგერის მოდელი

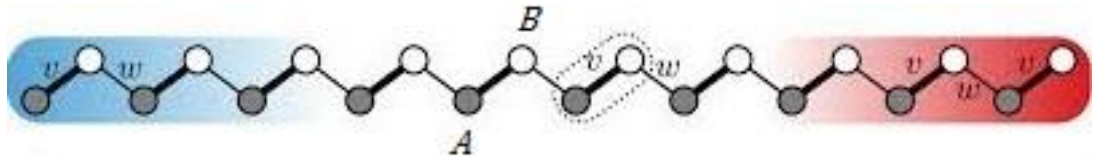
სუ-შრიფერ-ჰიგერის მოდელი, N ცალი ერთეულოვანი უჯრედისა და უცვლელი კოორდინატების მქონე ატომებისაგან შედგენილ, საკმარისად გრძელ კვაზი $1D$ ჯაჭვს აღწერს, რომლის ელექტრონები სპინურად პოლარიზებული, ანუ უსპინოა და მათი ერთმანეთთან ურთიერთქმედება უგულვებელყოფილია, $T=0K$ აბსოლუტურ ტემპერატურასა და $\mu=0$ ქიმიური პოტენციალის პირობებში. ამ მოდელის შესაბამის რეალურ ფიზიკურ მაგალითს პოლიაცეტილენი წარმოადგენს (ნახ.1.).



ნახ.1. პოლიაცეტილენის რადიკალის სტრუქტურული ფორმულა.

სუ-შრიფერ-ჰიგერის მოდელში, ელექტრონთა მდგომარეობების დასახასიათებლად, საჭიროა კვაზი $1D$ საკმარისად გრძელი ჯაჭვი თერმოდინამიკურ ზღვარში, ანუ როცა $N \rightarrow \infty$ განვიხილოთ. ეს იმას ნიშნავს, რომ ჩვენი ჯაჭვი მთავარ და კიდურა ნაწილებად უნდა დავყოთ. როგორც წესი, ჯაჭვის მთავარი ნაწილი მის ცენტრალურ არეს ეწოდება, ხოლო კიდურა – საზღვრებს, ანუ ბოლოებს. თერმოდინამიკურ ზღვარში ითვლება, რომ ჯაჭვის მთავარი ნაწილი გაცილებით გრძელია, ვიდრე – კიდურა. სწორედ ამიტომ, მესრის ძირითადი არე ყველაზე მნიშვნელოვანი ფიზიკური თვისებებით ხასიათდება და ბოლოების

განსაზღვრებაზე დამოკიდებული არ არის (ნახ.2.).



ნახ.2. სუ-შრიფერ-ჰიგერის მოდელის შესაბამისი ჯაჭვის ზიგზაგისებრი ფორმა.

ნაცრისფერი (თეთრი) წრეები A (B) ქვემესრის ატომებია, რომლებიც ერთეულოვან უჯრედებში ერთიანდება და თითოეული ერთ ელექტრონს შეიცავს. მე-6 უჯრედი წყვეტილი წირითაა შემოფარგლული. უჯრედშიგა გადახტომის ამპლიტუდები $v = t_1$

(სქელკონტურიანი მონაკვეთები) განსხვავდება უჯრედთაშორისი $w = t_2$ -

ამპლიტუდებისაგან (ვიწროკონტურიანი მონაკვეთები). მარცხენა (მარჯვენა) კიდურა არე ლურჯ (წითელ) ფერშია გადაწყვეტილი.

აღსანიშნავია, რომ სუ-შრიფერ-ჰიგერის მოდელში სულ N ცალი ადგილი გვექნება დაკავებული, მასში ამდენივე ერთეულოვანი უჯრედის არსებობის გამო. ეს კი იმას ნიშნავს, რომ ყოველ მათგანზე ერთი გამტარობის ელექტრონი მოდის. აღნიშნული ფაქტი იდეალურ შესაბამისობაშია პოლიაცეტილენის, როგორც უმარტივესი იზოლატორის კრისტალური სტრუქტურის თეორიულ მოდელთან, რადგან ამ შემთხვევაში თითოეული ნახშირბადის ატომი ერთ გამტარობის ელექტრონს შეიცავს.

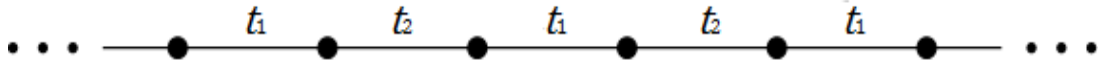
სუ-შრიფერ-ჰიგერის მოდელში, ელექტრონთა ურთიერთქმედების უგულვებელყოფის გამო, თითოეული მათგანის მდგომარეობა შეიძლება კვაზი $1D$ ჯაჭვის მთავარი ნაწილის ერთნაწილაკოვანი ჰამილტონიანით აღვწეროთ. მას კოორდინატულ წარმოდგენაში ასეთი სახე ექნება:

$$\hat{H} = \sum_{m=-\frac{N}{2}}^{\frac{N}{2}} [t_1 \hat{b}_m^\dagger \hat{a}_m + t_2 \hat{a}_{m+1}^\dagger \hat{b}_m] + h. c. \quad (1)$$

(1)-ში $t_1, t_2 \geq 0$ სიდიდეებს, „გადახტომის ამპლიტუდები“ ეწოდება. თუ გავითვალისწინებთ იმ ფაქტს, რომ კვაზი $1D$ ჯაჭვის მთავარ ნაწილს თერმოდინამიკურ ზღვარში, ანუ $N \rightarrow \infty$ პირობისთვის ვიხილავთ, მაშინ აღნიშნული არე საკმარისად დიდი სიზუსტით შეგვიძლია უწყვეტად ჩავთვალოთ. ამის გამო, (1)-დან მივიღებთ:

$$\hat{H} = \sum_{m=-\infty}^{\infty} [t_1 \hat{b}_m^+ \hat{a}_m + t_2 \hat{a}_{m+1}^+ \hat{b}_m] + h.c. \quad (2)$$

(2)-ის შესაბამისი კვაზი $1D$ ჯაჭვის გრაფიკული გამოსახულება, თეორიული მოდელის თანახმად, ასე გამოიყურება (ნახ.3.):



ნახ.3. სუ-შრიფერ-ჰიგერის თეორიული მოდელის შესაბამისი, საკმარისად გრძელი კვაზი $1D$ ჯაჭვის მთავარი ნაწილის, გრაფიკული გამოსახულება.

იმპულსური წარმოდგენის ჰამილტონიანის საპოვნელად საჭიროა გაქრობის, გაჩენის ოპერატორებისა და დირაკის დელტა ფუნქციისათვის (2)-ში, ფურიეს გარდაქმნა გამოვიყენოთ:

$$\hat{a}_m = \frac{1}{\sqrt{\Omega_{BZ}}} \int_{-\frac{\pi}{l}}^{\frac{\pi}{l}} e^{ikx_m} \hat{a}(k) dk, \quad (3.1.)$$

$$\hat{b}_m = \frac{1}{\sqrt{\Omega_{BZ}}} \int_{-\frac{\pi}{l}}^{\frac{\pi}{l}} e^{ikx_m} \hat{b}(k) dk \quad (3.2.)$$

და

$$\delta(k - k') = \frac{1}{\Omega_{BZ}} \sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{i(k-k')x_m}, \quad (3.3.)$$

სადაც $x_m = ml$ ჯაჭვის ატომთა კოორდინატებს აღნიშნავს, ხოლო l – მესრის მუდმივას.

(3.1.)-ის, (3.2.)-ისა და (3.3.)-ის (2)-ში შეტანით, მივიღებთ გამოსახულებას:

$$\hat{H} = \int_{-\frac{\pi}{l}}^{\frac{\pi}{l}} \hat{A}^+(k) \mathcal{H}(k) \hat{A}(k) dk, \quad (4)$$

სადაც

$$\mathcal{H}(k) = \begin{pmatrix} 0 & t_1 + t_2 e^{-ikl} \\ t_1 + t_2 e^{ikl} & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & d_x(k) - id_y(k) \\ d_x(k) + d_y(k) & 0 \end{pmatrix} \quad (5.1.)$$

და

$$\hat{A}(k) = \begin{pmatrix} \hat{a}(k) \\ \hat{b}(k) \end{pmatrix}. \quad (5.2.)$$

(5.1.)-დან ვადგენთ, რომ

$$d_x(k) = t_1 + t_2 \cos(kl) \quad (6.1.)$$

და

$$d_y(k) = t_2 \sin(kl). \quad (6.2.)$$

(5.1.)-ის შესაბამისი დისპერსიული თანაფარდობის მისაღებად, შეგვიძლია ჰამილტონიანის დიაგონალიზაციას მივმართოთ:

$$\det(\mathcal{H}(k) - E(k)I) = 0, \quad (7)$$

სადაც

$$I = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (8)$$

(7)-ში (5.1.)-ისა და (8)-ის გათვალისწინებით ვიღებთ,

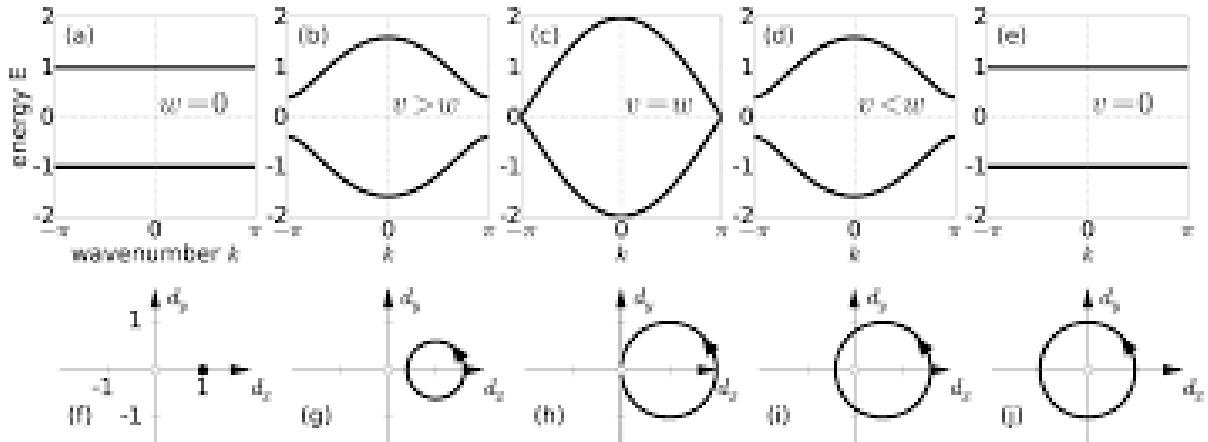
$$E^2(k) = d^2(k) = t_1^2 + t_2^2 + 2t_1 t_2 \cos(kl). \quad (9)$$

(9)-დან აშკარაა, რომ სუ-შრიფერ-ჰიგერის მოდელში განხილული სისტემა ორზონიანია და ამასთანავე,

$$\vec{d}(k) = \{d_x(k), d_y(k)\}. \quad (10)$$

(10)-ის საშუალებით $d_x O d_y$ სიბრტყეზე შეიძლება წრეწირისებრი შეკრული მარყუჟი ავაგოთ (ნახ.4.). ამის მიზეზი საკმარისად გრძელი კვაზი $1D$ ჯაჭვის მთავარი ნაწილის იმპულსური წარმოდგენის შესაბამისი ჰამილტონიანის პერიოდულობაა. (10) რადიუს-ვექტორის მიერ აბსცისთა ღერძთან შედგენილი კუთხე φ , ასე განისაზღვრება:

$$\varphi(k) = \tan^{-1} \left\{ \frac{d_y(k)}{d_x(k)} \right\}. \quad (11)$$



ნახ.4. სუ-შრიფერ-ჰიგერის მოდელის შესაბამისი დისპერსიული მრუდები. აქ $t_1 = v$ და $t_2 = w$, ხოლო $l = 1$. მოცემულ შემთხვევაში, (a) $t_1 = 1, t_2 = 0$; (b) $t_1 = 1, t_2 = 0.6$; (c) $t_1 = t_2 = 1$; (d) $t_1 = 0.6, t_2 = 1$; (e) $t_1 = 0, t_2 = 1$. (f) და (g) შემთხვევებში $v = 0$, რადგან იზოლატორი ტრივიალურია, ხოლო (i) და (j) შემთხვევებში კი $v = 1$ და იზოლატორი ტოპოლოგიურია.

რაც შეეხება (h)-ს, k -ს გარკვეული მნიშვნელობებისათვის ღრეჩო ქრება და მეტალი მიიღება.

(11)-დან შეიძლება განვმარტოთ „დახვევის რიცხვი“, რომელიც საზოგადოდ $d_x O d_y$ სიბრტყის სათავის გარშემო, (10)-ით განსაზღვრული მარყუჟის შემოხვევათა რაოდენობას წარმოადგენს და მთელი სიდიდეა:

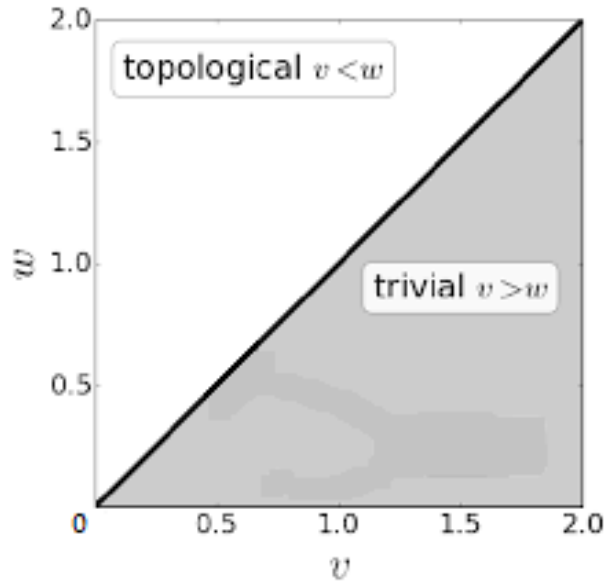
$$v = \frac{1}{2\pi} \int_{-\frac{\pi}{l}}^{\frac{\pi}{l}} \frac{d\varphi(k)}{dk} dk. \quad (12)$$

თუ (12)-ში (6.1.)-ს, (6.2.)-სა და (11)-ს გავითვალისწინებთ, მაშინ საბოლოოდ მივიღებთ:

$$v = \frac{t_2}{2\pi} \oint \frac{t_2 + t_1 \cos(\alpha)}{t_1^2 + t_2^2 + 2t_1 t_2 \cos(\alpha)} d\alpha = \begin{cases} 0, & t_1 > t_2 \\ 1, & t_1 < t_2 \end{cases}. \quad (13)$$

(13)-ში, როცა $t_1 > t_2$ ტოპოლოგიურ იზოლატორს ტრივიალური ეწოდება, ხოლო როცა $t_1 < t_2$, მაშინ – ტოპოლოგიური. აქვე უნდა აღვნიშნოთ, რომ $\alpha = kl$.

(13)-ის გათვალისწინებით შეიძლება, სუ-შრიფერ-ჰიგერის მოდელის შესაბამისი, ფაზური დიაგრამა ავაგოთ (ნახ.5.):



ნახ.5. სუ-შრიფერ-ჰიგერის მოდელის შესაბამისი ფაზური დიაგრამა. ამ შემთხვევაში, $v = t_1$ და $w = t_2$. თუ $t_1 > t_2$ -ზე, ტრიალური (ნაცრისფერი) ფაზა მიიღება, ხოლო თუ $t_1 < t_2$ -ზე – ტოპოლოგიური (თეთრი). როცა $t_1 = t_2$, მაშინ აღნიშნულ ფაზებს ერთმანეთისაგან საზღვარი (შავი უწყვეტი წირი) ყოფს. ამ შემთხვევაში, ჯაჭვის მთავარი ნაწილის შესაბამისი ღრეჩო k -ს გარკვეულ მნიშვნელობებზე ქრება.

(13)-ის მიღება სხვა გზითაც შეიძლება, თუ იმპულსურ წარმოდგენაში შრედინგერის სტაციონარული მდგომარეობების განტოლებას განვიხილავთ, რომელიც მატრიცულად ასე განისაზღვრება:

$$\mathcal{H}(k)\Psi(k) = E(k)\Psi(k), \quad (14)$$

სადაც

$$\Psi(k) = \begin{pmatrix} \psi_+(k) \\ \psi_-(k) \end{pmatrix}. \quad (15)$$

თუ გავითვალისწინებთ ნორმირების პირობას:

$$\|\Psi(k)\| = \sqrt{\Psi^+(k)\Psi(k)} = 1, \quad (16)$$

მაშინ (16)-ში (5.1.)-ის, (9)-ის, (14)-ისა და (15)-ის შეტანით მივიღებთ:

$$\Psi(k) = \frac{1}{\sqrt{2}E(k)} \begin{pmatrix} t_1 + t_2 e^{-ikl} \\ E(k) \end{pmatrix}. \quad (17)$$

თუ საქმე ორზე მეტზონიან სისტემებთან გვაქვს, მაშინ დახვევის რიცხვი (12)-ით ვე-

ღარ განისაზღვრება და ამიტომ, ამ ფორმულის განზოგადებაა საჭირო:

$$v = \frac{1}{\pi} \int_{-\frac{\pi}{l}}^{\frac{\pi}{l}} A(k) dk, \quad (18)$$

სადაც

$$A(k) = i\Psi^+(k) \frac{d\Psi(k)}{dk} \quad (19)$$

ბერის ბმულობას წარმოადგენს. ვინაიდან დახვევის რიცხვი მთელი სიდიდეა, (18)-ში (17)-ის მხოლოდ წმინდა წარმოსახვითი ნაწილის შეტანით, ისევ (13) მიიღება.

ჰალდეინის მოდელი

ჰალდეინის მოდელი ისეთი უმარტივესი ორზონიანი კრისტალური სტრუქტურების კლასს აღწერს, როგორცაა „ჩერნის ტოპოლოგიური იზოლატორები“ [9]. ამგვარი ობიექტების საუკეთესო ფიზიკური მაგალითი, ნახევარმეტალური გრაფენია. ასეთი სტრუქტურები როგორც წესი, კვაზი ორგანზომილებიანია. $\vec{B} = \vec{0}$ ინდუქციის მაგნიტურ ველში კი, ლანდაუს დონეები არ გააჩნია და ზონები ერთმანეთისაგან ღრეჩოთია გამოყოფილი. ჩერნის ტოპოლოგიურ იზოლატორთა არსებობა, ექსპერიმენტულადაა დამტკიცებული [10].

ჰალდეინის მოდელი მჭიდრო ბმის მიახლოებაში, უსპინო ელექტრონებიან კვაზი 2D ტოპოლოგიურ იზოლატორებს აღწერს, რომლებიც არაბრავეს ტიპის ჰექსაგონალური (ფიქსმაგვარი) მესრით ხასიათდება. ამ შემთხვევაში, ერთეულოვანი უჯრედი ორ არაექვივალენტურ ატომს შეიცავს, რის გამოც კრისტალური სტრუქტურა შეიძლება სამკუთხა ბრავეს მესრით აღვწეროთ.

ჰალდეინის მოდელის თანახმად, ჰექსაგონალური მესრის უახლოესი მეზობელი ატომები ერთმანეთთან არ ურთიერთქმედებს, ხოლო მომდევნო უახლოეს ატომებთან ურთიერთქმედებით კი, ე. წ. აარონოვ-ბომის ფაზა ჩნდება. მაშასადამე, აღნიშნული თეორიის შესაბამისი ჰამილტონიანი კოორდინატულ წარმოდგენაში ასე ჩაიწერება:

$$\hat{H} = t \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{c}_i^+ \hat{c}_j + t_2 e^{i\varphi} \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} \hat{c}_i^+ \hat{c}_j + \frac{M}{2} \left[\sum_{i \in A} \hat{c}_i^+ \hat{c}_i - \sum_{j \in B} \hat{c}_j^+ \hat{c}_j \right] + h. c. \quad (20)$$

(20)-ში $t, t_2 \geq 0$ გადახტომის ამპლიტუდებია, φ – აარონოვ-ზომის ფაზა, A და B – ერთეულოვანი უჯრედის არაექვივალენტური ატომები, M – ქვემესრის კიდურა ენერგია, ხოლო $\langle i, j \rangle$ და $\langle\langle i, j \rangle\rangle$ კი შესაბამისად – მესრის i და j უახლოესი და მომდევნო უახლოესი მეზობელი ატომები.

(20)-ის შესაბამისი იმპულსური წარმოდგენის ჰამილტონიანის მისაღებად საჭიროა გაქრობის, გაჩენის ოპერატორებისა და დირაკის დელტა ფუნქციისათვის ფურიეს გარდაქმნა გამოვიყენოთ:

$$\hat{c}_{mn} = \frac{1}{\sqrt{\Omega_{BZ}}} \iint e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_{mn}} \hat{c}(\vec{k}) d\vec{k}, \quad (21.1.)$$

$$\hat{d}_{mn} = \frac{1}{\sqrt{\Omega_{BZ}}} \iint e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}_{mn}} \hat{d}(\vec{k}) d\vec{k} \quad (21.2.)$$

და

$$\delta(\vec{k} - \vec{k}') = \frac{1}{\Omega_{BZ}} \sum_{m,n=-\infty}^{\infty} e^{i(\vec{k}-\vec{k}') \cdot \vec{r}_{mn}}. \quad (21.3.)$$

(21.1.)-ში, (21.2.)-სა და (21.3.)-ში,

$$\vec{k} = \{k_x, k_y\}, \quad (22.1.)$$

და

$$\vec{k}' = \{k'_x, k'_y\}. \quad (22.2.)$$

ამავდროულად,

$$\vec{r}_{mn} = m\vec{b}_1 + n\vec{b}_2 \quad (22.3.)$$

პირდაპირი მესრის ტრანსლაციის ვექტორია, ხოლო (m, n) წყვილი კრისტალური სტრუქტურის ატომთა კოორდინატებს აღნიშნავს.

(21.1.)-ის, (21.2.)-სა და (21.3.)-ის (20)-ში შეტანით მივიღებთ:

$$\hat{H} = \iint \hat{C}^+(\vec{k}) \mathcal{H}(\vec{k}) \hat{C}(\vec{k}) d\vec{k}, \quad (23)$$

სადაც

$$\hat{c}(\vec{k}) = \begin{pmatrix} \hat{c}(\vec{k}) \\ \hat{d}(\vec{k}) \end{pmatrix}, \quad (24.1.)$$

ხოლო

$$\mathcal{H}(\vec{k}) = \begin{pmatrix} h_0(\vec{k}) + h_z(\vec{k}) & h_x(\vec{k}) - ih_y(\vec{k}) \\ h_x(\vec{k}) + ih_y(\vec{k}) & h_0(\vec{k}) - h_z(\vec{k}) \end{pmatrix}. \quad (24.2.)$$

(24.2.) იმპულსური წარმოდგენის მატრიცული ჰამილტონიანია, სადაც

$$h_0(\vec{k}) = 2t_2 \cos(\varphi) \sum_{i=1}^3 \cos(\vec{k} \cdot \vec{b}_i), \quad (25.1.)$$

$$h_z(\vec{k}) = M - 2t_2 \sin(\varphi) \sum_{i=1}^3 \sin(\vec{k} \cdot \vec{b}_i), \quad (25.2.)$$

$$h_x(\vec{k}) = t[1 + \cos(\vec{k} \cdot \vec{b}_1) + \cos(\vec{k} \cdot \vec{b}_2)] \quad (25.3.)$$

და

$$h_y(\vec{k}) = t[\sin(\vec{k} \cdot \vec{b}_2) - \sin(\vec{k} \cdot \vec{b}_1)]. \quad (25.4.)$$

(25.1.)-ში, (25.2.)-ში, (25.3.)-სა და (25.4.)-ში

$$\vec{b}_1 = \vec{a}_2 - \vec{a}_3 = \left(-\frac{\sqrt{3}}{2}, \frac{3}{2}\right), \quad (26.1.)$$

$$\vec{b}_2 = \vec{a}_3 - \vec{a}_1 = \left(-\frac{\sqrt{3}}{2}, -\frac{3}{2}\right) \quad (26.2.)$$

და

$$\vec{b}_3 = \vec{a}_1 - \vec{a}_2 = (\sqrt{3}, 0) \quad (26.3.)$$

პირდაპირი მესრის ელემენტარული ტრანსლაციის ვექტორებია, როცა მესრის მუდმივა ერთი ერთეულის ტოლია (ნახ.6.).

(26.1.)-ში, (26.2.)-სა და (26.3.)-ში

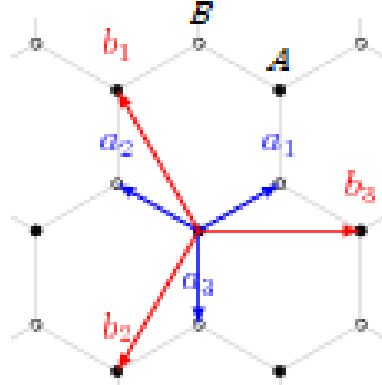
$$\vec{a}_1 = \left(\frac{\sqrt{3}}{2}, \frac{1}{2}\right), \quad (27.1.)$$

$$\vec{a}_2 = \left(-\frac{\sqrt{3}}{2}, \frac{1}{2}\right) \quad (27.2.)$$

და

$$\vec{a}_3 = -(\vec{a}_1 + \vec{a}_2) = (0, -1) \quad (27.3.)$$

უახლოეს მეზობელ ატომებს, ანუ განსხვავებული A და B ქვემესრების კვანძებს შორის განსაზღვრული ელემენტარული ტრანსლაციის ვექტორებია. მესრის მუდმივა ამ შემთხვევაშიც ერთი ერთეულის ტოლია.



ნახ.6. ჰალდენის მოდელის შესაბამისი ჰექსაგონალური, კვანძი $2D$ კრისტალური მესერი, რომლის შავი კვანძებით A ტიპის ატომებია აღნიშნული, ხოლო თეთრით კი – B ტიპის.

(24.2.)-ის შესაბამისი დისპერსიული თანაფარდობის მოსაძებნად, საჭიროა იმპულსურ წარმოდგენაში მატრიცული ფორმით განსაზღვრული შრედინგერის სტაციონარული მდგომარეობების განტოლება განვიხილოთ:

$$\mathcal{H}(\vec{k})\Psi(\vec{k}) = E(\vec{k})\Psi(\vec{k}), \quad (28)$$

სადაც

$$\Psi(\vec{k}) = \begin{pmatrix} \psi_1(\vec{k}) \\ \psi_2(\vec{k}) \end{pmatrix}. \quad (29)$$

(28)-ში (24.2.)-ისა და (29)-ის გათვალისწინებით მივიღებთ:

$$E_{\pm}(\vec{k}) = h_0(\vec{k}) \pm h(\vec{k}), \quad (30)$$

სადაც

$$\vec{h}(\vec{k}) = \{h_x(\vec{k}), h_y(\vec{k}), h_z(\vec{k})\}. \quad (31)$$

(24.2.)-ის შესაბამისი საკუთარი ფუნქციის მოსაძებნად, განვიხილოთ ნორმირების პირობა:

$$\|\Psi(\vec{k})\| = \sqrt{\Psi^+(\vec{k})\Psi(\vec{k})} = 1. \quad (32)$$

(32)-ში (24.2.)-ის, (28)-ისა და (29)-ის გათვალისწინებით, მივიღებთ:

$$\Psi_{\pm}(\vec{k}) = \frac{1}{\sqrt{\pm 2h(\vec{k})[h_z(\vec{k}) \pm h(\vec{k})]}} \begin{pmatrix} h_z(\vec{k}) \pm h(\vec{k}) \\ h_x(\vec{k}) + ih_y(\vec{k}) \end{pmatrix}. \quad (33)$$

ჰალდეინის მოდელის შესაბამისი ტოპოლოგიური ფაზური დიაგრამის ასაგებად, საჭიროა ჩერნის 1-ლი რიცხვის შემოღება, რომელიც (25.1.)-ის, (25.2.)-ის, (25.3.)-ისა და (25.4.)-ის გათვალისწინებით, ასე განისაზღვრება:

$$c_1 = \frac{1}{2} \sum_{\vec{k} \in D} \text{sign}[h_z(\vec{k})] \text{sign} \left[\frac{\partial h_x(\vec{k})}{\partial k_x} \frac{\partial h_y(\vec{k})}{\partial k_y} - \frac{\partial h_y(\vec{k})}{\partial k_x} \frac{\partial h_x(\vec{k})}{\partial k_y} \right], \quad (34)$$

სადაც

$$D = \left\{ \vec{K} = \left(-\frac{4\pi}{3\sqrt{3}}, 0 \right), \vec{K}' = -\vec{K} \right\} \quad (35)$$

გრაფენში დირაკის წერტილთა სიმრავლეა.

(35)-ში,

$$\text{sign}(x) = \begin{cases} 1, & x > 0 \\ -1, & x < 0 \end{cases}. \quad (36)$$

(25.2.)-ში, (25.3.)-სა და (25.4.)-ში (35)-ის გათვალისწინებით, მივიღებთ:

$$h_x(\vec{K}) = h_y(\vec{K}) = h_x(\vec{K}') = h_y(\vec{K}') = 0, \quad (37.1.)$$

$$h_z(\vec{K}) = M - 3\sqrt{3}t_2 \sin(\varphi) \quad (37.2.)$$

და

$$h_z(\vec{K}') = M + 3\sqrt{3}t_2 \sin(\varphi). \quad (37.3.)$$

(34)-ში (25.3.)-ის, (25.4.)-ის, (35)-ის, (37.2.)-ისა და (37.3.)-ის გათვალისწინებით, მივიღებთ [9]:

$$c_1 = \frac{1}{2} \left(\text{sign} \left[\frac{M}{t_2} + 3\sqrt{3} \sin(\varphi) \right] - \text{sign} \left[\frac{M}{t_2} - 3\sqrt{3} \sin(\varphi) \right] \right). \quad (38)$$

ვინაიდან ჰოლის კვანტური იზოლატორები მხოლოდ ლუწ განზომილებებში არსებობს, ამიტომ ჩერნის 1-ლი რიცხვით შეიძლება ნებისმიერი ორზონიანი, კვაზი 2D ტოპოლოგიური იზოლატორი დავახასიათოთ, რომელიც (31)-ით აღიწერება.

ჰალდეინის მოდელის თანახმად, გრაფენის (35) წერტილებში ლოკალური დრეჟო არ არსებობს:

$$h(\vec{k}) = 0, \quad (39)$$

ხოლო ტოპოლოგიური ფაზური დიაგრამის სათავეში კი (ნახ.7.), სისტემა იზოლატორულია:

$$h(\vec{k}) \neq 0. \quad (40)$$

ნახ.7. გვიჩვენებს, რომ

$$|M| = 3\sqrt{3}t_2 \sin(\varphi) \quad (41)$$

დიაგრამას 4 განსხვავებულ იზოლატორულ ფაზად ყოფს, რის გამოც (41)-ით განსაზღვრულ კრიტიკულ წირებზე სისტემა ნახევარმეტალს წარმოადგენს.

ჰალდეინმა აჩვენა, რომ

$$|M| > 3\sqrt{3}t_2 \sin(\varphi) \quad (42)$$

მნიშვნელობებისათვის,

$$c_1 = 0. \quad (43)$$

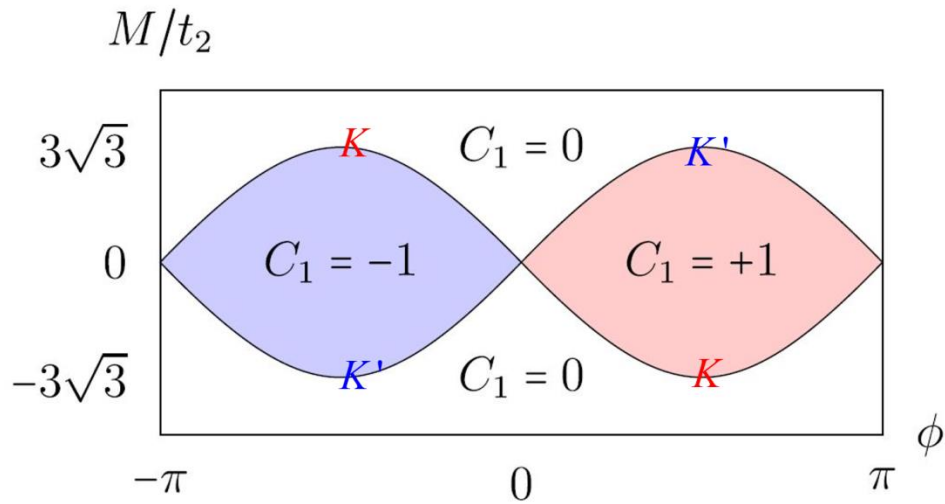
ეს კი იმას ნიშნავს, რომ ტოპოლოგიური იზოლატორი ტრივიალურია. მეორე მხრივ, როცა

$$|M| < 3\sqrt{3}t_2 \sin(\varphi), \quad (44)$$

მაშინ [9]

$$c_1 = \pm 1. \quad (45)$$

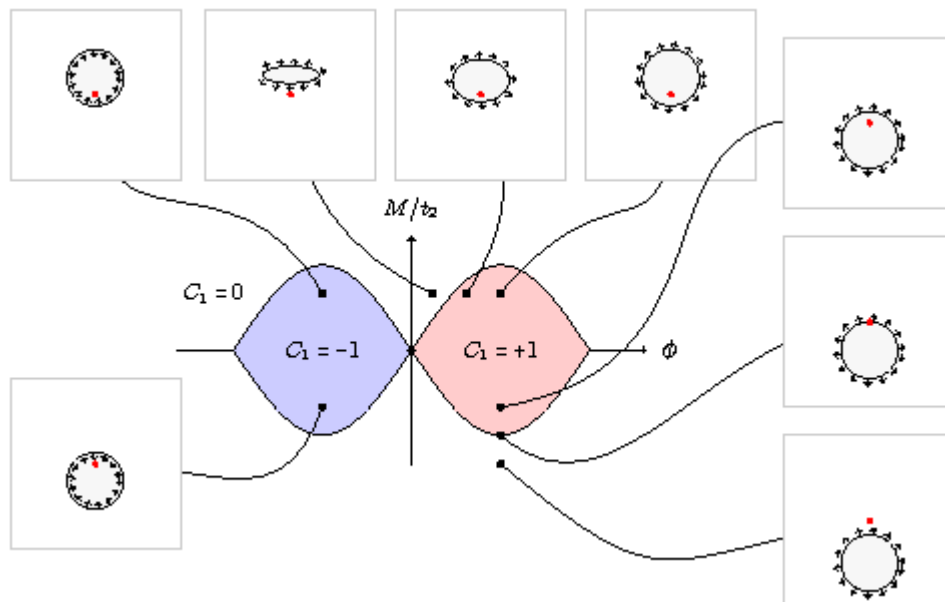
სწორედ (44) განსაზღვრავს ჰალდეინის მოდელის შესაბამის ფაზურ დიაგრამას.



ნახ.7. ჰალდეინის მოდელის შესაბამისი ტოპოლოგიური ფაზური დიაგრამა.

ჩერნის რიცხვი შეიძლება განვიხილოთ, როგორც (31)-ით განსაზღვრული რაიმე ჩაკეტილი ზედაპირის ცენტრში მოთავსებული ე. წ. „დირაკის მონოპოლის“ მიერ შექმნილი მაგნიტური ველის ინდუქციის ჯამური ნაკადი. როცა მონოპოლი ზედაპირის შიგნითაა, ნაკადი არანულოვანია და იზოლატორი – ტოპოლოგიურად არატრივიალური, ხოლო თუ გარეთაა, ნაკადი ქრება და ფაზა ტრივიალურია (ნახ.8.).

ჩერნის განსხვავებული რიცხვების მქონე ორ იზოლატორს შორის ფაზური გადასვლისას, სათავე ჩაკეტილ ზედაპირს ყოველთვის კვეთს და (39)-ის თანახმად, ღრეჩო დირაკის ერთ წერტილში მაინც ქრება.



ნახ.8. ჰალდენის მოდელის შესაბამისი ფაზური გადასვლების გრაფიკული წარმოდგენა. იზოლატორი ტოპოლოგიურია, თუ დირაკის მონოპოლი (წითელი წერტილი) ჩაკეტილი ზედაპირის (ნაცრისფერი სფეროიდი) შიგნითაა. როდესაც ϕ ნიშანს იცვლის, სფეროიდის ორიენტაციაც იცვლება. M -ის შეცვლით კი, ჩაკეტილი ზედაპირის ცენტრი დირაკის მონოპოლის მსგავსად ამოძრავდება.

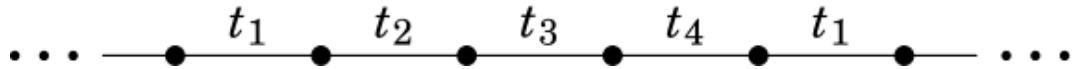
სუ-შრიფერ-ჰიგერის განზოგადებული მოდელი

თუ განსხვავებული გადახტომის ამპლიტუდების რაოდენობა ორზე მეტია, მაშინ

უცვლელი პირობების დროს, საკმარისად გრძელი კვაზი 1D ჯაჭვისათვის, შესაძლებელია სუ-შრიფერ-ჰიგერის მოდელის განზოგადება. ამ შემთხვევაში, კრისტალური მესრის ჰამილტონიანს კოორდინატულ წარმოდგენაში ასეთი სახე ექნება:

$$\hat{H} = \sum_{m=-\infty}^{\infty} [t_1 \hat{b}_m^+ \hat{a}_m + t_2 \hat{c}_m^+ \hat{b}_m + t_3 \hat{d}_m^+ \hat{c}_m + t_4 \hat{a}_{m+1}^+ \hat{d}_m] + h. c. \quad (46)$$

(46)-ში $t_1, t_2, t_3, t_4 \geq 0$ გადახტომის ამპლიტუდებია, ხოლო საკმარისად გრძელი კვაზი 1D ჯაჭვი გრაფიკულად ასე გამოიყურება (ნახ.9.):



ნახ.9. სუ-შრიფერ-ჰიგერის განზოგადებული მოდელის შესაბამისი, საკმარისად გრძელი კვაზი 1D ჯაჭვის მთავარი ნაწილის, გრაფიკული გამოსახულება.

(46)-ის შესაბამისი იმპულსური წარმოდგენის ჰამილტონიანის მისაღებად კი გაქრობის, გაჩენის ოპერატორებისა და დირაკის დელტა ფუნქციისათვის შეგვიძლია ფურიეს გარდაქმნა გამოვიყენოთ:

$$\hat{a}_m = \frac{1}{\sqrt{\Omega_{BZ}}} \int_{-\frac{\pi}{L}}^{\frac{\pi}{L}} e^{ikx_m} \hat{a}(k) dk, \quad (47.1.)$$

$$\hat{b}_m = \frac{1}{\sqrt{\Omega_{BZ}}} \int_{-\frac{\pi}{L}}^{\frac{\pi}{L}} e^{ikx_m} \hat{b}(k) dk, \quad (47.2.)$$

$$\hat{c}_m = \frac{1}{\sqrt{\Omega_{BZ}}} \int_{-\frac{\pi}{L}}^{\frac{\pi}{L}} e^{ikx_m} \hat{c}(k) dk, \quad (47.3.)$$

$$\hat{d}_m = \frac{1}{\sqrt{\Omega_{BZ}}} \int_{-\frac{\pi}{L}}^{\frac{\pi}{L}} e^{ikx_m} \hat{d}(k) dk \quad (47.4.)$$

და

$$\delta(k - k') = \frac{1}{\Omega_{BZ}} \sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{i(k-k')x_m}, \quad (47.5.)$$

სადაც $x_m = mL$ ჯაჭვის ატომთა კოორდინატებია, ხოლო L – მესრის მუდმივა.

თუ (47.1.)-ს, (47.2.)-ს, (47.3.)-ს, (47.4.)-სა და (47.5.)-ს (46)-ში შევიტანთ, მაშინ მივიღებთ:

$$\hat{H} = \int_{-\frac{\pi}{L}}^{\frac{\pi}{L}} \hat{B}^+(k) \mathcal{H}(k) \hat{B}(k) dk, \quad (48)$$

სადაც

$$\mathcal{H}(k) = \begin{pmatrix} 0 & t_1 & 0 & t_4 e^{-ikL} \\ t_1 & 0 & t_2 & 0 \\ 0 & t_2 & 0 & t_3 \\ t_4 e^{ikL} & 0 & t_3 & 0 \end{pmatrix} \quad (49.1.)$$

და

$$\hat{B}(k) = \begin{pmatrix} \hat{a}(k) \\ \hat{b}(k) \\ \hat{c}(k) \\ \hat{d}(k) \end{pmatrix}. \quad (49.2.)$$

როცა

$$I = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (50)$$

მაშინ (7)-ის გათვალისწინებით, (49.1.)-ის შესაბამის დისპერსიულ თანაფარდობას ასეთი სახე ექნება (ნახ.10.):

$$E^4(k) - (t_1^2 + t_2^2 + t_3^2 + t_4^2)E^2(k) + (t_1 t_3)^2 + (t_2 t_4)^2 - 2t_1 t_2 t_3 t_4 \cos(kL) = 0. \quad (51)$$

როცა

$$t_1 = t_3 \quad (52.1.)$$

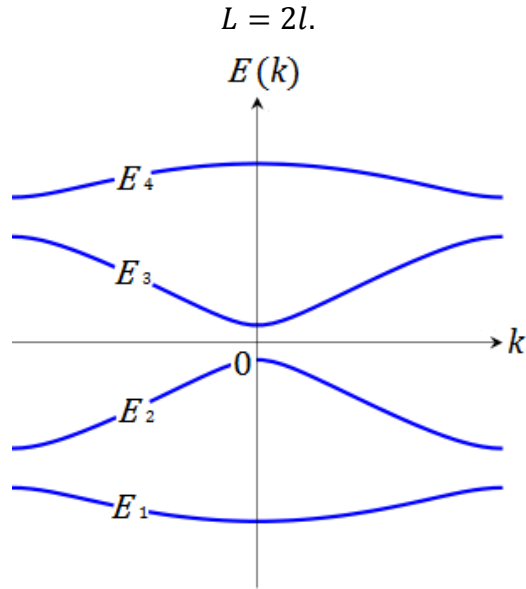
და

$$t_2 = t_4, \quad (52.2.)$$

მაშინ (51)-ში (52.1.)-ისა და (52.2.)-ის გათვალისწინებით მივიღებთ:

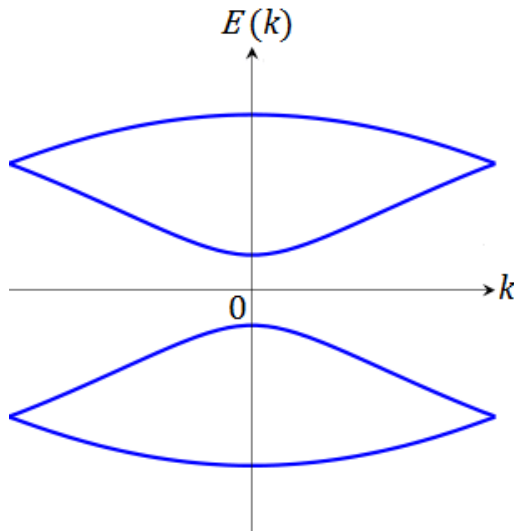
$$E_{\pm}^2(k) = t_1^2 + t_2^2 \pm 2t_1 t_2 \cos\left(\frac{kL}{2}\right), \quad (53)$$

სადაც



ნახ.10. სუ-შრიფერ-ჰიგერის განზოგადებული მოდელის შესაბამისი, დისპერსიული თანაფარდობის, გრაფიკული გამოსახულება.

ფიზიკური თვალსაზრისით, (52.1.) და (52.2.) ცენტრალურის მეზობლად მდებარე ორი ღრეჩოს გაქრობის პირობას წარმოადგენს, რაც იმას ნიშნავს, რომ ოთხზონიანი კრისტალური მესერი – ორზონიანად გარდაიქმნება (ნახ.11.).

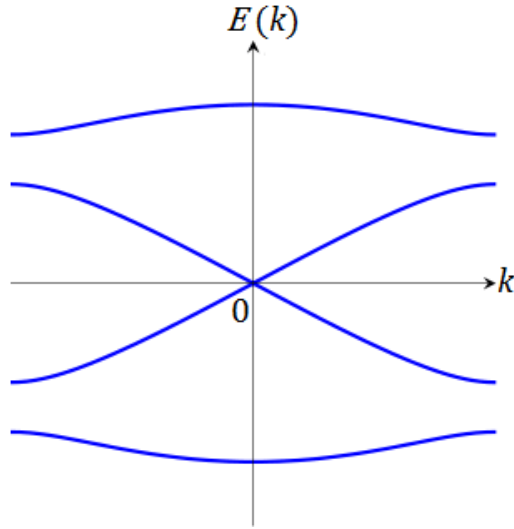


ნახ.11. სუ-შრიფერ-ჰიგერის განზოგადებული მოდელის შესაბამისი დისპერსიული მრუდები, როცა $t_1 = t_3$, $t_2 = t_4$ და $kL = \pm \pi/2$.

მეორე მხრივ, თუ

$$t_1 t_3 = t_2 t_4, \tag{55}$$

მაშინ ცენტრალური ღრეხო ქრება (ნახ.12.).



ნახ.12. სუ-შრიფერ-ჰიგერის განზოგადებული მოდელის შესაბამისი დისპერსიული მრუდები, როცა $t_1 t_3 = t_2 t_4$ და $k = 0$.

აქედან გამომდინარე, თუ დამატებით

$$-\pi \leq kL \leq \pi, \quad (56)$$

მაშინ იზოლატორული მდგომარეობიდან შესაძლებელია – მეტალურზე გადასვლა.

თუ

$$\Psi(k) = \begin{pmatrix} \psi_1(k) \\ \psi_2(k) \\ \psi_3(k) \\ \psi_4(k) \end{pmatrix}, \quad (57)$$

მაშინ (16)-ში (14)-ის, (49.1.)-ისა და (57)-ის გათვალისწინებით, ვიღებთ საკუთარ ფუნქციას:

$$\Psi(k) = \frac{1}{N(k)} \begin{pmatrix} E(k)[t_1 t_2 + t_3 t_4 e^{-ikL}] \\ t_2 [E^2(k) - t_4^2] + t_1 t_3 t_4 e^{-ikL} \\ E(k)[E^2(k) - t_1^2 - t_4^2] \\ t_3 [E^2(k) - t_1^2] + t_1 t_2 t_4 e^{ikL} \end{pmatrix}, \quad (58)$$

სადაც

$$N(k) = E(k) \sqrt{2[E^2(k) - t_1^2 - t_4^2][2E^2(k) - t_1^2 - t_2^2 - t_3^2 - t_4^2]}. \quad (59)$$

(18)-ის ანალოგიურად, ოთხზონიანი სისტემის დახვევის რიცხვი ასე განისაზღვრება:

$$v = \frac{1}{\pi} \int_{-\frac{\pi}{L}}^{\frac{\pi}{L}} A(k) dk, \quad (60)$$

სადაც (19)-ით განსაზღვრული ბერის ბმულობაა გათვალისწინებული.

(60)-ში (51)-ის, (52.1.)-ის, (52.2.)-ის, (58)-ისა და (19)-ის გათვალისწინებით, კვლავ (13)-ს მივიღებთ, რაც განხილული შედეგების ჭეშმარიტებაზე მეტყველებს.

(60)-ში, (51)-ისა და (58)-ის წმინდა წარმოსახვითი ნაწილის გათვალისწინებით, ხოლო შემდეგ ვრცელი გარდაქმნების შესრულებით, ვიღებთ გამოსახულებას:

$$v = v_1 - v_2 + v_3 = \begin{cases} -1, v_1 = v_3 = 0, v_2 = 1 \\ 0, v_2 = v_1 + v_3 \\ 1, v_2 = v_3, v_1 = 1, v_1 = v_2, v_3 = 1 \\ 2, v_1 = v_3 = 1, v_2 = 0 \end{cases} \quad (61)$$

(61)-ში

$$v_1 = \frac{t_3 t_4}{2\pi} \oint \frac{t_3 t_4 + t_1 t_2 \cos(\alpha)}{(t_1 t_2)^2 + (t_3 t_4)^2 + 2t_1 t_2 t_3 t_4 \cos(\alpha)} d\alpha, \quad (62.1.)$$

$$v_2 = \frac{t_1 t_2}{2\pi} \oint \frac{t_1 t_2 + t_3 t_4 \cos(\alpha)}{(t_1 t_2)^2 + (t_3 t_4)^2 + 2t_1 t_2 t_3 t_4 \cos(\alpha)} d\alpha \quad (62.2.)$$

და

$$v_3 = \frac{t_1 t_3}{2\pi} \oint \frac{t_1 t_3 + t_2 t_4 \cos(\alpha)}{(t_1 t_3)^2 + (t_2 t_4)^2 + 2t_1 t_2 t_3 t_4 \cos(\alpha)} d\alpha. \quad (62.3.)$$

(62.1.)-ში, (62.2.)-სა და (62.3.)-ში, $\alpha = kL$.

როგორც ვხედავთ, ოთხატომიანი ერთეულოვანი უჯრედის მქონე საკმარისად გრძელი კვაზი $1D$ ტოპოლოგიური იზოლატორის დახვევის რიცხვი, (61)-ით განისაზღვრება.

(62.1.), (62.2.) და (62.3.) შეიძლება ასე გარდავქმნათ:

$$\frac{1}{2\pi} \oint \frac{x + \cos(\alpha)}{x^{-1} + x + 2 \cos(\alpha)} d\alpha = \begin{cases} 0, & |x| < 1 \\ \frac{1}{2}, & |x| = 1 \\ 1, & |x| > 1 \end{cases} \quad (63)$$

როცა $0 \leq \phi_{1,2,3} \leq \pi/2$ და $-\infty < t < \infty$, მაშინ გადახტომის ამპლიტუდების პარამეტრებით მივიღებთ:

$$t_1 = t \cos(\phi_3) \sin(\phi_1), \quad (64.1.)$$

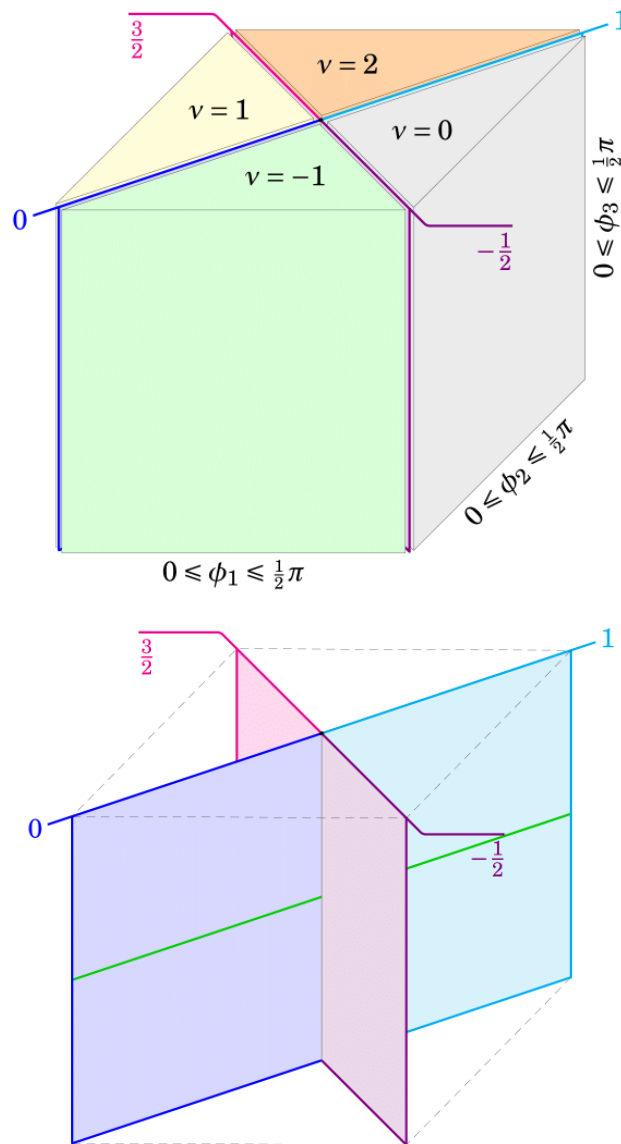
$$t_2 = t \sin(\phi_3) \cos(\phi_2), \quad (64.2.)$$

$$t_3 = t \sin(\phi_3) \sin(\phi_2) \quad (64.3.)$$

და

$$t_4 = t \cos(\phi_3) \cos(\phi_1). \quad (64.4.)$$

(61)-ის, (63)-ის, (64.1.)-ის (64.2.)-ის, (64.3.)-ისა და (64.4.)-ის დახმარებით, შესაძლებელია სუ-შრიფერ-ჰიგერის განზოგადებული მოდელის შესაბამისი ფაზური დიაგრამების აგება (ნახ.13.):



ნახ.13. სუ-შრიფერ-ჰიგერის განზოგადებული მოდელის შესაბამისი ფაზური დიაგრამები.

(61)-დან აშკარაა, რომ საკმარისად გრძელ კვაზი $1D$ კრისტალურ მესერში სულ ოთხი იზოლატორული უბანი არსებობს (ნაცრისფერი, მწვანე, ყვითელი და ნარინჯისფერი არეები, ნახ.13.). ისინი ერთმანეთისაგან ნახევარმეტალური საზღვრებითაა გამოყოფილი, საიდანაც ერთი იზოლატორულია (ლურჯ-ცისფერი სიბრტყე, ნახ.13.), თუ

$$v = \begin{cases} 0 \\ 1 \end{cases} \quad (65)$$

მეორე კი – მეტალური (იასამნისფერ-ვარდისფერი სიბრტყე, ნახ.13.), როცა

$$v = \begin{cases} -\frac{1}{2} \\ \frac{3}{2} \end{cases} \quad (66)$$

(64.1.)-ის, (64.2.)-ის, (64.3.)-ისა და (64.4.)-ის თანახმად, როცა $0 \leq \phi_1, \phi_2 \leq \pi/2$ და

$$\phi_3 = \frac{\pi}{4}, \quad (67)$$

მაშინ სუ-შრიფერ-ჰიგერის მოდელის შესაბამისი ფაზური სტრუქტურა ყალიბდება (ლურჯ-ცისფერ სიბრტყეზე მწვანე მონაკვეთი, ნახ. 13.). მაშასადამე, სუ-შრიფერ-ჰიგერის განზოგადებული მოდელის თანახმად, ერთი იზოლატორული ფაზიდან – მეორეში გადასვლა ხან მეტალური საზღვრითაა შესაძლებელი და ხანაც – იზოლატორულით.

დასკვნა

დასასრულ უნდა აღვნიშნოთ, რომ მოცემული ნაშრომის უმთავრესი დანიშნულება ტოპოლოგიურ იზოლატორთა თეორიულად შესწავლის გაღრმავებაა. ამ მიზნით, უცვლელი პირობების დროს ორზე მეტი განსხვავებული გადახტომის ამპლიტუდისათვის, სუ-შრიფერ-ჰიგერის მოდელი განვაზოგადეთ.

განხილულ შემთხვევაში, ანალიზურად განვსაზღვრეთ იმპულსური წარმოდგენის მატრიცული ჰამილტონიანი, შესაბამისი საკუთარი ფუნქცია და დისპერსიული თანაფარდობა. ამის შემდეგ ავაგეთ დისპერსიული მრუდები და დავადგინეთ პირობები, რომელთა შესრულების შემთხვევაშიც, იზოლატორული ფაზებისაგან – მეტალური მიიღება. ე. ი. სხვა სიტყვებით რომ ვთქვათ, საქმე ფაზურ გარდაქმნებთან გვაქვს.

გარდა ზემოთ ხსენებულისა, საკმარისად გრძელი კვაზი $1D$ კრისტალური მესრისათვის დახვევის რიცხვი განვსაზღვრეთ, რომლის თითოეული შესაკრები გარეგნულად სუ-შრიფერ-ჰიგერის მოდელისათვის ნაპოვნი იმავე სიდიდის შესაბამის გამოსახულებას ჰგავს. ამ პარამეტრით შესაძლებელია სრულყოფილად დავახასიათოთ ნებისმიერი ფაზა.

ბოლოს კი, გადახტომის ამპლიტუდების პარამეტრიზებითა და დახვევის რიცხვის გამოსათვლელი ფორმულით, სუ-შრიფერ-ჰიგერის განზოგადებული მოდელისათვის, ფაზური დიაგრამები ავაგეთ. როგორც აღმოჩნდა, ერთი იზოლატორული ფაზიდან – მეორეში ფაზური გადასვლა, ხან მეტალური საზღვრის გადაკვეთით მიმდინარეობს და ხანაც – იზოლატორულის გავლით.

მიღებული თეორიული შედეგებიდან განსაკუთრებით მნიშვნელოვანი – ანალიზურად ნაპოვნი დისპერსიული თანაფარდობა, იმპულსური წარმოდგენის მატრიცული ტალღური ფუნქცია და დახვევის რიცხვია. მათი დახმარებით შეგვიძლია საკმარისად გრძელი კვაზი $1D$ ჯაჭვის მთავარი ნაწილის შესაბამისი მრავალი ფიზიკური მახასიათებელი მოვძებნოთ, მაგალითად კუთრი ელექტროგამტარობა, ელექტრონული ტალღის სიმკვრივე და სხვ.

გასათვალისწინებელია ის ფაქტიც, რომ სუ-შრიფერ-ჰიგერის განზოგადებული მოდელით დახასიათებული კრისტალური სტრუქტურები ე. წ. ქვანტურ კომპიუტერებში შეიძლება გამოვიყენოთ, როგორც ინფორმაციის გადამტანი ელემენტები, ციფრული მონაცემების შემნახველი მოწყობილობები და ა. შ.

გამოყენებული ლიტერატურა

- [1] B. Andrei Bernevig, Taylor L. Hughes, and Shou-Cheng Zhang. Quantum Spin Hall Effect and Topological Phase Transition in HgTe Quantum Wells. *Science*, 314:1757, 2006.
- [2] Markus König, Steffen Wiedmann, Christoph Brune, Andreas Roth, Hartmut Buhmann, Laurens W. Molenkamp, Xiao-Liang Xi, and Shou-Cheng Zhang. Quantum Spin Hall Insulator State in HgTe Quantum Wells. *Science*, 318(6):766–770, 2007.

- [3] Yoichi Ando. Topological insulator materials. *Journal of the Physical Society of Japan*, 82(10):102001, 2013.
- [4] Shinsei Ryu, Andreas P Schnyder, Akira Furusaki, and AndreasWWLudwig. Topological insulators and superconductors: tenfold way and dimensional hierarchy. *New Journal of Physics*, 12(6):065010, 2010.
- [5] M. Nakahara, *Geometry, Topology and Physics*, Second Edition, 2 ed., Taylor & Francis, 2003.
- [6] K. v. Klitzing, G. Dorda, M. Pepper, New method for high-accuracy determination of the fine-structure constant based on quantized Hall resistance, *Phys. Rev. Lett.* 45 (1980) 494–497. doi:10.1103/PhysRevLett.45.494.
- [7] B. Douçot, B. Duplantier, V. Pasquier, V. Rivasseau (Eds.), *The Quantum Hall Effect*, Poincaré Seminar, Birkhäuser, 2004.
- [8] D. J. Thouless, M. Kohmoto, M. P. Nightingale, M. den Nijs, Quantized Hall conductance in a two-dimensional periodic potential, *Phys. Rev. Lett.* 49 (1982) 405–408. doi:10.1103/PhysRevLett.49.405.
- [9] F. D. M. Haldane, Model for a quantum Hall effect without landau levels: Condensed-matter realization of the "parity anomaly", *Phys. Rev. Lett.* 61 (1988) 2015–2018. doi:10.1103/PhysRevLett.61.2015.
- [10] C.-Z. Chang, J. Zhang, X. Feng, J. Shen, Z. Zhang, M. Guo, K. Li, Y. Ou, P. Wei, L.-L. Wang, Z.-Q. Ji, Y. Feng, S. Ji, X. Chen, J. Jia, X. Dai, Z. Fang, S.-C. Zhang, K. He, Y. Wang, L. Lu, X.-C. Ma, Q.-K. Xue, Experimental observation of the quantum anomalous Hall effect in a magnetic topological insulator, *Science* 340 (2013) 167–170. doi:10.1126/science.1234414.
- [11] L. Fu, C. L. Kane, E. J. Mele, Topological insulators in three dimensions, *Phys. Rev. Lett.* 98 (2007) 106803. doi:10.1103/PhysRevLett.98.106803. arXiv:cond-mat/0607699.
- [12] J. E. Moore, L. Balents, Topological invariants of time-reversal-invariant band structures, *Phys. Rev. B* 75 (2007) 121306. doi:10.1103/PhysRevB.75.121306. arXiv:cond-mat/0607314.
- [13] R. Roy, Topological phases and the quantum spin hall effect in three dimensions, *Phys. Rev. B* 79 (2009) 195322. doi:10.1103/PhysRevB.79.195322. arXiv:cond-mat/0607531.

- [14] M. Z. Hasan, C. L. Kane, Colloquium: Topological insulators, *Rev. Mod. Phys.* 82 (2010) 3045–3067. doi:10.1103/RevModPhys.82.3045. arXiv:1002.3895.
- [15] X.-L. Qi, S.-C. Zhang, Topological insulators and superconductors, *Rev. Mod. Phys.* 83 (2011) 1057. doi:10.1103/RevModPhys.83.1057. arXiv:1008.2026.
- [16] B. A. Bernevig, T. L. Hughes, *Topological Insulators and Topological Superconductors*, Princeton University Press, 2013.
- [17] B. Simon, Holonomy, the quantum adiabatic theorem, and Berry's phase, *Phys. Rev. Lett.* 51 (1983) 2167–2170. doi:10.1103/PhysRevLett.51.2167.
- [18] J. E. Avron, R. Seiler, B. Simon, Homotopy and Quantization in Condensed Matter Physics, *Phys. Rev. Lett.* 51 (1983) 51–53. doi:10.1103/PhysRevLett.51.51.