

Université de Montréal

Étude de la topologie d'un système tripartite

—

Analyse du modèle de Su-Schrieffer-Heeger couplé à des chaînes  
semi-infinies non dimérisées

par

**Alexei Bissonnette**

Département de physique  
Faculté des arts et des sciences

Mémoire présenté en vue de l'obtention du grade de  
Maître ès sciences (M.Sc.)  
en Physique

30 avril 2022



**Université de Montréal**

Faculté des arts et des sciences

---

Ce mémoire intitulé

**Étude de la topologie d'un système tripartite**

—

**Analyse du modèle de Su-Schrieffer-Heeger  
couplé à des chaînes semi-infinies non dimérisées**

présenté par

**Alexei Bissonnette**

a été évalué par un jury composé des personnes suivantes :

*Michel Côté*

---

(président-rapporteur)

*Richard MacKenzie*

---

(directeur de recherche)

*David London*

---

(membre du jury)



# Résumé

---

Nous considérons une chaîne de Su-Schrieffer-Heeger (SSH) à laquelle nous attachons une chaîne semi-infinie non dimérisée aux deux extrémités. Nous étudions l'effet d'un tel couplage sur les propriétés du modèle de SSH. En particulier, la représentation d'un tel système infini sous forme de système effectif fini nous permet d'examiner ses états de surface topologiques. Nous montrons que, comme ce à quoi on s'attendrait, les états de surface initiaux évoluent à mesure que le couplage entre les systèmes augmente. Alors que ce couplage augmente, deux phénomènes sont observés: d'un côté, ces états de surface disparaissent progressivement, et de l'autre côté, de nouveaux états de surface émergent. Ces nouveaux états, que nous appelons états fantômes, sont aussi des états de basse énergie. Une particularité surprenante de ceux-ci est qu'ils sont localisés sur une nouvelle interface: celle-ci est passée du premier (et dernier) site au deuxième (et avant-dernier) site, ce qui suggère que la topologie du système est fortement influencée par les chaînes semi-infinies. La topologie du système tripartite peut être classifiée selon trois régimes. Pour le régime de faible couplage, le système est dans une phase topologique bien définie; pour de grands couplages, il est dans sa phase opposée; pour le régime intermédiaire, sa nature topologique n'est pas encore bien comprise.

mots-clés : modèle de Su-Schrieffer-Heeger (SSH), isolants topologiques, topologie, états de surface, solitons, états fantômes, système ouvert



# Abstract

---

We consider a Su-Schrieffer-Heeger (SSH) chain to which we attach a semi-infinite undimerized chain (lead) to both ends. We study the effect of the openness of the SSH model on its properties. In particular, an accurate representation of the infinite system using an effective Hamiltonian allows us to examine its topological edge states. We show that, as one would expect, the initial edge states evolve as the coupling between the systems is increased. As this coupling grows, these states slowly vanish, while a new type of edge states emerge. These new states, which we refer to as ghost states, are also low-energy states. A surprising property of these states is that they are localized on a new interface: the interface has moved from the first (and last) site to the second (and second to last) site. This suggests that the topology of the system is strongly affected by the leads, with three regimes of behaviour. For very small coupling the system is in a well-defined topological phase; for very large coupling it is in the opposite phase; in the intermediate region, its topological nature is yet to be understood.

keywords: Su-Schrieffer-Heeger (SSH) model, topological insulators, topology, edge states, solitons, ghost states, open system, decay





# Table des matières

---

<b>Résumé</b> .....	5
<b>Abstract</b> .....	7
<b>Liste des tableaux</b> .....	13
<b>Liste des figures</b> .....	15
<b>Liste des sigles et des abréviations</b> .....	17
<b>Remerciements</b> .....	19
<b>Introduction</b> .....	21
Description du contenu du mémoire et des contributions de l'auteur .....	23
<b>Chapitre 1. Description des sous-systèmes à l'étude</b> .....	25
1.1. Description mathématique du système de SSH .....	25
1.1.1. Cas $N$ pair .....	29
1.1.2. Cas $N$ impair .....	32
1.2. Topologie de la chaîne de SSH .....	35
1.2.1. Symétrie chirale .....	35
1.2.2. Retour à la relation de dispersion .....	37
1.2.3. Symétrie chirale et indice d'enroulement .....	37
1.3. Description mathématique des chaînes semi-infinies non dimérisées .....	39
<b>Chapitre 2. Chaîne de SSH attachée à deux chaînes semi-infinies non dimérisées</b> .....	43
2.1. Description du système tripartite à l'étude .....	43
2.2. Chaîne de SSH à $N$ (pair) sites .....	44
2.2.1. Premier cas: $ E  < 2$ non nulle .....	44

2.2.2.	Discussion portant sur la forme des fonctions d'onde associées aux énergies $ E  < 2$ .....	48
2.2.3.	Deuxième cas: $ E  > 2$ .....	49
2.2.4.	Discussion portant sur le spectre d'énergie pour des énergies $ E  > 2$ .....	51
2.2.5.	Troisième cas: $E = 0$ .....	53
2.2.6.	Discussion portant sur la solution générale pour $E = 0$ .....	54
2.3.	Chaîne de SSH à $N$ (impair) sites .....	56
2.3.1.	Premier cas: $ E  < 2$ non nulle .....	56
2.3.2.	Discussion portant sur la forme des fonctions d'onde associées aux énergies $ E  < 2$ .....	57
2.3.3.	Deuxième cas: $ E  > 2$ .....	57
2.3.4.	Discussion portant sur le spectre d'énergie pour des énergies $ E  > 2$ .....	58
2.3.5.	Troisième cas: $E = 0$ .....	59
2.3.6.	Discussion portant sur la solution générale pour $E = 0$ .....	60
2.4.	Discussion portant sur la méthode à l'étude .....	61
<b>Chapitre 3. Même système, nouvelle approche: Hamiltonien effectif .....</b>		<b>63</b>
3.1.	Hamiltonien effectif du système ouvert .....	64
3.2.	Hamiltonien effectif du système à $N - 2$ sites .....	69
3.3.	Valeurs propres et vecteurs propres du système effectif à $N$ sites .....	72
3.3.1.	$N$ pair .....	72
3.3.2.	$N$ impair .....	75
3.4.	Analyse des résultats .....	77
3.5.	Cas particulier: système à 3 sites .....	80
3.5.1.	Énergie propre pour $E \in \mathbb{C}$ .....	80
3.5.2.	Valeurs propres du système .....	81
3.5.3.	Discussion portant sur le cas particulier $N = 3$ .....	85
<b>Chapitre 4. Fonction de Green du système effectif .....</b>		<b>89</b>
4.1.	Discussion portant sur la signification physique des fonctions de Green .....	89
4.2.	Obtention d'une expression pour les éléments diagonaux de la fonction de Green .....	90
4.2.1.	Cas 1: $N$ impair, $n$ impair .....	91
4.2.2.	Cas 2: $N$ impair, $n$ pair .....	93

4.2.3. Cas 3: $N$ pair, $n$ impair.....	94
4.2.4. Cas 4: $N$ pair, $n$ pair.....	94
4.2.5. Résumé des quatre cas étudiés.....	95
4.3. Étude de la densité d'états locale pour le système effectif.....	95
4.3.1. Cas $N$ pair.....	95
4.3.2. Cas $N$ impair.....	97
4.4. Analyse des résultats.....	98
<b>Chapitre 5. Conclusion.....</b>	<b>101</b>
<b>Références bibliographiques.....</b>	<b>105</b>



## Liste des tableaux

---

- 1.1 Tableau présentant les principales différences entre les états de surface d'un système pour lequel  $N$  est pair versus un système pour lequel  $N$  est impair. . . . . 35
- 3.1 Tableau présentant les principales différences entre les états qui émergent pour  $t_L > \sqrt{2}$ ,  $t_L < 1$  et  $t_L$  entre ces deux régions. . . . . 85
- 4.1 Tableau présentant les principales différences entre les états de basse énergie d'un système pour lequel  $N$  est pair versus un système pour lequel  $N$  est impair, dans le cas où  $t_L$  est non nul. . . . . 98



# Liste des figures

---

0.1	Polyacétylène dans sa configuration thermodynamiquement stable <i>trans</i> . . . . .	22
1.1	Chaîne de SSH de longueur $N = 12$ , comportant 6 cellules unitaires. . . . .	26
1.2	États de surface pour $N = 20$ , $t_1 = 1/2$ et $t_2 = 2$ . . . . .	32
1.3	Spectre d'énergie du système en fonction de $r$ pour une chaîne de SSH comportant 16 sites. . . . .	33
1.4	Chaîne de SSH de longueur $N = 11$ . . . . .	33
1.5	États de surface d'énergie nulle pour $N = 21$ . . . . .	34
1.6	Spectre d'énergie du système en fonction de $r$ pour une chaîne de SSH comportant 15 sites. . . . .	36
1.7	Boucles fermées représentant le chemin parcouru par le vecteur $\vec{d}(k)$ pour $k$ qui va de 0 à $\pi$ . . . . .	38
1.8	Illustration des deux moyens de passer de la configuration topologique à la configuration triviale. . . . .	39
1.9	Diagramme de phase du modèle de SSH. . . . .	40
2.1	Chaîne de SSH avec paramètres de saut $t_1$ et $t_2$ dans un système ouvert. . . . .	43
2.2	Graphe présentant les solutions d'énergie de l'équation (2.2.20). . . . .	51
2.3	États de haute énergie qui sortent de la bande d'énergie supérieure de la chaîne de SSH pour $t_1 = 3$ , $t_2 = 0.9$ et $N = 10$ . . . . .	52
2.4	Fonctions d'onde associées à l'état d'énergie nulle pour la chaîne de SSH de longueur $N = 16$ . . . . .	55
2.5	Graphe présentant les solutions d'énergie de l'équation (2.3.8). . . . .	58
2.6	États de haute énergie qui sortent de la bande d'énergie supérieure de la chaîne de SSH pour $t_1 = 3$ , $t_2 = 0.9$ et $N = 9$ . . . . .	59
2.7	Fonctions d'onde associées à l'état d'énergie nulle pour la chaîne de SSH de longueur $N = 15$ . . . . .	60

3.1	Représentation graphique du système tripartite versus celle du système effectif...	64
3.2	Système tripartite dans la limite où $t_L \rightarrow \infty$ .....	72
3.3	Graphe du logarithme de l'inverse du membre de gauche de l'équation (3.3.7)....	75
3.4	Graphe du logarithme de l'inverse du membre de gauche de l'équation (3.3.13)...	77
3.5	Système tripartite pour $t_L = 1$ . ....	79
3.6	Extrémité gauche du système effectif pour $t_L$ grand.....	80
3.7	Spectre d'énergie du modèle de SSH avec $N = 3$ pour $t_1 = 1.4$ , $t_2 = 0.8$ .....	86
4.1	Graphe du logarithme de la densité d'états locale associée à l'énergie zéro pour $r = 1/4$ et différentes valeurs de $t_L$ . ....	96
4.2	Graphe du logarithme de la densité d'états locale associée à l'énergie zéro pour $r = 4$ et différentes valeurs de $t_L$ .....	97
4.3	Graphe du logarithme de la densité d'états locale associée à l'énergie nulle pour le cas $N$ impair. ....	99



## Liste des sigles et des abréviations

---

LDOS	Densité d'états locale
ÉBÉ	États de basse énergie
ÉS	États de surface
ssi	Si et seulement si
SSH	Su-Schrieffer-Heeger



## Remerciements

---

De nombreuses personnes ont contribué à rendre mon expérience aux cycles supérieurs mémorable. Soit par leur mentorat, leur support ou leur amitié, ils m'ont aidé à atteindre mes objectifs.

D'abord, je tiens à remercier Richard MacKenzie de m'avoir donné l'opportunité d'étudier sous sa direction. Tout au long de la dernière année, je me suis toujours senti bien guidé et encadré. Je suis reconnaissant de nos nombreux échanges, qui m'ont permis d'en apprendre beaucoup en un laps de temps limité. Il m'est primordial de souligner sa gentillesse: il m'a toujours fait sentir à ma place.

Ensuite, je tiens à remercier nos collaborateurs Hichem Eleuch et Michael Hilke pour leur aide, leurs suggestions et leur temps.

Puis, je tiens à remercier Dounia, Maude et Nic, non seulement pour nos fréquentes discussions, mais aussi pour leur côté humain. Je suis super content d'avoir fait de votre connaissance, et je vous considère tous comme des amis!

Enfin, je veux remercier mes parents Isabelle et Stéphan, mon frère William, ma copine Anne Marie, et mes amis, qui ont toujours été là pour moi. Vous me donnez la force et la confiance de toujours aller de l'avant. C'est grâce à vous que je suis ici aujourd'hui.



# Introduction

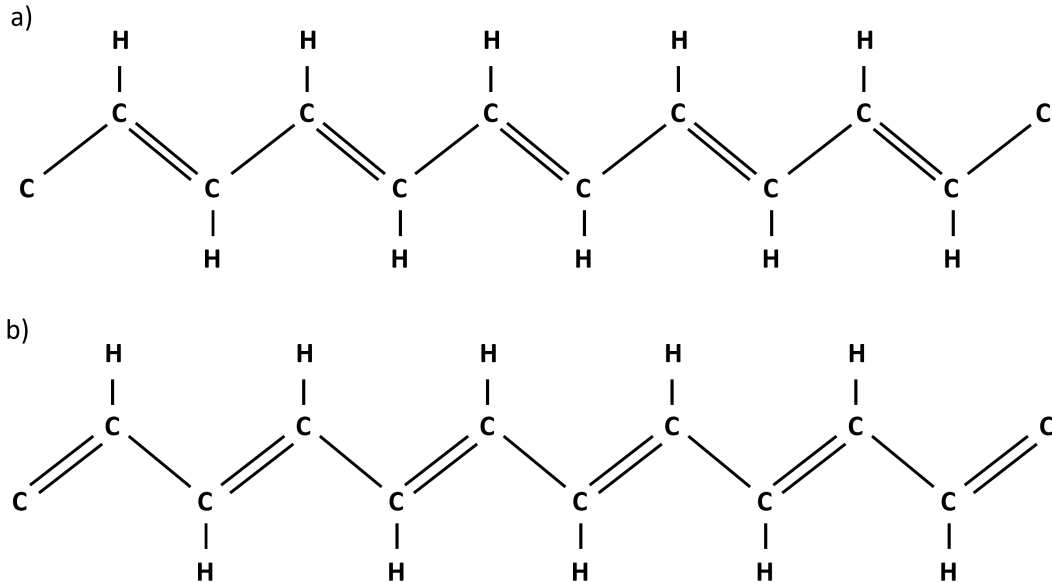
---

Le polyacétylène est un polymère linéaire conjugué dans lequel l'unité de répétition est  $C_2H_2$ . Les atomes de carbone qui le forment, ayant quatre électrons de valence, sont a priori liés les uns aux autres via des liaisons simples, en plus d'être chacun lié à un atome d'hydrogène. Ceci semble indiquer que chaque atome de carbone possède un électron mobile, comme seulement trois des quatre électrons de valence forment des liens. En d'autres mots, on s'attendrait à ce que le polyacétylène soit un conducteur. Ceci dit, dans les années 1930, Rudolf Peierls montra qu'un système ayant de telles propriétés (c'est-à-dire un système périodique, unidimensionnel et ayant un électron par ion) ne peut pas être stable: ce phénomène prend le nom d'instabilité de Peierls [1]. En conséquence, l'hypothèse que les atomes de carbone soient reliés par des liens simples doit être rejetée: ceux-ci sont plutôt liés par une alternance de liens simples et doubles (voir Figure 0.1). En parallèle, cette instabilité engendre l'apparition de bandes d'énergie interdites, ce qui entraîne une discontinuité au sein de la relation de dispersion. Ceci porte à croire que le polymère est en fait un isolant. On verra plus loin que le polyacétylène fait, en réalité, partie d'une autre classe de matériaux, dû à l'apparition de solitons chargés: les isolants topologiques.

Dans sa configuration thermodynamiquement stable *trans*, le polyacétylène peut prendre la forme de l'une de ses deux structures dégénérées: l'une pour laquelle la liaison entre les deux premiers atomes de carbone est simple (A), et l'autre pour laquelle cette liaison est double (B). Dû à l'existence de ces deux états fondamentaux dégénérés, on s'attend à ce qu'émergent des excitations séparant les domaines A et B. C'est dans ce cadre qu'en 1979, Su, Schrieffer et Heeger publièrent l'article *Solitons in Polyacetylene* [2], dans lequel ils étudièrent la possibilité d'observer de telles excitations, sous forme de solitons topologiques [3]. Il s'avère que l'étude de ce polymère par résonance magnétique a prouvé l'existence de tels défauts mobiles [4, 5, 6, 7, 8]. En outre, il a été montré que la conductibilité électrique de ce dernier est fortement affectée par l'existence des solitons. [9, 10].

C'est donc dans cette optique que Su, Schrieffer et Heeger introduisirent un modèle mathématique représentant un tel polymère. Pour décrire l'Hamiltonien du système, ils durent considérer trois contributions: une associée à la création/annihilation d'électrons sur les groupes CH, une associée à l'énergie potentielle des groupes CH, et une associée à l'énergie

cinétique de ces derniers. Si l'on néglige le déplacement des groupes CH, seulement que cette première contribution est à considérer, et l'Hamiltonien du système se réduit à une matrice tridiagonale symétrique pour laquelle tous les éléments de la diagonale principale sont nuls. De plus, dans la limite d'une chaîne parfaite, les éléments sur les diagonales secondaires alternent de manière 2-périodique<sup>1</sup>. De telles simplifications mènent au modèle de SSH, du nom de ses trois fondateurs: c'est précisément ce modèle qui sera étudié dans tout ce qui suit.



**Fig. 0.1.** Polyacétylène dans sa configuration thermodynamiquement stable *trans*. a) Premier état dégénéré, pour lequel la liaison entre les deux premiers atomes est simple. b) Deuxième état dégénéré, pour lequel la liaison entre les deux premiers atomes est double.

Ce modèle est de grande importance en physique de la matière condensée. En effet, il est un excellent point de départ pour présenter plusieurs thèmes importants de ce domaine d'études, tels que le théorème de Bloch, la symétrie chirale, les équivalents adiabatiques, les invariants topologiques, ainsi que la correspondance volume-frontière (bulk-boundary) [11]. En particulier, c'est l'un des plus simples modèles duquel ressortent des propriétés topologiques intéressantes, dont les solitons et les états de surface [12]. Le modèle de SSH fait aussi partie d'une classe de systèmes de grand intérêt: les isolants topologiques. Ces systèmes prennent ce nom parce qu'ils se comportent comme des isolants dans leur volume, mais ont des états conducteurs sur leur surface, dû à leur ordre topologique qui est protégé par des symétries non triviales [13]. L'une des caractéristiques uniques des isolants topologiques est que, pour ceux-ci, l'existence de ces états de basse énergie aux frontières est garantie.

<sup>1</sup> Ceci s'explique par le fait que dans cette limite, les intégrales de saut associées à la probabilité de simultanément créer un électron sur un site tout en annihilant un électron sur le site voisin sont des constantes qui alternent de manière 2-périodique.

En conséquence de la simplicité intrinsèque du modèle de SSH et des résultats topologiques très intéressants qui en émergent, plusieurs variations de celui-ci ont été étudiées pour mieux comprendre la physique derrière une telle classe de systèmes. Par exemple, la dimension du modèle a été augmentée pour étudier le comportement des isolants topologiques de dimension supérieure [14].

Dans le présent mémoire, nous allons effectuer un travail similaire. En effet, nous allons étudier les propriétés topologiques du modèle de SSH, mais dans le cas où celui-ci n'est pas isolé de l'environnement extérieur. Pour ce faire, nous allons attacher le système de SSH à une chaîne semi-infinie à ses deux extrémités, afin de reproduire l'effet d'un système ouvert. Des travaux similaires ont déjà été effectués dans le cas où l'énergie de Fermi des électrons dans ces chaînes externes est prise comme constante [15, 16, 17]. Ce mémoire s'avère être une généralisation de ces derniers, comme nous allons étudier le cas plus général pour lequel cette énergie peut prendre une valeur arbitraire.

## Description du contenu du mémoire et des contributions de l'auteur

L'étude de ce système est ordonnée comme suit. Dans le premier chapitre sont introduits des éléments clés qui seront réutilisés tout au long de ce mémoire: une description complète du modèle de SSH y est faite, dans laquelle ses propriétés topologiques sont déterminées; par la suite, le modèle décrivant une chaîne semi-infinie non dimérisée est présenté. Dans le deuxième chapitre, les valeurs propres et vecteurs propres du système tripartite sont obtenus, et une attention particulière est portée sur ses états de basse énergie. Dans le troisième chapitre, un système effectif<sup>2</sup> équivalent au système tripartite est développé. Entre autres, à l'aide de celui-ci, la topologie du système tripartite dans les limites de faible et de fort couplage est analysée. Dans le quatrième chapitre, la densité d'états locale autour de  $E = 0$  est étudiée afin d'illustrer l'effet qu'engendre l'environnement sur les états de basse énergie dans le cas où le couplage entre les systèmes n'est ni très faible, ni très fort. Le dernier chapitre conclut ce mémoire en créant un pont entre les résultats obtenus dans les différents chapitres. Il énonce enfin des questions qui demeurent en suspens quant à ce qui est à venir.

Notons que le premier chapitre s'avère être une revue de résultats déjà bien connus, alors que le deuxième et le troisième chapitre présentent de nouveaux résultats qui constituent une contribution au domaine à l'étude. Tous les calculs présentés dans ces deux chapitres ont été faits par l'auteur. Les calculs faits au quatrième chapitre ont eux aussi été faits par l'auteur. Ceci dit, le choix de l'ansatz utilisé a été fortement influencé par [18], et cette référence a aussi permis à l'auteur de faire plusieurs contrôles de cohérence («consistency checks»). L'analyse des résultats du quatrième chapitre diffère de celle présentée dans [18]. Subséquemment, les

---

<sup>2</sup> À proprement parler, le mot *efficace* devrait être utilisé, mais nous allons plutôt continuer d'utiliser le terme *effectif* dans tout ce qui suit, comme il est utilisé très couramment dans la littérature.

résultats du deuxième et troisième chapitre ainsi que l'analyse du quatrième chapitre ont été discutés, et parfois raffinés, dans des réunions du groupe de recherche.



# Chapitre 1

---

## Description des sous-systèmes à l'étude

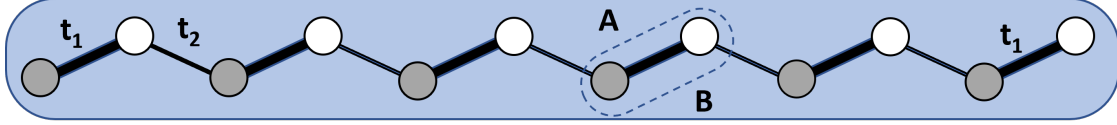
Dans ce premier chapitre, nous allons faire une revue détaillée du modèle mathématique qui représente le système composé d'une chaîne de SSH (Su, Schrieffer et Heeger) isolée. L'approche employée est très similaire à celle utilisée dans [12, 19]; en contraste avec ces références, à quelques endroits, certains détails seront étudiés plus en profondeur dans ce qui suit. Une dérivation complète des vecteurs propres de ce système sera présentée, parallèlement à l'obtention d'une équation transcendante pour ses valeurs propres. Par la suite, quelques notions de topologie utilisées en physique de la matière condensée seront introduites, et elles seront appliquées au modèle à l'étude afin de nous renseigner sur les propriétés topologiques de celui-ci. Enfin, nous allons introduire un modèle mathématique représentant des chaînes semi-infinies isolées. Dans les chapitres suivants, ce modèle jouera le rôle d'un environnement extérieur couplé au système de SSH.

### 1.1. Description mathématique du système de SSH

Le modèle de SSH est caractérisé par trois paramètres: sa longueur  $N$ , son premier paramètre de saut  $t_1$ , et son deuxième paramètre de saut  $t_2$ . Ces deux paramètres de saut sont reliés à la probabilité qu'un électron saute d'un site au site voisin, et sont 2-périodiques tout au long de la chaîne, en raison de la dimérisation de celle-ci.

Un tel système peut être écrit sous forme matricielle comme suit:

$$H_{\text{SSH}} = \begin{pmatrix} 0 & t_1 & & & & & & \\ t_1 & 0 & t_2 & & & & & \\ & t_2 & 0 & t_1 & & & & \\ & & t_1 & 0 & \cdots & & & \\ & & & \cdots & \cdots & t & & \\ & & & & & t & 0 & \end{pmatrix}, \quad (1.1.1)$$



**Fig. 1.1.** Chaîne de SSH de longueur  $N = 12$ , comportant 6 cellules unitaires. La ligne pointillée encadre l’une de ces cellules, qui est composée d’un sous-réseau A (les cercles gris) et d’un sous-réseau B (les cercles blancs). Chaque cellule représente, en analogie avec le polyacétylène, une unité de  $C_2H_2$ . Les lignes épaisses représentent les paramètres de saut  $t_1$ , et les lignes minces représentent les paramètres de saut  $t_2$ . Notons que,  $N$  étant pair, le premier et le dernier paramètre de saut sont tous deux égaux à  $t_1$ .

où le dernier paramètre de saut  $t$  est  $t_1$  si  $N$  est pair et  $t_2$  si  $N$  est impair. La chaîne de longueur paire est illustrée à la Figure 1.1. Sans perte de généralité, on impose que  $t_1$  et  $t_2$  soient réels et positifs puisqu’il y existe toujours une transformation de jauge qui envoie ces nombres positifs vers des nombres complexes de même amplitude. La physique du système ne dépend donc que de l’amplitude de ces paramètres de saut. Ce système peut être résolu de manière analytique: pour ce faire, l’équation de Schrödinger

$$(H_{\text{SSH}} - E) |\psi\rangle = 0 \quad (1.1.2)$$

doit être solutionnée. Les solutions de cette équation se restreignent à celles qui prennent en compte les symétries importantes de l’Hamiltonien. En particulier, on s’attend à ce que celles-ci témoignent de l’invariance sous translation (par un nombre pair de sites) du système. À l’aide de cet argument, nous pouvons poser un ansatz pour les fonctions d’onde du système, via le théorème de Bloch.

**Théorème 1.1.1.** Le théorème de Bloch [20, 21] stipule que l’équation de Schrödinger d’un système composé d’un potentiel périodique et où l’interaction électron-électron est négligeable peut être solutionnée de manière unique par une onde plane multipliée par une fonction périodique,

$$\psi(\vec{x}) = \exp(i\vec{k} \cdot \vec{x}) f_{\vec{k}}(\vec{x}),$$

où  $f_{\vec{k}}(\vec{x})$  est une fonction périodique de même période que  $\mathcal{H}$ , l’Hamiltonien du système, où  $\vec{k}$  est le nombre d’onde, et où  $\vec{x}$  est le vecteur de position.

Comme le système à l’étude est unidimensionnel, on peut laisser tomber la notation vectorielle et considérer  $\vec{k}$  et  $\vec{x}$  comme des scalaires. Évidemment, rien ne nous garantit que l’ansatz qui découle du théorème solutionne notre système, comme celui-ci n’est ni périodique, ni de longueur infinie. Ceci dit, comme cet ansatz respecte les symétries du système à l’étude, il est un bon point de départ: il s’avère que le développement mathématique qui suit nous assurera que l’ansatz résout bel et bien le système<sup>1</sup>. Notons que, comme l’équation de

<sup>1</sup>Une autre manière de se convaincre que la méthode est valide est la suivante. En premier lieu, nous assumons que le système est de longueur infinie: dans ce cas, le théorème de Bloch s’applique, et nous

Schrödinger est du deuxième degré, nous n'avons qu'à trouver deux solutions linéairement indépendantes qui résolvent (1.1.2): la combinaison linéaire de celles-ci donnera la solution générale.

En se basant sur le théorème de Bloch, nous utilisons l'ansatz qui suit pour les fonctions d'onde:

$$|\psi_k\rangle = \sum_{n=0}^{\frac{N}{2}-1} (A_k |2n+1\rangle + B_k |2n+2\rangle) e^{2ink} \quad \text{si } N \text{ est pair,} \quad (1.1.3)$$

$$|\psi_k\rangle = \sum_{n=0}^{\frac{N-1}{2}} (A_k |2n+1\rangle + B_k |2n+2\rangle) e^{2ink} \quad \text{si } N \text{ est impair,} \quad (1.1.4)$$

où, dans ce dernier cas,  $|N+1\rangle = 0$ . Dans tout ce qui suit, nous allons laisser tomber l'indice  $k$  pour alléger la notation:  $\{|\psi_k\rangle, A_k, B_k\} \rightarrow \{|\psi\rangle, A, B\}$ . A priori,  $k$  peut être un nombre purement réel, complexe ou purement imaginaire. Dans le cas où  $k$  est réel, les ansatz sont invariants à l'égard de la transformation  $k \rightarrow k + \pi$ : dans ce cas, il est utile, sans perte de généralité, de définir  $k$  comme étant restreint à l'intervalle  $(-\pi/2, \pi/2]$ . Si  $k$  est complexe, la même observation s'applique pour sa partie réelle.

Pour les deux ansatz obtenus, les composantes centrales de l'équation (1.1.2), c'est-à-dire les composantes 2 à  $N-1$  de cette équation matricielle, peuvent être réécrites sous la forme d'un Hamiltonien de Bloch de dimension  $2 \times 2$  dans l'espace des impulsions,

$$\begin{pmatrix} -E & t_1 + t_2 e^{-2ik} \\ t_1 + t_2 e^{2ik} & -E \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (1.1.5)$$

Pour que cette équation ait des solutions non triviales, le déterminant de la matrice doit être nul, ce qui implique que

$$E^2 = t_1^2 + t_2^2 + 2t_1 t_2 \cos 2k. \quad (1.1.6)$$

Cette expression pour  $E$  reflète le fait que le spectre de (1.1.2) est symétrique: à toute valeur d'énergie  $E$  positive qui solutionne l'équation de Schrödinger correspond une valeur d'énergie  $-E$  négative, qui solutionne aussi cette équation. Dans le cas où  $N$  est impair, cette observation implique qu'il doit nécessairement y avoir un état d'énergie nulle. On remarque que  $E$  respecte l'inégalité  $|t_1 - t_2|^2 \leq E^2 \leq |t_1 + t_2|^2$  si et seulement si  $k$  est un nombre réel. L'ensemble des valeurs de  $k \in \mathbb{R}$  est associé aux états qui se situent dans les bandes d'énergie de la chaîne de SSH (voir, par exemple, la Figure 1.3). Pour des énergies qui se situeraient à l'extérieur de ces bandes d'énergie,  $k$  est un nombre complexe.

---

pouvons utiliser l'ansatz qui en découle. En deuxième lieu, nous ajoutons les conditions frontières aux extrémités de la chaîne: celles-ci témoignent du fait que le système est en fait de longueur finie. La solution qui en découle est parfaitement valide, et elle est générale.

Pour l'instant, nous allons émettre l'hypothèse que  $k$  est réel. Ceci correspond aux solutions qui ont un comportement oscillatoire le long de la chaîne. Dans les prochaines sous-sections, nous allons voir que ce type de solutions ne représente pas nécessairement toutes les solutions de l'équation de Schrödinger. Il sera nécessaire de considérer les valeurs de  $k$  complexes, qui correspondent à des solutions exponentielles qui sont confinées aux bords de la chaîne de SSH.

Pour toute valeur d'énergie  $E$  localisée dans les bandes autres que celles qui se situent sur les frontières de celles-ci (c'est-à-dire autres que les valeurs d'énergie qui correspondent à  $\{\pm(t_1 + t_2), \pm(t_1 - t_2)\}$ ), il y a deux valeurs de  $k$  qui résolvent l'équation (1.1.6), que nous dénotons  $\pm k$ . De cette conclusion,  $k$  peut être restreint à l'intervalle  $(0, \pi/2)$ . Notons aussi que de l'équation (1.1.6), il y existe un  $\phi$  tel que

$$t_1 + t_2 e^{\pm 2ik} = |E| e^{\pm 2i\phi}, \quad (1.1.7)$$

où  $\phi \in (0, \pi/2)$ . Ainsi,  $A$  et  $B$  choisis comme

$$\begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{-i\phi} \\ \pm e^{i\phi} \end{pmatrix}, \quad (1.1.8)$$

résolvent l'équation (1.1.5). Pour obtenir une solution complète du système avec  $N$  pair, on doit prendre la somme de l'ansatz donné par (1.1.3) utilisant  $A$  et  $B$  donnés par (1.1.8) avec la même expression, mais cette fois-ci pour laquelle  $\{k, \phi\} \rightarrow \{-k, -\phi\}$ . Pour  $N$  impair, on fait de même, en remplaçant (1.1.3) par (1.1.4).

La solution complète de l'équation de Schrödinger est donc

$$|\psi_{\pm}\rangle = \sum_{n=0}^{\frac{N}{2}-1} \left\{ \left( C_+ e^{-i\phi} e^{2ink} + C_- e^{i\phi} e^{-2ink} \right) |2n+1\rangle \right. \\ \left. \pm \left( C_+ e^{i\phi} e^{2ink} + C_- e^{-i\phi} e^{-2ink} \right) |2n+2\rangle \right\} \quad (N \text{ pair}), \quad (1.1.9)$$

$$|\psi_{\pm}\rangle = \sum_{n=0}^{\frac{N-1}{2}} \left\{ \left( C_+ e^{-i\phi} e^{2ink} + C_- e^{i\phi} e^{-2ink} \right) |2n+1\rangle \right. \\ \left. \pm \left( C_+ e^{i\phi} e^{2ink} + C_- e^{-i\phi} e^{-2ink} \right) |2n+2\rangle \right\} \quad (N \text{ impair}). \quad (1.1.10)$$

Les coefficients  $C_+$  et  $C_-$  correspondent aux solutions positives et négatives, respectivement, de  $\{k, \phi\}$ . On note qu'après le travail que nous venons d'effectuer, il y existe encore trois inconnus:  $C_{\pm}$  et  $E$  (qui est exprimé sous la forme de  $k$  et  $\phi$ ). Dû à la condition de normalisation et aux deux équations frontières, il est possible d'obtenir une expression pour ces trois paramètres a priori inconnus (3 équations pour 3 inconnus). En particulier, ceci mène à un spectre d'énergie discret.

Dans le cas à l'étude, on considère le modèle de SSH isolé, et donc les équations frontières se réduisent à la première et à la dernière composante de l'équation de Schrödinger (1.1.2).

Étudions celles-ci d'abord pour le cas où  $N$  est pair, puis faisons de même pour le cas où  $N$  est impair.

### 1.1.1. Cas $N$ pair

Pour le cas où  $N$  est pair, les équations frontières se réduisent à l'équation matricielle

$$\begin{pmatrix} -E\psi_1 + t_1\psi_2 \\ t_1\psi_{N-1} - E\psi_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (1.1.11)$$

En insérant la solution (1.1.9) dans cette équation, cette dernière devient

$$\begin{pmatrix} e^{i\phi}e^{-2ik} & e^{-i\phi}e^{2ik} \\ e^{-i\phi}e^{iNk} & e^{i\phi}e^{-iNk} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_+ \\ C_- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (1.1.12)$$

Encore une fois, le déterminant de cette matrice doit s'annuler, ce qui donne une contrainte sur le nombre d'onde  $k$ ,

$$t_1 \sin([N + 2]k) + t_2 \sin(Nk) = 0. \quad (1.1.13)$$

De (1.1.12), les coefficients  $C_{\pm}$  peuvent être réécrits sous la forme

$$\begin{pmatrix} C_+ \\ C_- \end{pmatrix} = C \begin{pmatrix} e^{-i\phi}e^{2ik} \\ -e^{i\phi}e^{-2ik} \end{pmatrix}. \quad (1.1.14)$$

Sans perte de généralité, on peut poser que  $C = 1$  (normalisation de l'état), ce qui implique que la solution (1.1.9) se réduit à

$$|\psi_{\pm}\rangle = \sum_{n=0}^{\frac{N}{2}-1} \left\{ \sin([2n + 2]k - 2\phi) |2n + 1\rangle \pm \sin([2n + 2]k) |2n + 2\rangle \right\}. \quad (1.1.15)$$

Or, cette expression peut être simplifiée davantage: l'équation matricielle (1.1.12) implique aussi que

$$\sin([N + 2]k - 2\phi) = 0. \quad (1.1.16)$$

Comme  $\phi \in (0, \pi/2)$ , on en déduit que

$$2\phi = (N + 2)k + m\pi, \quad (1.1.17)$$

où  $m$  est un entier. Alors, le coefficient devant  $|2n + 1\rangle$  est

$$\sin([2n - N]k)(-1)^m. \quad (1.1.18)$$

Il est possible de montrer que

$$(-1)^m = -\text{sgn}(\sin(Nk)), \quad (1.1.19)$$

de sorte que

$$|\psi_{\pm}\rangle = \sum_{n=0}^{\frac{N}{2}-1} \left\{ \text{sgn}(S_N) S_{N-2n} |2n+1\rangle \pm S_{2n+2} |2n+2\rangle \right\}, \quad (1.1.20)$$

où ici et dans tout ce qui suit,

$$S_n \equiv \sin(nk). \quad (1.1.21)$$

On note que le symbole  $\pm$  correspond au signe de l'énergie du système. Les solutions qui se situent dans les bandes d'énergie (donc des états de «bulk») prennent donc cette forme: ce sont des états oscillatoires dans l'espace.

Retournons à l'équation (1.1.13), qui donne les solutions pour  $k$  en fonction des trois paramètres qui décrivent le système. Cette équation ne peut pas être résolue de manière analytique, mais elle peut être résolue de manière numérique. Le nombre de solutions pour  $k \in (0, \pi/2)$  dépend, évidemment, de  $N$ , mais aussi de  $r \equiv t_1/t_2$ .

Soit,

$$r_c = \frac{N}{N+2}, \quad (1.1.22)$$

une valeur critique de  $r$  [12, 22]. Il est possible de montrer que si  $r > r_c$ , il y a  $N/2$  solutions pour  $k \in (0, \pi/2)$  à l'équation (1.1.13). Notons que pour tout  $k$ , il y existe un partenaire  $-k$  qui solutionne aussi (1.1.13). Ces deux nombres d'onde sont associés à des énergies de même amplitude, mais pour lesquelles le signe diffère<sup>2</sup>. Ainsi, si  $r > r_c$ , le système possède  $N$  solutions, ce qui constitue un ensemble complet de valeurs propres à l'équation de Schrödinger.

Si, au contraire,  $r < r_c$ , il n'y existe que  $(N-1)/2$  solutions à l'équation (1.1.13) pour  $k \in (0, \pi/2)$ , et donc  $N-2$  solutions au total. Comme l'Hamiltonien est hermitien, il doit nécessairement avoir  $N$  valeurs propres et vecteurs propres, ce qui implique que deux solutions de cette équation n'ont pas été trouvées: celles-ci doivent donc être complexes. Pour que l'équation (1.1.13) ait une composante imaginaire nulle dans le cas où  $k \in \mathbb{C}$ , il est impératif d'imposer que la partie réelle de  $k$  soit un multiple de  $\pi/2$ . Sans perte de généralité, on choisit donc

$$k = \frac{\pi}{2} + i\kappa, \quad (1.1.23)$$

<sup>2</sup> Notons que le signe de  $E$  n'est pas relié au signe de  $k$ .

pour  $\kappa$  réel. Par conséquent, la nouvelle équation transcendante pour  $\kappa$  qui en découle est

$$r = \frac{\sinh(N\kappa)}{\sinh([N+2]\kappa)}. \quad (1.1.24)$$

Encore une fois, cette équation ne peut pas être résolue de manière analytique, mais il est possible de vérifier que pour  $r < r_c$ , il y a deux solutions pour  $\kappa$  (de signes opposés), et que pour  $r > r_c$ , il n'y a aucune telle solution. Il s'avère que dans la limite où  $N$  est grand et/ou  $r < r_c$  est petit, les deux solutions d'énergie de norme égale et de signes opposés associées au nombre d'onde complexe  $k = \pi/2 + i\kappa$  sont données par [12]

$$E = \pm t_2 r^{N/2} (1 - r^2) + \mathcal{O}(r^{2N}). \quad (1.1.25)$$

Ainsi, nous avons un ensemble complet de solutions pour  $k$ , et donc pour  $E$ , peu importe  $r$ . Enfin, en définissant  $\kappa$  comme étant la solution positive de (1.1.24), ce type de solution est donné par

$$|\psi_{\pm}\rangle = \sum_{n=0}^{\frac{N}{2}-1} (-1)^n \left\{ \text{Sh}_{N-2n} |2n+1\rangle \pm \text{Sh}_{2n+2} |2n+2\rangle \right\}, \quad (1.1.26)$$

où on définit

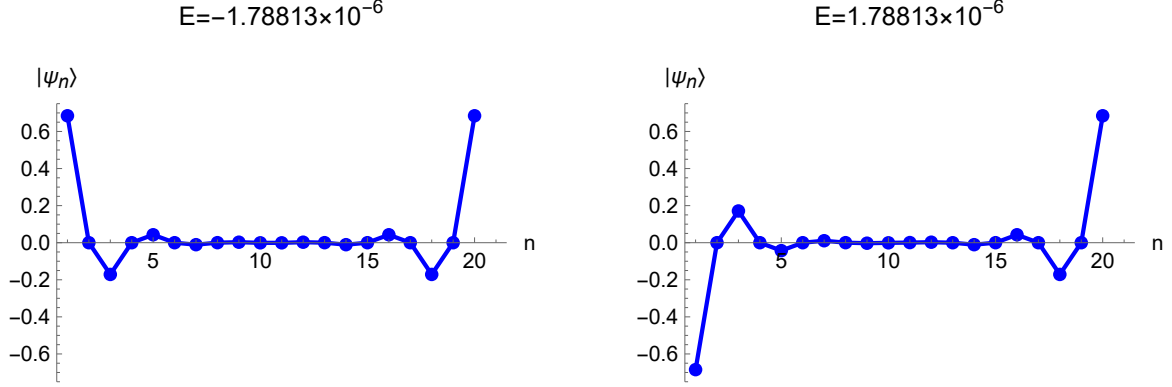
$$\text{Sh}_n \equiv \sinh(n\kappa). \quad (1.1.27)$$

Pour obtenir la solution (1.1.26), l'ansatz à utiliser<sup>3</sup> est encore (1.1.9), à l'exception près que cette fois-ci,  $k = \pi/2 + i\kappa$  et  $\phi = \pi/2 + i\varphi$  sont complexes, au lieu d'être réels. Les équations (1.1.7) et (1.1.8) sont encore valides<sup>4</sup>. De cet ansatz, nous pouvons répéter les calculs qui débutent à (1.1.11) et qui mènent à (1.1.20), à quelques détails près, pour obtenir l'équivalent de cette dernière équation, c'est-à-dire l'équation (1.1.26).

Encore une fois, le symbole  $\pm$  de cette équation correspond au signe de l'énergie du système. Dans ce qui suit, ces solutions seront appelées états de surface, dû au fait que ces états sont fortement localisés sur les frontières de la chaîne de SSH, et ont un comportement exponentiellement décroissant à l'intérieur de celle-ci. On illustre de telles solutions à la Figure 1.2

<sup>3</sup> On note que cet ansatz est valide peu importe le domaine de  $k$ . Nous allons utiliser ce fait dans le prochain chapitre pour étudier un système tripartite composé d'une chaîne de SSH liée à deux chaînes semi-infinies non dimérisées. Tous les scénarios possibles (c'est-à-dire toutes les valeurs de  $E(k)$ ) pourront être étudiés en partant du même ansatz. Seul le cas particulier où  $E = 0$  exigera plus de prudence, dû à la forme de (1.1.7).

<sup>4</sup> On note que dans ce cas,  $A$  et  $B$  prennent la forme d'exponentielles croissantes et décroissantes. Ceci est la signature des états de basse énergie: il y a une forte localisation sur un sous-réseau.



**Fig. 1.2.** États de surface pour  $N = 20$ ,  $t_1 = 1/2$  et  $t_2 = 2$ . Comme  $r = t_1/t_2 = 1/4 < r_c$ , il y a deux tels états, un qui est symétrique et un qui est antisymétrique. Ces états sont fortement localisés sur les deux frontières. On note que leur énergie est très faible, mais qu'elle n'est pas nulle. Enfin, on note aussi que ces états ne sont pas restreints à un sous-réseau: à la gauche, l'état est presque uniquement restreint aux sites impairs, alors qu'à la droite, il est plutôt restreint aux sites pairs.

En résumé, à l'aide des équations transcendantales pour  $k$  et  $\kappa$  données par (1.1.13) et (1.1.24), nous pouvons numériquement trouver les nombres d'onde du système pour un ensemble de  $N$  (pair),  $t_1$  et  $t_2$  donné. Ensuite, l'expression (1.1.6) donne les deux énergies (égales et opposées) associées à chacun de ceux-ci. Le tout nous permet donc de déduire le spectre d'énergie du système. Un tel spectre est présenté à la Figure 1.3, dans le cas où  $N = 16$ . On y illustre la dépendance des solutions d'énergie en fonction de  $r$ .

### 1.1.2. Cas $N$ impair

Pour le cas où  $N$  est impair, repartons de l'équation (1.1.10): on illustre la chaîne associée à ce cas à la Figure 1.4. Les équations frontières se réduisent à l'ensemble d'équations

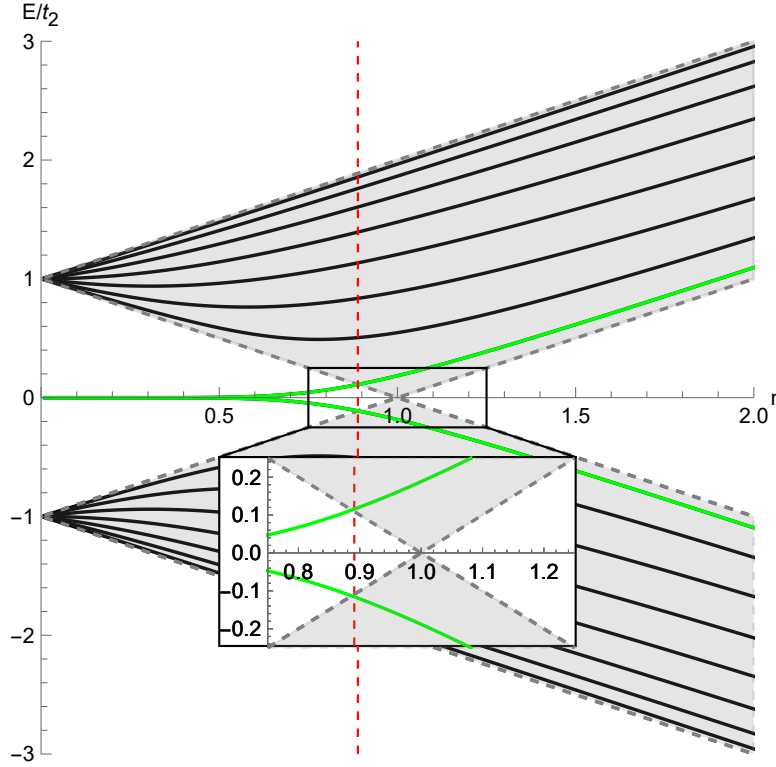
$$\begin{pmatrix} -E\psi_1 + t_1\psi_2 \\ t_2\psi_{N-1} - E\psi_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (1.1.28)$$

En insérant la solution (1.1.10) dans cette équation, celle-ci se réduit à une équation matricielle pour  $C_{\pm}$ :

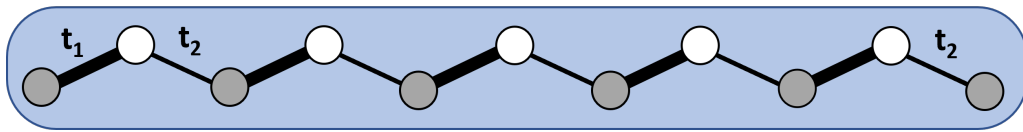
$$\begin{pmatrix} e^{i\phi}e^{-2ik} & e^{-i\phi}e^{2ik} \\ e^{i\phi}e^{i(N-1)k} & e^{-i\phi}e^{-i(N-1)k} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_+ \\ C_- \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (1.1.29)$$

Pour que cette équation soit respectée, le déterminant de la matrice de gauche doit être nul. Ceci implique directement que





**Fig. 1.3.** Spectre d'énergie du système en fonction de  $r$  pour une chaîne de SSH comportant 16 sites. Les pointillés gris délimitent les bandes d'énergie dans la limite thermodynamique ( $N \rightarrow \infty$ ). Les lignes noires présentent les solutions d'énergie dans ces bandes (états oscillatoires). Enfin, les lignes vertes représentent les solutions d'énergie qui sont tantôt dans ces bandes, tantôt à l'extérieur de celles-ci. Le point important à soulever de cette figure est le fait que celle-ci confirme l'existence d'états à l'extérieur des bandes d'énergie dans le cas où  $r < r_c$ : il est clair que  $N$  solutions se situent dans les bandes d'énergie si  $r > r_c$ , et seulement  $N - 2$  si  $r < r_c$ .



**Fig. 1.4.** Chaîne de SSH de longueur  $N = 11$ . À noter que le premier et le dernier paramètre de saut sont tous deux différents. Tout au long de la chaîne, il y a une alternance entre le paramètre  $t_1$  et le paramètre  $t_2$ : ils sont 2-périodiques.

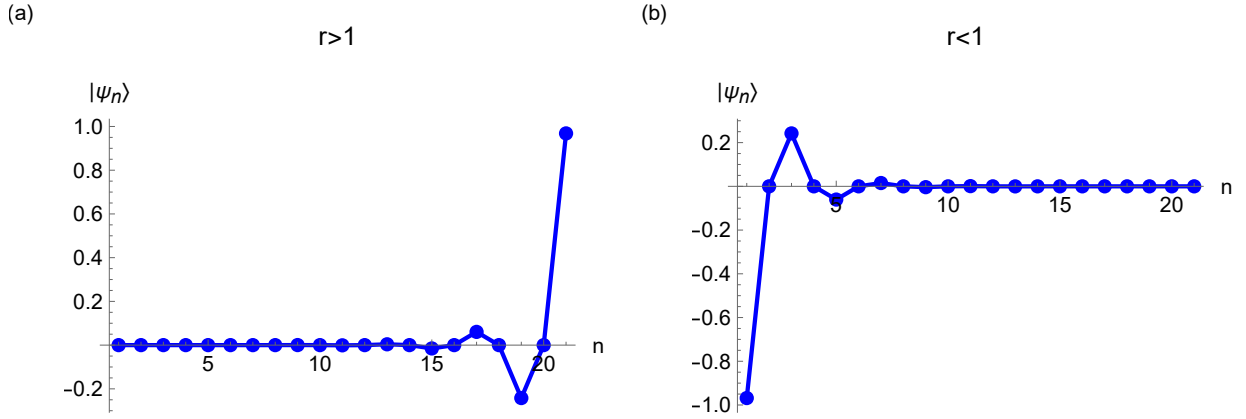
$$\sin([N + 1]k) = 0, \quad (1.1.30)$$

ce qui donne une contrainte sur les valeurs que peut prendre  $k$ . En particulier, il y existe  $N - 1$  solutions pour  $k$  dans l'intervalle  $(-\pi/2, 0) \cap (0, \pi/2)$ , qui viennent en doublet  $\pm k$ . Par conséquent, il manque une solution à l'équation transcendantale de  $k$ , qui encore une fois

doit être complexe. Il s'avère que cette solution est associée à l'état d'énergie nulle. De l'équation (1.1.5), nous voyons que l'équation matricielle se découple si  $E = 0$ , et mène à deux équations indépendantes: l'une pour les coefficients associés aux sites pairs, et l'autre pour les coefficients associés aux sites impairs. L'équation matricielle (1.1.28) nous dit que ces premiers doivent être nuls, ce qui mène à l'expression suivante pour l'état d'énergie nulle,

$$|\psi\rangle = \sum_{n=0}^{\frac{N-1}{2}} (-r)^n |2n+1\rangle. \quad (1.1.31)$$

Dû à l'allure exponentielle de cette expression, on en déduit qu'elle représente un état de surface de longueur de pénétration  $l = 2/|\log r|$  [12]. Il en résulte que si  $r > 1$ , cet état de surface est localisé sur la frontière de droite, et que si  $r < 1$ , cet état de surface est localisé sur la frontière de gauche. Ainsi, pour tout  $r \neq 0$ , ce système possède un et un seul état de surface. Ces états de surface sont présentés à la Figure 1.5.



**Fig. 1.5.** États de surface d'énergie nulle pour  $N = 21$ . Ces états sont fortement localisés sur l'une des deux frontières uniquement. On note aussi que ces états sont restreints à un sous-réseau: ils ont une amplitude non nulle seulement sur les sites impairs. Pour  $r > 1$ , l'état de surface est localisé sur la frontière de droite, alors que pour  $r < 1$ , l'état est localisé sur la frontière de gauche.

En résumé, à l'aide de l'équation (1.1.30), nous pouvons trouver les nombres d'onde associés aux états qui se situent dans les bandes d'énergie de la chaîne de SSH. Puis, à l'aide de l'équation (1.1.6), nous pouvons obtenir les énergies associées à ces nombres d'onde, pour, au final, obtenir le spectre d'énergie du système, qui est représenté à la Figure 1.6.

Il est possible, pour  $N$  impair, de trouver une forme analytique générale pour les fonctions d'onde dans le cas où  $k$  est réel [18], comme ceci a été fait dans le cas  $N$  pair, mais ceci n'est pas nécessaire pour le présent travail. Ce qui est important à retenir est qu'il y a plusieurs

---

Caractérisation des états de surface (ÉS) en fonction de la parité de  $N$

Parité de $N$	# d'ÉS	Énergie des ÉS	Localisation/forme des ÉS
1. $N$ pair			
• $r < r_c$	2	Deux états de basses énergies égales et de signes opposés qui dépendent de $r$ et $N$ . Ces énergies ne tendent vers zéro que si $N \rightarrow \infty$ ou $r \rightarrow 0$ .	États fortement localisés aux deux extrémités de la chaîne. L'un est symétrique et l'autre est antisymétrique. Ils sont tous deux autant localisés sur les sites pairs que les sites impairs.
• $r > r_c$	0		
2. $N$ impair			
• $r < 1$	1	L'énergie de l'état est nulle	État fortement localisé à l'extrémité gauche. L'amplitude est non nulle sur les sites impairs uniquement.
• $r > 1$	1	L'énergie de l'état est nulle	État fortement localisé à l'extrémité droite. L'amplitude est non nulle sur les sites pairs uniquement.

---

**Tableau 1.1.** Tableau présentant les principales différences entre les états de surface d'un système pour lequel  $N$  est pair versus un système pour lequel  $N$  est impair.

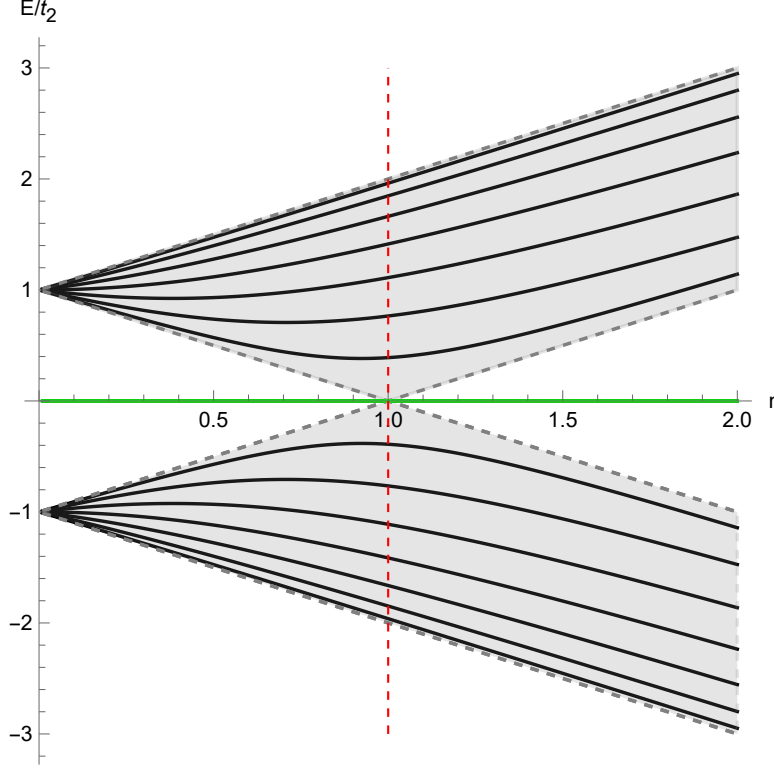
caractéristiques qui distinguent les deux systèmes ( $N$  pair vs  $N$  impair): nous avons présenté ces différences dans le Tableau 1.1.

## 1.2. Topologie de la chaîne de SSH

Nous souhaitons maintenant déterminer les propriétés topologiques de la chaîne de SSH. Pour ce faire, nous devons nous restreindre au cas  $N$  pair. D'ailleurs, dans tout ce qui suit, nous allons principalement mettre l'accent sur ce cas, et discuter seulement brièvement du cas  $N$  impair. Il s'avère que la notion de symétrie est très importante lorsqu'il est question de topologie. Nous allons donc commencer cette section en discutant d'une symétrie particulière, pour ensuite aller au vif du sujet. Nous suivons ici l'approche utilisée dans [11].

### 1.2.1. Symétrie chirale

Avant de parler de topologie, il est impératif d'introduire quelques notions de mécanique quantique, afin de bien tâter le terrain pour ce qui suit. Soit  $q$ , une quantité physique (et donc un nombre réel). Pour que cette quantité puisse être mesurée, la formulation mathématique de la mécanique quantique stipule qu'une observable représentée par un opérateur  $Q$  hermitien (c'est-à-dire vérifiant  $Q = Q^\dagger$ ) doit y être associée. En particulier, si cette



**Fig. 1.6.** Spectre d'énergie du système en fonction de  $r$  pour une chaîne de SSH comportant 15 sites. Les pointillés gris délimitent les bandes d'énergie dans la limite thermodynamique ( $N \rightarrow \infty$ ). Les lignes noires présentent les solutions d'énergie dans ces bandes (états oscillatoires). Enfin, la ligne verte représente la solution d'énergie nulle qui est localisée à gauche pour  $r < 1$ , et à droite pour  $r > 1$ . On observe qu'il y a toujours  $N - 1 = 14$  états dans les bandes d'énergie.

observable commute avec l'Hamiltonien du système, c'est-à-dire qu'elle en est une symétrie,

$$[Q, H] = 0, \quad (1.2.1)$$

une quantité conservée en découle: tout système dans un état propre de l'observable  $Q$  restera en tout temps dans un état propre de  $Q$ , avec la même valeur propre. On peut introduire un opérateur de transformation

$$U = \exp(iqA), \quad (1.2.2)$$

où  $A$  est un générateur. Cet opérateur transforme un état de valeur propre  $q_1$  en un état de valeur propre  $q_2$ . Dans le cas où  $U$  représente une translation spatiale (et envoie de ce fait un état de valeur propre  $x_1$  vers un état de valeur propre  $x_2$ ), le générateur est donné par l'opérateur d'impulsion  $P$ . Dans le cas d'une rotation, le générateur est donné par l'opérateur de moment cinétique  $L$ . Enfin, dans le cas d'une translation temporelle, le générateur est donné par l'Hamiltonien  $H$ . Ainsi, les opérateurs de transformation (et donc les symétries) jouent un rôle clé en mécanique quantique.

Un différent type de symétrie qui ne respecte pas exactement l'équation (1.2.1) existe aussi: la symétrie chirale. On dit que  $\Gamma$  est une symétrie chirale de  $H$  si

$$\{\Gamma, H\} = \Gamma H + H\Gamma = 0, \quad (1.2.3)$$

où  $\Gamma$  est un opérateur unitaire et hermitien, c'est-à-dire qui respecte

$$\Gamma^\dagger \Gamma = \Gamma^2 = 1, \quad (1.2.4)$$

et qui satisfait deux critères supplémentaires. Le premier est que l'opérateur doit être local, c'est-à-dire que les éléments de matrice de  $\Gamma$  pour deux sites provenant de différentes cellules unitaires doivent être nuls. On peut, d'ailleurs, exiger que cet opérateur agisse sur chaque cellule unitaire de la même manière, de sorte à pouvoir l'écrire sous la forme

$$\hat{\Gamma} = \hat{\gamma} \oplus \hat{\gamma} \oplus \dots \oplus \hat{\gamma} = \bigoplus_{m=1}^N \hat{\gamma}, \quad (1.2.5)$$

où  $\hat{\gamma}$  est un opérateur unitaire agissant sur l'espace d'Hilbert composé d'une cellule unitaire, et où  $N$  est le nombre total de telles cellules. Le deuxième critère que doit respecter cet opérateur est d'être robuste, c'est-à-dire qu'il doit être indépendant du désordre spatial auquel le système pourrait être soumis. En d'autres mots, pour de petites perturbations sur les paramètres de saut  $t_1$  et  $t_2$ , l'opérateur doit rester une symétrie chirale.

### 1.2.2. Retour à la relation de dispersion

Grâce à la périodicité de la chaîne de SSH, comme fait à l'équation (1.1.5), on peut réécrire l'Hamiltonien du système sous forme d'Hamiltonien de Bloch dans l'espace des impulsions,

$$\begin{aligned} H(k) &= \begin{pmatrix} 0 & t_1 + t_2 e^{-2ik} \\ t_1 + t_2 e^{2ik} & 0 \end{pmatrix} = (t_1 + t_2 \cos(2k))\sigma_1 + t_2 \sin(2k)\sigma_2 \\ &\equiv d_1(k)\sigma_1 + d_2(k)\sigma_2, \end{aligned} \quad (1.2.6)$$

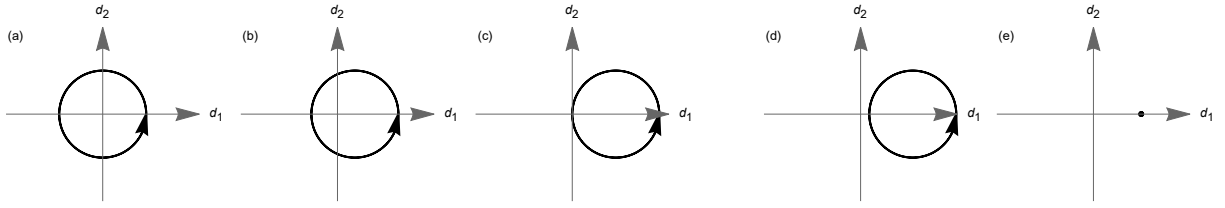
où les  $\sigma_i$  sont des matrices de Pauli. Il s'avère que le tracé du vecteur  $\vec{d}(k)$  dans le plan  $d_1, d_2$  forme une boucle fermée lorsque l'on fait varier le nombre d'onde dans la zone de Brillouin,  $k \in [0, \pi)$ . On présente de telles boucles dans la Figure 1.7, pour différentes valeurs de  $t_1$  et  $t_2$ .

### 1.2.3. Symétrie chirale et indice d'enroulement

La symétrie chirale du modèle de SSH est représentée par l'opérateur

$$\hat{\gamma} = \sigma_3, \quad (1.2.7)$$

qui agit sur les composantes d'une fonction d'onde en multipliant celles qui sont associées au sous-réseau A par 1 et celles qui sont associées au sous-réseau B par  $-1$ . C'est grâce à

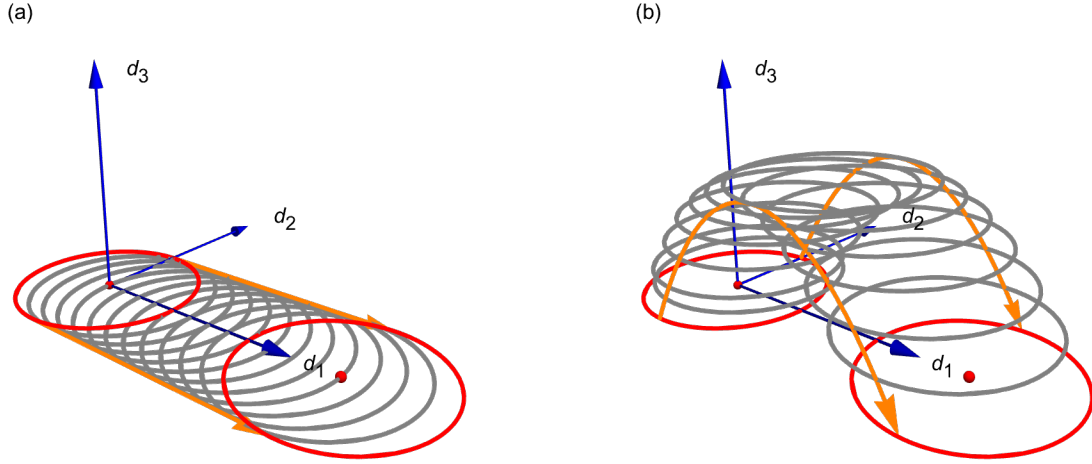


**Fig. 1.7.** Boucles fermées représentant le chemin parcouru par le vecteur  $\vec{d}(k)$  pour  $k$  qui va de 0 à  $\pi$ . On illustre ces boucles pour 5 ensembles de valeurs de  $t_1$  et  $t_2$ : (a):  $t_1 = 0$ ,  $t_2 = 0.5$ ; (b):  $t_1 = 0.2$ ,  $t_2 = 0.5$ ; (c):  $t_1 = 0.5$ ,  $t_2 = 0.5$ ; (d):  $t_1 = 0.6$ ,  $t_2 = 0.5$ ; (e):  $t_1 = 0.55$ ,  $t_2 = 0$

cette symétrie chirale que le vecteur  $\vec{d}(k)$  est restreint dans le plan 1 – 2:  $\vec{d}(k)$  est restreint au plan 1 – 2 si et seulement si  $\sigma_3$  est une symétrie chirale. Autrement, si  $\vec{d}(k) \in \mathbb{R}^3$ ,  $\sigma_3$  n'en est pas une. Nous pouvons utiliser le fait que la pointe de ce vecteur forme une boucle fermée et orientée dans un plan pour définir le nombre entier  $\nu$ , qui représente le nombre d'enroulements que fait cette pointe autour de l'origine. De la Figure 1.7, on peut évaluer ce nombre pour chaque ensemble  $\{t_1, t_2\}$  illustré: dans les graphes (a) et (b), il est égal à 1, alors que dans les graphes (d) et (e), il est égal à 0. Dans le graphe (c), il n'est pas bien défini. Ces graphes illustrent toutes les possibilités pour le modèle de SSH: ce nombre est soit égal à 0, soit égal à 1. Le cas trivial associé à cette première valeur est obtenu si  $t_1 > t_2$ , alors que le cas topologique associé à la deuxième valeur est obtenu si  $t_1 < t_2$ . Pour passer d'un cas à l'autre, on doit soit faire passer le chemin de la pointe de  $\vec{d}(k)$  à travers l'origine du plan, soit le soulever du plan et le placer ailleurs dans celui-ci: ces deux transformations sont présentées à la Figure 1.8. Le premier implique que l'on doit passer à travers la configuration pour laquelle la bande interdite se referme (c'est-à-dire que les bandes d'énergie se rejoignent), où  $t_1 = t_2$ . Le deuxième implique que la symétrie chirale doit être brisée (car  $d_3$  devient non nul).

On dit qu'un Hamiltonien isolant (c'est-à-dire, dans notre cas, un Hamiltonien muni d'une bande interdite) est transformé adiabatiquement si ses paramètres sont changés de manière continue, si les symétries importantes du système sont maintenues tout au long de la transformation et si la bande interdite autour de  $E = 0$  reste ouverte. Deux Hamiltoniens isolants sont des équivalents adiabatiques s'il y existe une déformation adiabatique qui les lie. Ainsi, il y existe toujours une telle déformation pour deux systèmes dans la même phase topologique, alors qu'il n'en existe pas pour deux systèmes dans des phases topologiques distinctes (voir Figure 1.9).

Dans la limite thermodynamique ( $N \rightarrow \infty$ ), on définit un invariant topologique comme un nombre entier qui caractérise un Hamiltonien isolant s'il ne change pas sous une transformation adiabatique. Le nombre d'enroulement défini plus tôt est un exemple d'invariant

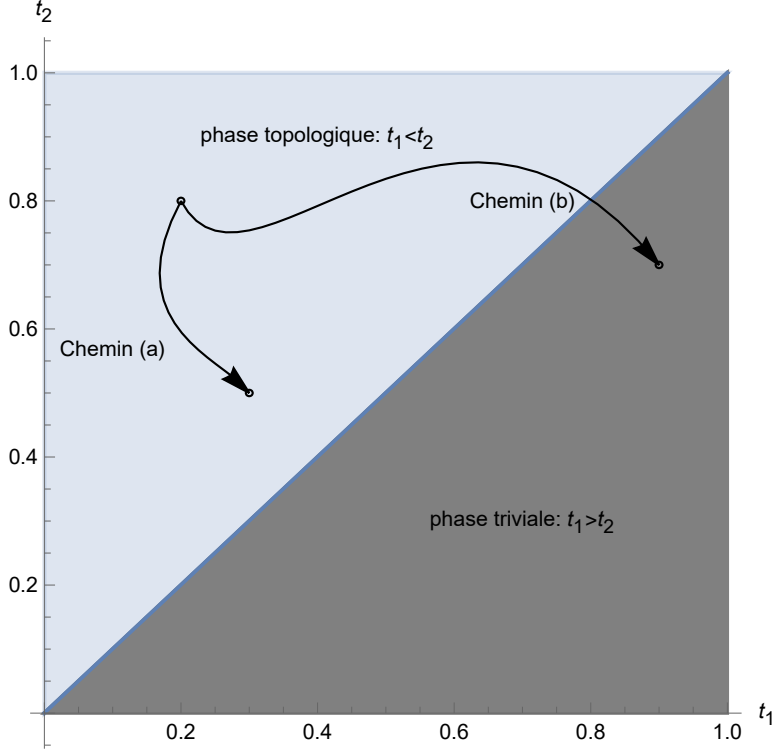


**Fig. 1.8.** Illustration des deux moyens de passer de la configuration topologique à la configuration triviale. On note que ces deux transformations ne sont pas adiabatiques. (a) Passage du cas topologique au cas non topologique en faisant passer  $\vec{d}(k)$  à travers l'origine. On voit, entre autres, que l'on doit passer par une configuration où  $t_1 = t_2$ , et donc pour laquelle la bande interdite entre les bandes d'énergie se referme. (b) Passage du cas topologique au cas non topologique en élevant le vecteur  $\vec{d}(k)$  en dehors du plan  $d_1d_2$ . Dès que  $d_3 \neq 0$ , la symétrie chirale du système est brisée.

topologique: deux systèmes de SSH sont des équivalents adiabatiques si - et seulement si - ils ont tous deux la même valeur de  $\nu$ . Il s'avère que le nombre d'états de surface de la chaîne de SSH est aussi un invariant topologique. En effet, à la section précédente, nous avons montré que pour  $N$  pair, il y avait deux états de surface si et seulement si  $r < r_c \rightarrow 1$  dans la limite thermodynamique, et qu'il n'y en avait aucun si  $r > r_c$ . Cet entier ne change donc pas sous une transformation adiabatique, ce qui implique que le nombre d'états de surface est un invariant topologique.

### 1.3. Description mathématique des chaînes semi-infinies non dimérisées

Pour finir ce chapitre, nous souhaitons décrire mathématiquement une chaîne semi-infinie non dimérisée. Il est possible de représenter cette dernière sous forme de l'Hamiltonien (1.1.1) pour lequel les paramètres de saut  $t_1 = t_2$  sont normalisés à 1 (par souci de simplification)



**Fig. 1.9.** Diagramme de phase du modèle de SSH. Si  $t_1 < t_2$ , le système est dans sa phase topologique, alors que si  $t_1 > t_2$ , le système est dans sa phase triviale. Le chemin (a) liant deux systèmes dans la même phase topologique est associé à une déformation adiabatique, alors qu'il n'y existe pas de telle déformation associée au chemin (b), qui lie deux systèmes dans des phases différentes.

et dans la limite  $N \rightarrow \infty$ ,

$$H_{\text{lead}} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & & & & & & & \\ 1 & 0 & 1 & & & & & & \\ & 1 & 0 & 1 & & & & & \\ & & 1 & 0 & 1 & & & & \\ & & & 1 & 0 & \ddots & & & \\ & & & & 1 & 0 & \ddots & & \\ & & & & & \ddots & \ddots & & \end{pmatrix}. \quad (1.3.1)$$

Physiquement, cet Hamiltonien représente un système dans lequel les particules ont une probabilité égale de sauter à leur droite comme à leur gauche. C'est donc un moyen efficace de simuler un environnement extérieur. Comme la chaîne semi-infinie de cette section ressemble beaucoup au système étudié à la Section 1.1, il suffit ici d'utiliser les résultats déjà obtenus. D'abord, comme  $t_1 = t_2$ , le Théorème 1.1.1 suggère l'ansatz

$$|\psi\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} |n+1\rangle e^{2inq}, \quad (1.3.2)$$



où, par le même argument qu'utilisé dans la Section 1.1,  $q \in (-\pi/2, \pi/2]$ . Encore une fois, nous voulons résoudre l'équation de Schrödinger,

$$(H_{\text{lead}} - E) |\psi\rangle = 0. \quad (1.3.3)$$

Cette équation matricielle se réduit à un système à deux équations: une équation frontière et une équation centrale. Cette dernière, dû à la périodicité de l'Hamiltonien, s'écrit

$$\psi_i - E\psi_{i+1} + \psi_{i+2} = 0 \quad \forall i > 0. \quad (1.3.4)$$

À l'aide de l'ansatz (1.3.2), cette équation revient à résoudre

$$1 - Ee^{2iq} + e^{4iq} = 0, \quad (1.3.5)$$

qui implique que

$$E = 2 \cos(2q). \quad (1.3.6)$$

Notons que pour  $q \in \mathbb{R}$ ,  $|E| \leq 2$ . Dans ce cas, les solutions sont oscillatoires. Si  $q \in \mathbb{C}$ , les solutions d'énergie se trouvent en dehors de cet intervalle. Dans ce cas, les solutions prennent la forme d'exponentielles. La solution générale pour ce système est

$$|\psi\rangle = \sum_0^{\infty} \left\{ D_+ e^{2inq} + D_- e^{-2inq} \right\} |n+1\rangle. \quad (1.3.7)$$

Les conditions frontières permettent ensuite d'obtenir des restrictions sur les coefficients  $D_{\pm}$ . Ceci dit, nous laissons ce problème de côté pour l'instant: nous l'attaquerons dans le prochain chapitre.

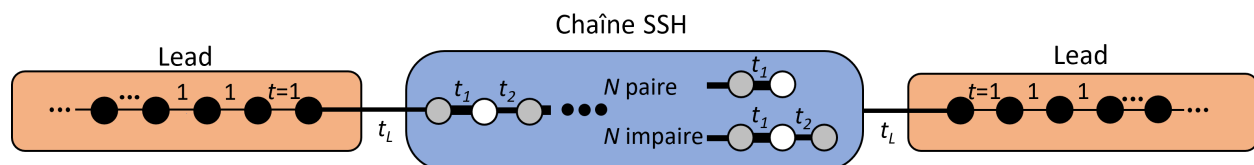


## Chapitre 2

# Chaîne de SSH attachée à deux chaînes semi-infinies non dimérisées

### 2.1. Description du système tripartite à l'étude

Dans le présent chapitre, nous allons introduire le modèle qui est l'objet principal de ce mémoire. Ce modèle a comme objectif de représenter mathématiquement le comportement d'une chaîne de SSH dans un système ouvert. Pour simuler ce système ouvert, nous attachons la chaîne de SSH à deux chaînes semi-infinies non dimérisées (leads<sup>1</sup>), tel qu'illustré à la Figure 2.1.



**Fig. 2.1.** Chaîne de SSH avec paramètres de saut  $t_1$  et  $t_2$  dans un système ouvert. La chaîne est attachée à des leads via la constante de couplage  $t_L$ .

Le but de ce chapitre est de solutionner le système pour ses trois composantes, soit la chaîne de SSH et les deux leads, en portant une attention particulière à la première, comme ce qui nous intéresse est le comportement des électrons dans celle-ci.

Nous allons attaquer ce problème en plusieurs étapes. D'abord, nous allons étudier le cas pour lequel l'énergie du système se situe à l'intérieur de la bande d'énergie des leads, c'est-à-dire tel que  $|E| < 2$ . Le système étant ouvert, les résultats obtenus dans cette sous-section dépendront de plusieurs paramètres libres (les états de la chaîne de SSH seront couplés avec ceux des leads). Nous allons ensuite étudier le cas particulier pour lequel l'énergie du système est à l'extérieur de cette bande d'énergie, ce qui imposera quelques contraintes supplémentaires nous permettant d'obtenir un spectre d'énergie fini et discret

<sup>1</sup> Dans tout ce qui suit, nous allons utiliser ce terme anglais pour alléger le texte.

dans les régions d'énergie pour lesquelles  $|E| > 2$ . À chaque valeur d'énergie de ce spectre, nous pourrions associer un vecteur propre dont nous déterminerons l'expression analytique. Enfin, rappelons que l'ansatz des fonctions d'onde de la chaîne de SSH (équation (1.1.9) pour  $N$  pair et (1.1.10) pour  $N$  impair) dépend d'un paramètre  $\phi$ , dont le comportement est déterminé par l'équation (1.1.7). Ce paramètre n'est pas bien défini pour  $E = 0$ , et donc l'ansatz est aussi mal défini pour  $E = 0$ . Par conséquent, cette énergie particulière ne peut pas être incluse dans le traitement du cas  $|E| < 2$ , qui se base sur cet ansatz. Ainsi, pour  $E = 0$ , un développement indépendant sera présenté, qui n'impliquera pas  $\phi$ . Nous allons terminer les deux prochaines sections (la première étudiant le cas  $N$  pair, la deuxième étudiant le cas  $N$  impair) en nous intéressant à ce cas particulier. Plus spécifiquement, nous allons étudier les vecteurs propres qui en ressortent, et nous allons rencontrer pour la première fois des états dits fantômes, dont l'existence résulte des nouvelles conditions aux frontières auxquelles est sujet le système tripartite.

## 2.2. Chaîne de SSH à $N$ (pair) sites

Nous allons d'abord étudier le cas pour lequel la chaîne de SSH possède un nombre pair de sites. Sous forme matricielle, l'Hamiltonien du système tripartite est donné par

$$H = \left( \begin{array}{c|c|c} H_{\text{lead}} & W & 0 \\ \hline W^\dagger & H_{\text{SSH}} & V \\ \hline 0 & V^\dagger & H_{\text{lead}} \end{array} \right) \quad (2.2.1)$$

où  $H_{\text{lead}}$  est donné par (1.3.1),  $H_{\text{SSH}}$  est donné par (1.1.1) avec  $t = t_1$ ,  $W$  est une matrice  $\infty \times N$  avec seul élément non nul  $W_{\infty,1} = t_L$  et où  $V$  est une matrice  $N \times \infty$  avec seul élément non nul  $V_{N,1} = t_L$ .

### 2.2.1. Premier cas: $|E| < 2$ non nulle

Grâce au premier chapitre, nous avons à notre disposition un ansatz pour chaque composante de la fonction d'onde de ce système: l'expression (1.1.9) donne un ansatz pour la composante associée à la chaîne de SSH<sup>2</sup>, alors que l'expression (1.3.7) donne un ansatz pour les composantes associées aux leads. Sous forme vectorielle, la fonction d'onde du système

<sup>2</sup> On rappelle ici que cet ansatz est valide pour toute énergie étudiée (autre que  $E = 0$ ), peu importe si les bandes de la chaîne de SSH chevauchent celle des leads ou non. On considère séparément le cas  $E = 0$  à la Sous-section 2.2.6.

tripartite s'écrit  $|\psi\rangle = (|\psi_{\text{lead}_1}\rangle^T, |\psi_{\text{SSH}}\rangle^T, |\psi_{\text{lead}_2}\rangle^T)^T$ , où la première composante s'écrit

$$|\psi_{\text{lead}_1}\rangle = \begin{pmatrix} \vdots \\ e^{4iq} \\ e^{2iq} \\ 1 \end{pmatrix} G_+ + \begin{pmatrix} \vdots \\ e^{-4iq} \\ e^{-2iq} \\ 1 \end{pmatrix} G_-, \quad (2.2.2)$$

la deuxième composante s'écrit

$$|\psi_{\text{SSH}}\rangle = \begin{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{-i\phi} \\ \pm e^{i\phi} \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} e^{-i\phi} \\ \pm e^{i\phi} \end{pmatrix} e^{2ik} \\ \vdots \\ \begin{pmatrix} e^{-i\phi} \\ \pm e^{i\phi} \end{pmatrix} e^{i(N-4)k} \\ \begin{pmatrix} e^{-i\phi} \\ \pm e^{i\phi} \end{pmatrix} e^{i(N-2)k} \end{pmatrix} C_+ + \begin{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{i\phi} \\ \pm e^{-i\phi} \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} e^{i\phi} \\ \pm e^{-i\phi} \end{pmatrix} e^{-2ik} \\ \vdots \\ \begin{pmatrix} e^{i\phi} \\ \pm e^{-i\phi} \end{pmatrix} e^{-i(N-4)k} \\ \begin{pmatrix} e^{i\phi} \\ \pm e^{-i\phi} \end{pmatrix} e^{-i(N-2)k} \end{pmatrix} C_-, \quad (2.2.3)$$

et la dernière,

$$|\psi_{\text{lead}_2}\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ e^{2iq} \\ e^{4iq} \\ \vdots \end{pmatrix} D_+ + \begin{pmatrix} 1 \\ e^{-2iq} \\ e^{-4iq} \\ \vdots \end{pmatrix} D_-. \quad (2.2.4)$$

Sans perte de généralité, on impose que la variable associée au nombre d'onde des ansatz des leads concorde, et on la dénote  $q$ . On note que ce sont les équations centrales associées à chaque composante du système qui mènent à ces expressions générales. Il est maintenant impératif de résoudre les équations frontières du système tripartite afin de déterminer les inconnus du système, qui sont  $C_{\pm}$ ,  $D_{\pm}$ ,  $G_{\pm}$ , ainsi que l'énergie  $E$ , qui se retrouve dans ces ansatz sous trois formes,  $k$ ,  $q$  et  $\phi$ . Il y a deux conditions frontières par interface, donc deux équations reliant la lead de gauche et la chaîne de SSH, et deux équations reliant la chaîne de SSH et la lead de droite. Les conditions aux frontières du système tripartite sont les suivantes:

$$t_L |\psi_{\text{lead}_{1,1}}\rangle - E |\psi_{\text{SSH}_1}\rangle + t_1 |\psi_{\text{SSH}_2}\rangle = 0, \quad (2.2.5)$$

$$|\psi_{\text{lead}_{1,2}}\rangle - E |\psi_{\text{lead}_{1,1}}\rangle + t_L |\psi_{\text{SSH}_1}\rangle = 0, \quad (2.2.6)$$

$$t_1 |\psi_{\text{SSH}_{N-1}}\rangle - E |\psi_{\text{SSH}_N}\rangle + t_L |\psi_{\text{lead}_{2,1}}\rangle = 0, \quad (2.2.7)$$

$$t_L |\psi_{\text{SSH}_N}\rangle - E |\psi_{\text{lead}_{2,1}}\rangle + |\psi_{\text{lead}_{2,2}}\rangle = 0. \quad (2.2.8)$$

Il s'avère qu'il y a 4 équations frontières pour un total de  $(7 - 1)$  inconnus (dû à la condition de normalisation), ce qui implique que la solution va devoir dépendre de  $6 - 4 = 2$  paramètres libres.

Pour résoudre le problème, il est utile de séparer la solution en deux solutions linéairement indépendantes et complémentaires: une fois recombinaées, celles-ci donneront la solution générale. Il s'avère que la constante de proportionnalité entre ces deux solutions particulières sera le premier paramètre libre (nous obtiendrons donc deux solutions indépendantes), alors que l'énergie du système sera le second.

### **Première solution**

Dans ce premier cas, il est assumé que la particule provient de la lead de gauche, ce qui implique que le coefficient  $D_-$  soit nul (qui représenterait une particule incidente de la droite). Sans perte de généralité, la condition de normalisation peut être choisie telle que le coefficient  $G_+$  soit égal à 1. Les quatre équations frontières permettent de déterminer explicitement les quatre coefficients inconnus restants.

D'un côté, une fois résolues, les équations (2.2.5) et (2.2.6) mènent à deux relations entre les coefficients  $C_{\pm}$  et  $G_-$ . En particulier, la solution de ces deux équations peut s'écrire sous la forme d'une expression pour les coefficients  $C_{\pm}$  en fonction de  $G_-$ :

$$\begin{pmatrix} C_+ \\ C_- \end{pmatrix} = \frac{1}{Z} \begin{pmatrix} e^{i\phi}(A + G_-B) \\ -e^{-i\phi}(X + G_-Y) \end{pmatrix}, \quad (2.2.9)$$

où

$$\begin{pmatrix} A \\ B \\ X \\ Y \\ Z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{-2iq}t_2(t_1e^{2ik} + t_2) - t_L^2E \\ e^{2iq}t_2(t_1e^{2ik} + t_2) - t_L^2E \\ e^{-2iq}t_2(t_1e^{-2ik} + t_2) - t_L^2E \\ e^{2iq}t_2(t_1e^{2ik} + t_2) - t_L^2E \\ t_1t_2t_L(e^{2ik} - e^{-2ik}) \end{pmatrix}. \quad (2.2.10)$$

D'un autre côté, les équations (2.2.7) et (2.2.8) mènent à deux relations qui relient les coefficients  $C_{\pm}$  et  $D_+$ , et donc, à l'aide de l'expression (2.2.9), à deux équations pour deux inconnus,  $G_-$  et  $D_+$ . La résolution de celles-ci va se traduire en une expression pour  $G_-$ ,

$$G_- = - \left( \frac{Ae^{iNk}(t_2E - t_L^2e^{2iq}(t_1e^{-2ik} + t_2)) - Xe^{-iNk}(t_2E - t_L^2e^{2iq}(t_1e^{2ik} + t_2))}{Be^{iNk}(t_2E - t_L^2e^{2iq}(t_1e^{-2ik} + t_2)) - Ye^{-iNk}(t_2E - t_L^2e^{2iq}(t_1e^{2ik} + t_2))} \right). \quad (2.2.11)$$

À l'aide de cette expression pour  $G_-$ , l'expression (2.2.9) se réduit à

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} C_+ \\ C_- \end{pmatrix} &= -\frac{\sin(2q)t_L}{e^{2iq}(t_2(t_2^2 - t_L^2 E^2 + t_L^2)S_N + t_1(t_2^2 S_{N+2} + t_L^4 S_{N-2}))} \\ &\quad \times \begin{pmatrix} e^{i\phi} e^{-iNk} (t_2(E - t_L^2 e^{2iq}) - t_1 e^{2ik} t_L^2 e^{2iq}) \\ -e^{-i\phi} e^{iNk} (t_2(E - t_L^2 e^{2iq}) - t_1 e^{-2ik} t_L^2 e^{2iq}) \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (2.2.12)$$

En appliquant ces expressions pour  $C_{\pm}$  dans l'ansatz donné par (2.2.3), les éléments de la fonction d'onde pour la chaîne de SSH sont, au final, donnés par

$$\begin{aligned} |\psi_{\text{SSH},n}\rangle &= -\frac{2i \sin(2q)t_L e^{-2iq}}{t_2(t_2^2 - t_L^2 E^2 + t_L^2)S_N + t_1(t_2^2 S_{N+2} + t_L^4 S_{N-2})} \\ &\quad \times \begin{cases} t_1 t_L^2 e^{2iq} S_{N-n-1} - t_2 (E - t_L^2 e^{2iq}) S_{N-n+1} & \text{si } n \text{ est impair,} \\ (E t_L^2 e^{2iq} - t_2^2) S_{N-n} - t_1 t_2 S_{N-n+2} & \text{si } n \text{ est pair.} \end{cases} \end{aligned} \quad (2.2.13)$$

### Deuxième solution

Le cas complémentaire au précédent est maintenant étudié, celui pour lequel la particule provient de la lead de droite, ce qui implique que le coefficient  $G_+$  soit nul. Cette fois-ci, la condition de normalisation utilisée est celle pour laquelle le coefficient  $D_-$  est mis à 1. Encore une fois, les quatre équations frontières permettent de déterminer explicitement les quatre coefficients inconnus restants. Ceci dit, au lieu de résoudre le problème au long, on peut simplement utiliser un argument de symétrie pour obtenir les entrées de la fonction d'onde correspondante. Comme la seule différence entre cette solution et la solution précédente est liée à l'origine de l'électron incident (il vient de la droite au lieu de la gauche), il doit y avoir une correspondance entre les composantes des deux solutions. En particulier, si on inverse la direction de propagation de l'électron dans la première solution  $q \rightarrow -q$ , et qu'on inverse l'ordre de comptage des sites (le site 1 pour la première solution correspond au site  $N$  pour la deuxième, le site 2 pour la première solution correspond au site  $N - 1$  pour la deuxième, etc), c'est-à-dire qu'on applique la transformation  $N - n + 1 \rightarrow n$ , alors, en prenant en compte que la chaîne est de longueur paire, et donc que les sites pairs de la première solution correspondent aux sites impairs de la deuxième solution, et que les sites impairs de la première solution correspondent aux sites pairs de la deuxième solution, on obtient une expression pour les entrées de la fonction d'onde associée à la deuxième solution,

$$\begin{aligned}
|\psi_{\text{SSH},n}\rangle &= \frac{2i \sin(2q)t_L e^{2iq}}{t_2(t_2^2 - t_L^2 E^2 + t_L^4)S_N + t_1(t_2^2 S_{N+2} + t_L^4 S_{N-2})} \\
&\times \begin{cases} (Et_L^2 e^{-2iq} - t_2^2)S_{n-1} - t_1 t_2 S_{n+1} & \text{si } n \text{ est impair,} \\ t_1 t_L^2 e^{-2iq} S_{n-2} - t_2(E - t_L^2 e^{-2iq})S_n & \text{si } n \text{ est pair.} \end{cases} \quad (2.2.14)
\end{aligned}$$

### Solution générale

La solution générale est donnée par une combinaison linéaire des deux solutions qui viennent d'être établies,

$$\begin{aligned}
|\Psi_{\text{SSH},n}\rangle &= \frac{2i \sin(2q)t_L}{t_2(t_2^2 - t_L^2 E^2 + t_L^4)S_N + t_1(t_2^2 S_{N+2} + t_L^4 S_{N-2})} \\
&\times \begin{cases} e^{2iq} \left( (Et_L^2 e^{-2iq} - t_2^2)S_{n-1} - t_1 t_2 S_{n+1} \right) \\ \quad + \alpha e^{-2iq} \left( t_1 t_L^2 e^{2iq} S_{N-n-1} - t_2(E - t_L^2 e^{2iq})S_{N-n+1} \right) & \text{si } n \text{ est impair,} \\ e^{2iq} \left( t_1 t_L^2 e^{-2iq} S_{n-2} - t_2(E - t_L^2 e^{-2iq})S_n \right) \\ \quad + \alpha e^{-2iq} \left( (Et_L^2 e^{2iq} - t_2^2)S_{N-n} - t_1 t_2 S_{N-n+2} \right) & \text{si } n \text{ est pair.} \end{cases} \quad (2.2.15)
\end{aligned}$$

### 2.2.2. Discussion portant sur la forme des fonctions d'onde associées aux énergies $|E| < 2$

Comme le système admet une symétrie associée à la réflexion par rapport au centre de la chaîne de SSH, et donc que l'Hamiltonien associé est persymétrique<sup>3</sup>, on s'attend à ce que la solution reflète cette symétrie. À l'aide de cette observation, nous avons pu obtenir une solution générale au système, sans avoir à faire les calculs qui découlent de l'équation de Schrödinger dans tous leurs détails. L'expression (2.2.15) témoigne de cette symétrie. En effet - on le répète - il y a une correspondance entre les termes de parité opposée de la première et de la deuxième solution: en appliquant les transformations  $q \rightarrow -q$  et  $n \rightarrow N - n + 1$ , la deuxième solution est obtenue à partir de la première.

Ceci dit, malgré le fait qu'une expression élégante pour les fonctions d'onde du système est obtenue, il n'y a aucune restriction sur le spectre d'énergie de ce dernier, et le système dépend d'un deuxième paramètre libre. Comme mentionné plus tôt, ceci résulte du fait que le système est couplé à des leads dont le spectre est continu dans l'intervalle  $[-2,2]$ . Ainsi, pour obtenir un spectre discret pour le système complet, il sera nécessaire de sortir de cet intervalle d'énergie. C'est ce qui est fait dans la prochaine sous-section.

<sup>3</sup> Un Hamiltonien est persymétrique s'il peut être représenté par une matrice qui est symétrique par rapport à la diagonale nord-est/sud-ouest [23].



### 2.2.3. Deuxième cas: $|E| > 2$

Dans ce cas particulier, comme l'énergie à l'étude sort de la bande d'énergie des leads, le spectre d'énergie se discrétise, et il est donc possible d'obtenir une équation transcendante pour  $E$ , qui peut être résolue numériquement. En effet, pour de telles valeurs d'énergie, les composantes de la fonction d'onde qui sont associées aux leads prennent la forme d'exponentielles, tel que mentionné brièvement après l'introduction de la relation de dispersion pour les leads (1.3.6). Comme les leads sont de longueur infinie, ces composantes ne peuvent pas croître en s'éloignant de la chaîne de SSH. Ceci élimine donc la possibilité que celles-ci prennent la forme d'exponentielles croissantes. Cette contrainte, comme on va le voir, diminue de deux le nombre d'inconnus. D'abord, rappelons que

$$\begin{cases} E^2 = t_1^2 + t_2^2 + 2t_1t_2 \cos(2k), \\ E = 2 \cos(2q). \end{cases} \quad (2.2.16)$$

Dans ce cas, comme l'énergie doit respecter  $|E| > 2$ ,  $q$  doit être un nombre complexe. On rappelle au lecteur de  $q \rightarrow q + \pi$  n'a aucun impact sur la solution, et donc qu'on suppose que  $\Re(q) \in (-\pi/2, \pi/2]$ . De la deuxième équation de (2.2.16), on voit rapidement que si  $E > 2$ ,  $q = i\kappa$ , et que si  $E < -2$ ,  $q = \pi/2 + i\kappa$ , où on choisit  $\kappa > 0 \in \mathbb{R}$ . À l'aide de l'équation (2.2.2), qui donne la fonction d'onde de la première lead, et en assumant sans perte de généralité<sup>4</sup> que  $E > 2$ , on obtient que

$$|\psi_{\text{lead}_1}\rangle = \begin{pmatrix} \vdots \\ e^{4iq} \\ e^{2iq} \\ 1 \end{pmatrix} G_+ + \begin{pmatrix} \vdots \\ e^{-4iq} \\ e^{-2iq} \\ 1 \end{pmatrix} G_- = \begin{pmatrix} \vdots \\ e^{-4\kappa} \\ e^{-2\kappa} \\ 1 \end{pmatrix} G_+ + \begin{pmatrix} \vdots \\ e^{4\kappa} \\ e^{2\kappa} \\ 1 \end{pmatrix} G_-. \quad (2.2.17)$$

Il s'avère que le deuxième terme diverge pour des sites qui s'éloignent de la chaîne de SSH. Ceci requiert donc que le coefficient  $G_-$  soit mis à zéro. Le même raisonnement s'applique pour la lead de droite. Par conséquent, les coefficients  $G_-$  et  $D_-$  doivent tous deux être nuls. Les fonctions d'onde des leads prennent ainsi les formes simplifiées

$$|\psi_{\text{lead}_1}\rangle = \begin{pmatrix} \vdots \\ e^{4iq} \\ e^{2iq} \\ 1 \end{pmatrix} G_+ = \begin{pmatrix} \vdots \\ e^{-4\kappa} \\ e^{-2\kappa} \\ 1 \end{pmatrix} G_+, \quad |\psi_{\text{lead}_2}\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ e^{2iq} \\ e^{4iq} \\ \vdots \end{pmatrix} D_+ = \begin{pmatrix} 1 \\ e^{-2\kappa} \\ e^{-4\kappa} \\ \vdots \end{pmatrix} D_+.$$

<sup>4</sup> La même conclusion s'applique pour  $E < -2$ . Les équations (2.2.18) et (2.2.19) ne sont pas affectées par ce choix.

Le fait que  $G_- = D_- = 0$  simplifie les expressions pour  $C_{\pm}$  et  $E$ . En particulier, l'expression (2.2.9) avec  $G_- = 0$  se réduit à

$$\begin{pmatrix} C_+ \\ C_- \end{pmatrix} = \frac{1}{Z} \begin{pmatrix} e^{i\phi} A \\ -e^{-i\phi} X \end{pmatrix}. \quad (2.2.18)$$

Aussi, du fait que  $G_- = D_- = 0$ , l'expression pour  $G_-$  donnée par (2.2.11) doit s'annuler, ce qui donne une relation supplémentaire entre  $E$ ,  $k$  et  $q$ :

$$E = \frac{t_1(t_2^2 e^{-2iq} S_{N+2} + t_L^4 e^{2iq} S_{N-2}) + t_2 S_N (t_2^2 e^{-2iq} + t_L^4 e^{2iq})}{2t_2 t_L^2 S_N}. \quad (2.2.19)$$

On note que dans la limite  $t_L \rightarrow 0$ , cette expression se réduit à l'équation liant  $E$  et  $k$  obtenue pour la chaîne de SSH isolée, qui est donnée par (1.1.13).

En combinant cette expression avec (2.2.16), il y existe un total de trois équations pour trois inconnus,  $E$ ,  $k$  et  $q$ , et ceci permet de déduire une équation transcendante pour l'énergie; on obtient éventuellement

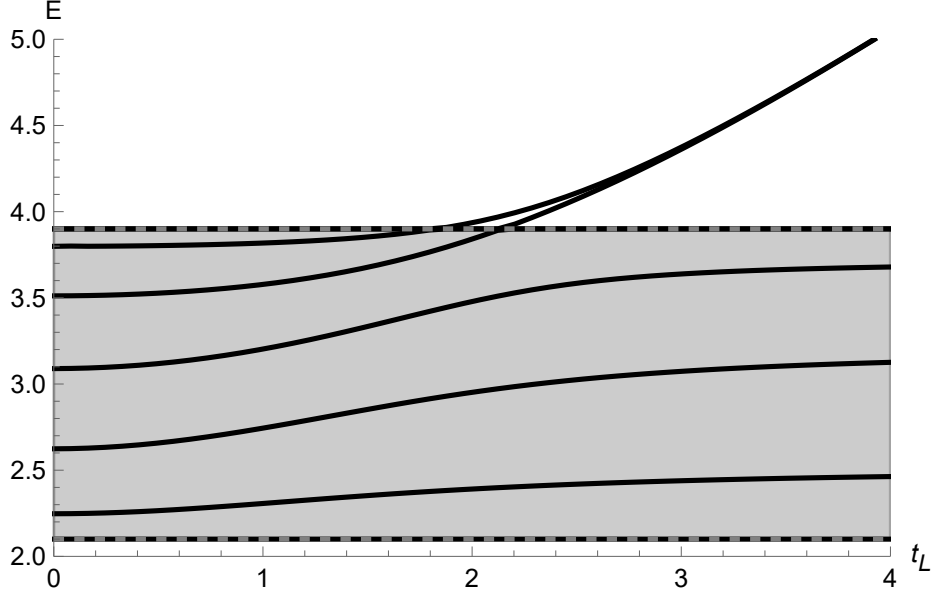
$$\begin{aligned} & t_1 \left( t_2^2 e^{\operatorname{arccosh}(\frac{E}{2})} \sin \left( \frac{N+2}{2} \arccos \left[ \frac{E^2 - t_1^2 - t_2^2}{2t_1 t_2} \right] \right) \right. \\ & \left. + t_L^4 e^{-\operatorname{arccosh}(\frac{E}{2})} \sin \left( \frac{N-2}{2} \arccos \left[ \frac{E^2 - t_1^2 - t_2^2}{2t_1 t_2} \right] \right) \right) \\ & + t_2 \left( t_2^2 e^{\operatorname{arccosh}(\frac{E}{2})} - 2Et_L^2 + t_L^4 e^{-\operatorname{arccosh}(\frac{E}{2})} \right) \sin \left( \frac{N}{2} \arccos \left[ \frac{E^2 - t_1^2 - t_2^2}{2t_1 t_2} \right] \right) = 0, \end{aligned} \quad (2.2.20)$$

où  $k$  et  $q$  ont été remplacés par leur relation correspondante en énergie  $E$ . À la Figure 2.2, nous illustrons le spectre qui en est déduit en fonction de  $t_L$  pour des valeurs représentatives des autres paramètres.

Enfin, en insérant les coefficients  $C_{\pm}$  donnés par (2.2.18) dans l'ansatz de la fonction d'onde (2.2.3), une expression pour les fonctions d'onde de la chaîne de SSH est obtenue,

$$|\psi_{\text{SSH},n}\rangle = \frac{1}{t_1 t_2 t_L S_2 e^{2iq}} \times \begin{cases} t_1 t_2 S_{n+1} + (t_2^2 - Et_L^2 e^{2iq}) S_{n-1} & \text{si } n \text{ est impair,} \\ t_2 (E - t_L^2 e^{2iq}) S_n - t_1 t_L^2 e^{2iq} S_{n-2} & \text{si } n \text{ est pair.} \end{cases} \quad (2.2.21)$$

En résumé, connaissant les paramètres du système  $\{t_1, t_2, t_L, N\}$ , il est possible d'obtenir un spectre discret et fini des solutions pour  $E$  à l'aide de l'équation transcendante (2.2.20), puis d'obtenir les fonctions d'onde correspondantes, en insérant ces solutions dans l'expression



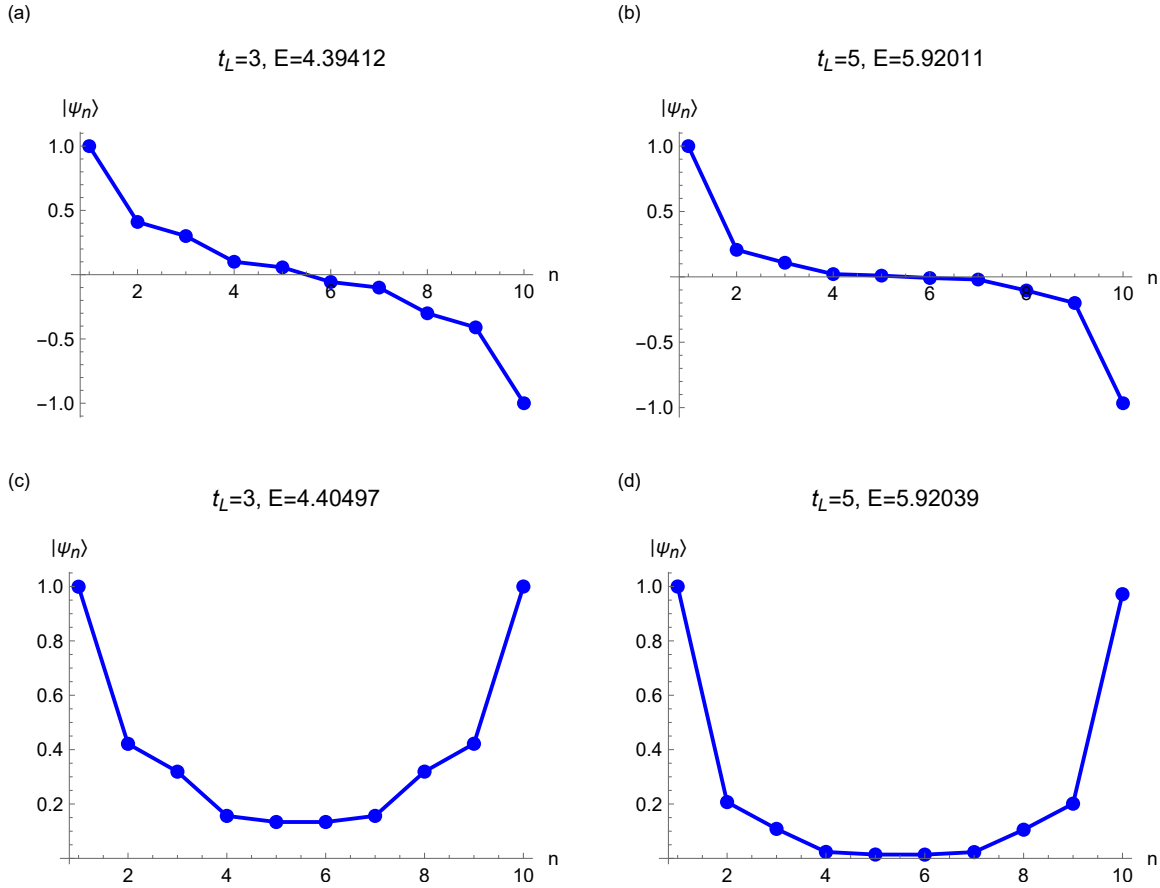
**Fig. 2.2.** Graphe présentant les solutions d'énergie de l'équation (2.2.20) en fonction de  $t_L$  avec  $t_1 = 3$ ,  $t_2 = 0.9$  et  $N = 10$ , pour des valeurs d'énergie positives à l'extérieur de la bande d'énergie des leads. En gris, on illustre la bande d'énergie supérieure de la chaîne de SSH. On observe, en particulier, que deux états quittent cette bande: ce sont des états de haute énergie. Nous avons choisi  $t_1$  et  $t_2$  de sorte que les bandes de la chaîne de SSH ne chevauchent pas celle des leads (le cas  $r < 1$  est qualitativement similaire au cas  $r > 1$  étudié). Ainsi, il y a un maximum d'états avec énergie  $|E| > 2$ . Ce choix ne change pas la physique observée: il ne fait que mettre en lumière les phénomènes importants qui émergent dû au couplage du système de SSH avec les leads.

(2.2.21). Comme mentionné plus tôt, ceci est un résultat exact, applicable pour des énergies  $|E| > 2$ . En particulier, si  $t_1$  et  $t_2$  sont choisis tel que  $|t_1 - t_2| > 2$ , alors tous les états oscillatoires de la chaîne de SSH auront une énergie avec amplitude supérieure à 2, et il sera donc possible de trouver leur forme analytique.

#### 2.2.4. Discussion portant sur le spectre d'énergie pour des énergies $|E| > 2$

Étudions la Figure 2.2. D'abord, comme  $t_1 = 3$  et  $t_2 = 0.9$ , les bornes de la bande d'énergie supérieure de la chaîne de SSH sont localisées à  $E = 2.1$  et  $E = 3.9$ . Ces dernières se retrouvent sur le graphique: elles délimitent le domaine dans lequel se situent les états oscillatoires. Il est à noter que, par contraste au cas  $t_L = 0$ , certains états peuvent sortir de cet intervalle d'énergie, et ce, par la frontière du haut. En effet, pour  $t_L$  suffisamment grand, deux états sortent de la bande d'énergie, et convergent pour  $t_L \rightarrow \infty$ . Leur énergie étant supérieure à  $t_1 + t_2$ , le nombre d'onde associé à ces derniers doit être complexe. Ces états acquièrent donc un comportement exponentiel, qui s'accroît quand  $t_L$  augmente. La

Figure 2.3 illustre ces états. Dû à leur énergie qui sort des bandes d'énergie de la chaîne de SSH, nous allons appeler ceux-ci «états de haute énergie» (en contraste avec les états de basse énergie, qui sortent des bandes d'énergie de la chaîne de SSH par le bas, c'est-à-dire qui ont une énergie  $|E| < |t_1 - t_2|$ ). Les outils développés dans le prochain chapitre permettront d'expliquer leur existence.



**Fig. 2.3.** États de haute énergie qui sortent de la bande d'énergie supérieure de la chaîne de SSH pour  $t_1 = 3$ ,  $t_2 = 0.9$  et  $N = 10$ . Ce sont des états fortement localisés sur les frontières de la chaîne de SSH, avec un comportement exponentiellement décroissant à l'intérieur de celle-ci. On note que, comparativement aux états de surface de basse énergie, ces états ont des amplitudes qui sont strictement décroissantes, en contraste avec ces derniers, qui ont une enveloppe strictement décroissante, mais pour lesquels les amplitudes d'un site à l'autre oscillent entre des grandes et des petites valeurs (voir Figure 1.2). Comme mentionné plus tôt, le comportement exponentiellement décroissant est accentué pour  $t_L$  qui augmente. (a) et (c): états de haute énergie antisymétrique et symétrique, respectivement, pour  $t_L = 3$ . (b) et (d): états de haute énergie antisymétrique et symétrique, respectivement, pour  $t_L = 5$ . On voit que ces derniers sont plus fortement localisés sur les frontières.

En parallèle, on observe que les états qui se trouvent dans la bande d'énergie de la chaîne de SSH ont une énergie qui croît avec  $t_L$ , jusqu'à tendre vers une certaine valeur dans la limite  $t_L \rightarrow \infty$ .

### 2.2.5. Troisième cas: $E = 0$

On s'intéresse maintenant aux fonctions d'onde associées à la solution d'énergie nulle. Rappelons que la méthode utilisée à la Sous-section 2.2.1 ne solutionne pas le cas  $E = 0$ , dû au fait que pour une telle énergie,  $\phi$  n'est pas bien défini (voir l'équation (1.1.7)). Pour obtenir les fonctions d'onde de la composante du modèle tripartite associée à la chaîne de SSH pour cette énergie, il est utile de partir de l'équation de Schrödinger obtenue pour la chaîne de SSH isolée, c'est-à-dire l'équation (1.1.2). Comme les équations aux frontières du nouveau système sont différentes de celles de la chaîne de SSH isolée, seules les lignes 2 à  $N-1$  de (1.1.2) restent valides. Ceci dit, comme nous allons le voir, ces lignes sont suffisantes pour obtenir l'expression désirée. D'ailleurs, comme  $E = 0$ , on observe que la résolution de celles-ci est grandement simplifiée. D'un côté, les équations associées aux lignes paires de (1.1.2) ont toutes la forme

$$t_1\psi_i + t_2\psi_{i+2} = 0, \quad (2.2.22)$$

pour tout  $i$  impair entre 1 et  $N-3$ . D'un autre côté, les équations associées aux lignes impaires de (1.1.2) ont toutes la forme

$$t_2\psi_i + t_1\psi_{i+2} = 0, \quad (2.2.23)$$

pour tout  $i$  pair entre 2 et  $N-2$ . Ainsi, il y a découplage complet entre les termes pairs et les termes impairs de la fonction d'onde. La solution générale du problème est donc une combinaison linéaire de la solution de (2.2.22) et de la solution de (2.2.23). Le tout s'écrit ainsi:

$$|\psi_{\text{SSH}}\rangle = \begin{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -t_1 \\ t_2 \end{pmatrix} \\ \vdots \\ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -t_1 \\ t_2 \end{pmatrix}^{\frac{N-4}{2}} \\ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -t_1 \\ t_2 \end{pmatrix}^{\frac{N-2}{2}} \end{pmatrix} a + \begin{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -t_2 \\ t_1 \end{pmatrix} \\ \vdots \\ \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -t_2 \\ t_1 \end{pmatrix}^{\frac{N-4}{2}} \\ \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -t_2 \\ t_1 \end{pmatrix}^{\frac{N-2}{2}} \end{pmatrix} b. \quad (2.2.24)$$

Ici,  $a$  et  $b$  sont des coefficients déterminés par les conditions frontières du système, qui sont les suivantes:

$$t_L |\psi_{\text{lead}_{1,1}}\rangle + t_1 |\psi_{\text{SSH}_2}\rangle = 0, \quad (2.2.25)$$

$$|\psi_{\text{lead}_{1,2}}\rangle + t_L |\psi_{\text{SSH}_1}\rangle = 0, \quad (2.2.26)$$

$$t_1 |\psi_{\text{SSH}_{N-1}}\rangle + t_L |\psi_{\text{lead}_{2,1}}\rangle = 0, \quad (2.2.27)$$

$$t_L |\psi_{\text{SSH}_N}\rangle + |\psi_{\text{lead}_{2,2}}\rangle = 0, \quad (2.2.28)$$

c'est-à-dire les équations (2.2.5) à (2.2.8) présentées plus tôt dans le chapitre, dans la limite où  $E = 0$ . Or, on note qu'il y a 4 équations et une condition de normalisation pour 6 inconnus ( $G_{\pm}$ ,  $D_{\pm}$ ,  $a$  et  $b$ ). Ceci implique qu'un paramètre du système restera indéterminé. Sans perte de généralité, on choisit que ce paramètre soit  $b$ , que l'on renomme  $b \equiv \alpha$ , et on établit que  $a = 1$  (c'est notre choix de normalisation). Ainsi, la solution générale pour la partie centrale du système tripartite (c'est-à-dire la chaîne de SSH) est donnée par

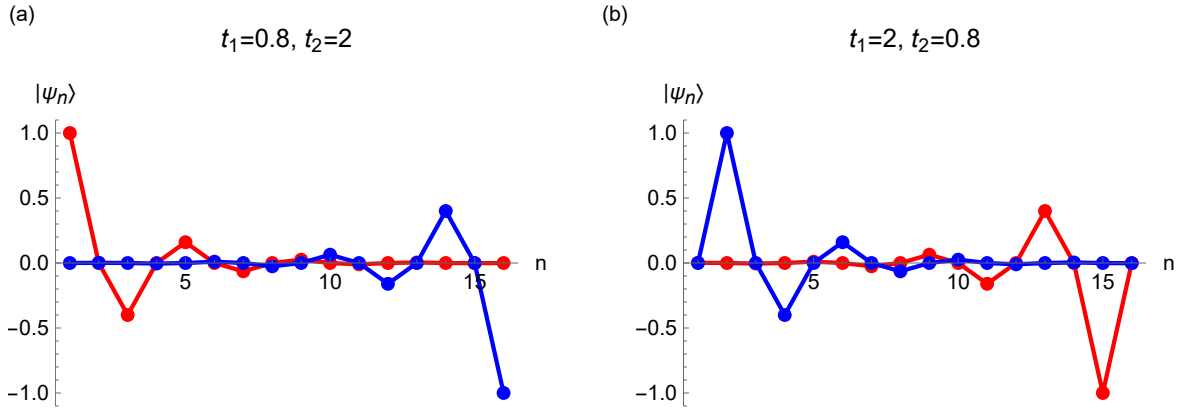
$$|\psi_{\text{SSH}}\rangle = \begin{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -t_1 \\ t_2 \end{pmatrix} \\ \vdots \\ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -t_1 \\ t_2 \end{pmatrix}^{\frac{N-4}{2}} \\ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -t_1 \\ t_2 \end{pmatrix}^{\frac{N-2}{2}} \end{pmatrix} + \alpha \begin{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -t_2 \\ t_1 \end{pmatrix} \\ \vdots \\ \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -t_2 \\ t_1 \end{pmatrix}^{\frac{N-4}{2}} \\ \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -t_2 \\ t_1 \end{pmatrix}^{\frac{N-2}{2}} \end{pmatrix}. \quad (2.2.29)$$

## 2.2.6. Discussion portant sur la solution générale pour $E = 0$

Étudions maintenant la forme de (2.2.29). On remarque ici quelque chose de très intéressant. Si  $t_1 < t_2$ , on observe des états de surface «normaux», c'est-à-dire ceux vus dans le cas de la chaîne de SSH fermée. En effet, pour un tel choix de paramètres, on observe que le premier terme (de 2.2.29) est un état de surface localisé à gauche (car  $1 > t_1/t_2 > \dots > (t_1/t_2)^{(N-2)/2}$ ), et que le deuxième terme est un état de surface localisé à droite (car  $1 < t_2/t_1 < \dots < (t_2/t_1)^{(N-2)/2}$ ). Ceci dit, si  $t_1 > t_2$ , on observe un phénomène très différent. En effet, pour ce choix de paramètres,  $1 < t_1/t_2 < \dots < (t_1/t_2)^{(N-2)/2}$ , et donc l'avant-dernier élément du premier terme est supérieur en amplitude à tous les autres éléments de ce terme; aussi  $1 > t_2/t_1 > \dots > (t_2/t_1)^{(N-2)/2}$ , et donc le deuxième élément du deuxième terme est supérieur à tous les autres éléments de ce terme. On remarque donc que ces deux états (le premier et deuxième terme) ont la même forme que celle des états

de surface «normaux», à l'exception qu'ils sont fortement localisés sur le 2<sup>ème</sup> et  $(N - 1)$ <sup>ème</sup> site, au lieu du premier et dernier site. Le couplage de la chaîne de SSH à un environnement crée donc de nouveaux états de basse énergie (car ceux-ci sont localisés sur de nouvelles interfaces), que l'on appelle états fantômes. On présente les deux scénarios mentionnés plus tôt ( $t_1 < t_2$  vs  $t_1 > t_2$ ) à la Figure 2.4. Il s'avère que pour les discussions portant sur la topologie du système qui vont suivre, l'existence de ces nouveaux états jouera un rôle crucial: elle est la signature d'un changement de phase topologique. Nous discuterons de cet aspect plus en détail dans le prochain chapitre, principalement à la Section 3.2.

Sur un autre ordre d'idée, on peut établir un lien entre les solutions à énergie nulle étudiées dans cette sous-section et les solutions à énergie près de zéro qui découlent de l'expression (2.2.15) obtenue à la Sous-section 2.2.1. Il est possible de vérifier numériquement que ces dernières ont un comportement similaire aux solutions illustrées à la Figure 2.4, à l'exception que pour les solutions à  $E \neq 0$ , il n'y existe pas un moyen aussi direct de séparer les solutions en deux (d'un côté, en états de surface, et de l'autre, en états fantômes) comme fait dans cette sous-section: de là vient l'intérêt de la présente analyse. On remarque aussi que pour l'expression démontrée dans ce chapitre, nous avons pu exclure toute dépendance explicite sur  $t_L$ ; en contraste, pour des énergies  $E \neq 0$  dans la bande d'énergie des leads, les fonctions d'onde dépendent explicitement de  $t_L$ .



**Fig. 2.4.** Fonctions d'onde associées à l'état d'énergie nulle pour la chaîne de SSH de longueur  $N = 16$ . Ces états sont fortement localisés sur les frontières de la chaîne de SSH, et l'amplitude des fonctions d'onde décroît exponentiellement à l'intérieur de celle-ci. Les amplitudes en rouge représentent le premier terme de (2.2.29), alors que celles en bleu, le deuxième. De (a), on observe que, comme  $t_1 < t_2$ , on obtient des états de surface «normaux». De (b), comme  $t_1 > t_2$ , on obtient des états fantômes. Ceux-ci ont la même forme que les états de surface normaux, mais sont décalés d'un site vers l'intérieur par rapport à ces derniers: la ligne bleue de la sous-figure (b) est identique à la ligne rouge de la sous-figure (a), à l'exception qu'elle est translatée d'un site vers la droite.

## 2.3. Chaîne de SSH à $N$ (impair) sites

Nous allons maintenant brièvement nous attaquer au cas pour lequel la chaîne de SSH possède un nombre impair de sites. Comme les calculs ressemblent fortement à ceux de la section précédente, nous allons seulement montrer les grandes lignes du raisonnement. Sous forme matricielle, l'Hamiltonien du système est donné par l'expression (2.2.1), où  $H_{\text{lead}}$ ,  $W$  et  $V$  sont donnés à la Section 2.2, alors que  $H_{\text{SSH}}$  est donné par l'expression (1.1.1) avec  $t = t_2$ .

### 2.3.1. Premier cas: $|E| < 2$ non nulle

Nous pouvons encore une fois utiliser les ansatz obtenus au Chapitre 1 pour les fonctions d'onde de chaque composante du système. L'ansatz pour la chaîne de SSH est donné par

$$|\psi_{\text{SSH}}\rangle = \begin{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{-i\phi} \\ \pm e^{i\phi} \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} e^{-i\phi} \\ \pm e^{i\phi} \end{pmatrix} e^{2ik} \\ \vdots \\ \begin{pmatrix} e^{-i\phi} \\ \pm e^{i\phi} \end{pmatrix} e^{i(N-3)k} \\ e^{-i\phi} e^{i(N-1)k} \end{pmatrix} C_+ + \begin{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{i\phi} \\ \pm e^{-i\phi} \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} e^{i\phi} \\ \pm e^{-i\phi} \end{pmatrix} e^{-2ik} \\ \vdots \\ \begin{pmatrix} e^{i\phi} \\ \pm e^{-i\phi} \end{pmatrix} e^{-i(N-3)k} \\ e^{i\phi} e^{-i(N-1)k} \end{pmatrix} C_-, \quad (2.3.1)$$

alors que ceux pour les leads sont donnés par (2.2.2) et (2.2.4). Encore une fois, les inconnus à déterminer sont les coefficients  $C_{\pm}$ ,  $D_{\pm}$  et  $G_{\pm}$ , ainsi que l'énergie  $E$ . Dans le cas présent, les conditions frontières sont données par

$$t_L |\psi_{\text{lead}_{1,1}}\rangle - E |\psi_{\text{SSH}_1}\rangle + t_1 |\psi_{\text{SSH}_2}\rangle = 0, \quad (2.3.2)$$

$$|\psi_{\text{lead}_{1,2}}\rangle - E |\psi_{\text{lead}_{1,1}}\rangle + t_L |\psi_{\text{SSH}_1}\rangle = 0, \quad (2.3.3)$$

$$t_2 |\psi_{\text{SSH}_{N-1}}\rangle - E |\psi_{\text{SSH}_N}\rangle + t_L |\psi_{\text{lead}_{2,1}}\rangle = 0, \quad (2.3.4)$$

$$t_L |\psi_{\text{SSH}_N}\rangle - E |\psi_{\text{lead}_{2,1}}\rangle + |\psi_{\text{lead}_{2,2}}\rangle = 0. \quad (2.3.5)$$

En suivant le même raisonnement que celui utilisé pour une chaîne de longueur  $N$  paire, il est possible de montrer que la solution pour une chaîne de longueur  $N$  impaire, dans le cas particulier où  $|E| < 2$ , est donnée par



$$\begin{aligned}
|\Psi_{\text{SSH},n}\rangle = & \frac{2i \sin(2q)t_L}{t_1 t_2 E(1 - t_L^2)S_{N+1} + t_L^2 (Et_L^2 - t_1^2 e^{-2iq} - t_2^2 e^{2iq})S_{N-1}} \\
& \times \begin{cases} e^{2iq} \left( (Et_L^2 e^{-2iq} - t_2^2)S_{n-1} - t_1 t_2 S_{n+1} \right) \\ \quad + \alpha e^{-2iq} \left( (Et_L^2 e^{2iq} - t_1^2)S_{N-n} - t_1 t_2 S_{N-n+2} \right) & \text{si } n \text{ est impair,} \\ e^{2iq} \left( t_1 t_L^2 e^{-2iq} S_{n-2} - t_2 (E - t_L^2 e^{-2iq}) S_n \right) \\ \quad + \alpha e^{-2iq} \left( t_2 t_L^2 e^{2iq} S_{N-n-1} - t_1 (E - t_L^2 e^{2iq}) S_{N-n+1} \right) & \text{si } n \text{ est pair.} \end{cases} \quad (2.3.6)
\end{aligned}$$

### 2.3.2. Discussion portant sur la forme des fonctions d'onde associées aux énergies $|E| < 2$

La symétrie du système y est clairement apparente: on voit que l'on obtient la deuxième solution à partir de la première si on applique les transformations suivantes:  $q \rightarrow -q$  (inversement de la direction de propagation),  $t_1 \leftrightarrow t_2$  (le premier et dernier paramètre de saut sont interchangés) et  $n \rightarrow N + 1 - n$ . Comme il n'y a pas de restriction sur l'énergie du système, il y existe une famille infinie de solutions pour celui-ci. Cette section permet donc d'obtenir une forme élégante pour les fonctions d'onde, mais elle est encore trop générale pour nous donner d'autres renseignements sur la physique du système.

### 2.3.3. Deuxième cas: $|E| > 2$

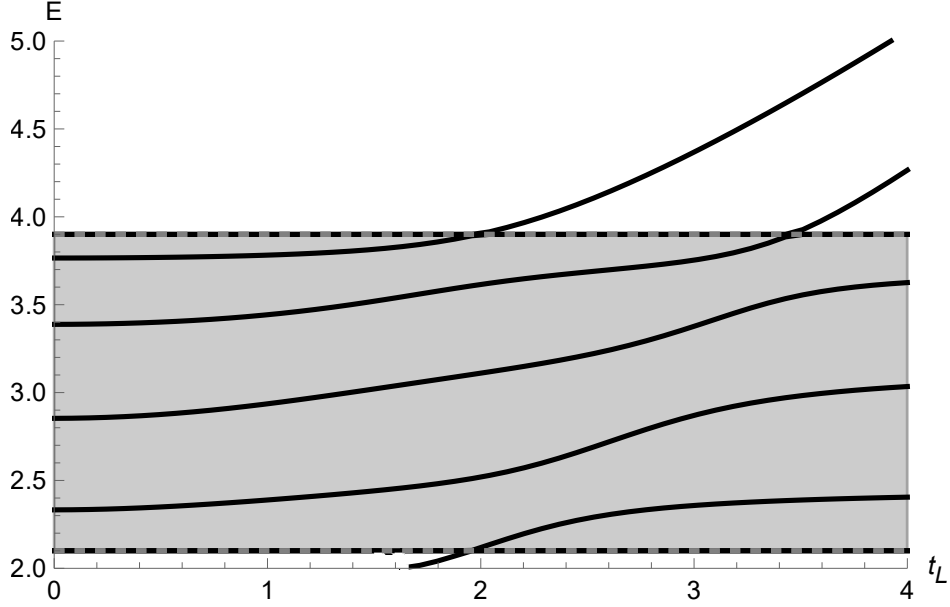
Tel que fait pour le cas  $N$  pair, il est fort utile d'étudier le cas particulier pour lequel les énergies considérées sortent de la bande d'énergie de l'environnement, c'est-à-dire le cas pour lequel la valeur absolue des énergies est supérieure à 2. Il s'avère que de ce cas peut être déduite une équation transcendante pour les énergies. En parallèle, ce cas donne une expression explicite pour les vecteurs propres associés à de telles énergies. En suivant la même méthode que dans la section précédente, il est possible de montrer qu'une troisième équation relie  $E$ ,  $q$  et  $k$ :

$$E = t_L^2 \left( \frac{(t_1^2 + t_2^2)S_{N-1} + 2t_1 t_2 S_{N+1}}{t_1 t_2 e^{-2iq} S_{N+1} + t_L^4 e^{2iq} S_{N-1}} \right). \quad (2.3.7)$$

En jumelant cette expression à l'expression (2.2.16), une équation transcendante pour l'énergie en découle,

$$\begin{aligned}
& t_1 t_2 \sin\left(\frac{N+1}{2} \arccos\left[\frac{E^2 - t_1^2 - t_2^2}{2t_1 t_2}\right]\right) \left(E e^{\operatorname{arccosh}(E/2)} - 2t_L^2\right) \\
& + t_L^2 \sin\left(\frac{N-1}{2} \arccos\left[\frac{E^2 - t_1^2 - t_2^2}{2t_1 t_2}\right]\right) \left(E t_L^2 e^{-\operatorname{arccosh}(E/2)} - t_1^2 - t_2^2\right) = 0.
\end{aligned} \tag{2.3.8}$$

À la Figure 2.5, nous présentons le spectre d'énergie qui découle de cette expression. Les



**Fig. 2.5.** Graphe présentant les solutions d'énergie de l'équation (2.3.8) en fonction de  $t_L$  avec  $t_1 = 3$ ,  $t_2 = 0.9$  et  $N = 9$ , pour des valeurs d'énergie positives à l'extérieur de la bande d'énergie des leads. En gris, on illustre la bande d'énergie supérieure de la chaîne de SSH.

fonctions d'onde associées à ces énergies sont données par la forme analytique

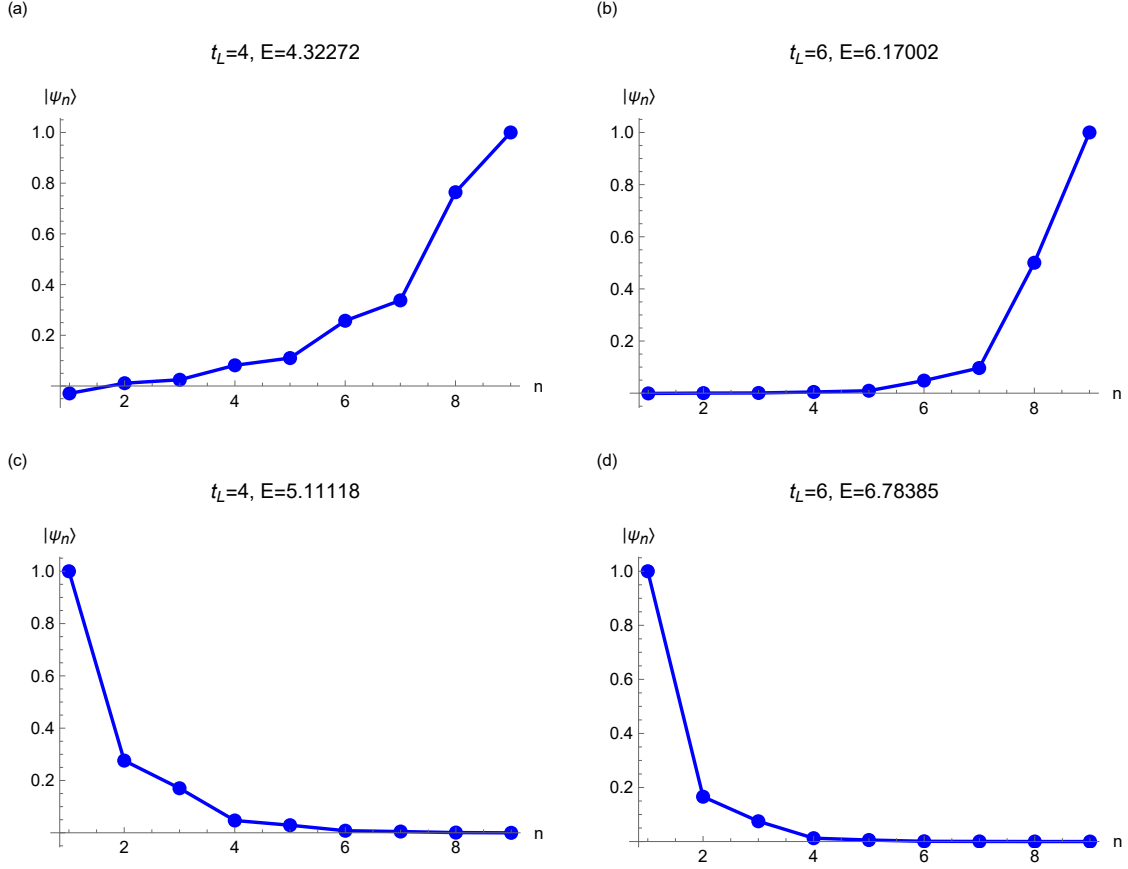
$$|\psi_{\text{SSH},n}\rangle = \frac{1}{t_1 t_2 t_L S_2 e^{2iq}} \times \begin{cases} t_1 t_2 S_{n+1} + (t_2^2 - E t_L^2 e^{2iq}) S_{n-1} & \text{si } n \text{ est impair,} \\ t_2 (E - t_L^2 e^{2iq}) S_n - t_1 t_L^2 e^{2iq} S_{n-2} & \text{si } n \text{ est pair.} \end{cases} \tag{2.3.9}$$

### 2.3.4. Discussion portant sur le spectre d'énergie pour des énergies

$$|E| > 2$$

Étudions la Figure 2.5. Comme dans le cas  $N$  pair, les bornes de la bande d'énergie sont localisées à  $E = 2.1$  et  $E = 3.9$ : elles délimitent le domaine d'énergie dans lequel on retrouve les états oscillatoires. Encore une fois, on observe que certains états sortent de cet

intervalle quand  $t_L$  est suffisamment grand. Ces états ont un comportement exponentiel, dont la localisation sur les frontières s'intensifie avec  $t_L$ . La Figure 2.6 présente ces états.



**Fig. 2.6.** États de haute énergie qui sortent de la bande d'énergie supérieure de la chaîne de SSH pour  $t_1 = 3$ ,  $t_2 = 0.9$  et  $N = 9$ . Ce sont, comme dans le cas  $N$  pair, des états localisés sur les frontières de la chaîne de SSH, qui ont un comportement exponentiellement décroissant à l'intérieur de celle-ci. On observe que plus  $t_L$  est grand, plus ces états sont localisés sur la frontière. En contraste avec le cas  $N$  pair, ces états sont localisés sur une seule surface, dû au fait que  $t_i \neq t_f$ , où  $t_i$  et  $t_f$  sont les premiers et derniers paramètres de saut, respectivement. (a) et (c): états de haute énergie localisés à droite et à gauche, respectivement, pour  $t_L = 4$ . (b) et (d): états de haute énergie localisés à droite et à gauche, respectivement, pour  $t_L = 6$ . On voit que ces derniers sont plus fortement localisés sur les frontières.

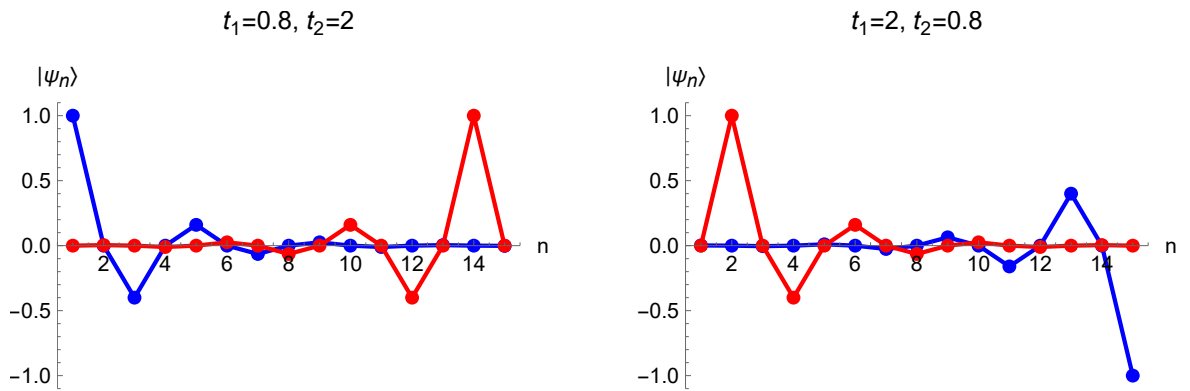
### 2.3.5. Troisième cas: $E = 0$

On veut maintenant étudier le cas pour lequel on exige que l'énergie du système soit nulle. Il suffit de suivre la méthode employée dans la section précédente pour obtenir les fonctions d'onde associées aux états à énergie nulle. La solution générale dans ce cas est encore une fois donnée par la combinaison linéaire de deux vecteurs orthogonaux,

$$|\psi_{\text{SSH}}\rangle = \begin{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -\frac{t_1}{t_2} \end{pmatrix} \\ \vdots \\ \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -\frac{t_1}{t_2} \end{pmatrix}^{\frac{N-3}{2}} \\ \begin{pmatrix} -\frac{t_1}{t_2} \end{pmatrix}^{\frac{N-1}{2}} \end{pmatrix} + \alpha \begin{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -\frac{t_2}{t_1} \end{pmatrix} \\ \vdots \\ \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -\frac{t_2}{t_1} \end{pmatrix}^{\frac{N-3}{2}} \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (2.3.10)$$

### 2.3.6. Discussion portant sur la solution générale pour $E = 0$

Utilisant le vocabulaire introduit dans la section précédente, nous voyons que cette solution est simplement la combinaison linéaire d'un état de surface et d'un état fantôme. En particulier, on voit que si  $t_1 < t_2$ , la solution est la combinaison linéaire d'un état de surface localisé à gauche et d'un état fantôme localisé à droite, et que si  $t_1 > t_2$ , la solution est une combinaison d'un état de surface localisé à droite et d'un état fantôme localisé à gauche. Ainsi, dans tous les cas, on a toujours comme solution la combinaison d'un état de surface et d'un état fantôme, qui sont localisés aux côtés opposés. Ces solutions sont illustrées à la Figure 2.7.



**Fig. 2.7.** Fonctions d'onde associées à l'état d'énergie nulle pour la chaîne de SSH de longueur  $N = 15$ . Ces états sont fortement localisés sur la frontière, et l'amplitude des fonctions d'onde décroît exponentiellement à l'intérieur de la chaîne. Les amplitudes en bleu représentent le premier terme de (2.3.10), alors que celles en rouge, le deuxième. (a) On observe qu'il y a un état de surface à gauche et un état fantôme à droite, comme  $t_1 < t_2$ . (b) On observe qu'il y a un état de surface à droite et un état fantôme à gauche, comme  $t_1 > t_2$ .

## 2.4. Discussion portant sur la méthode à l'étude

Dans le présent chapitre, le système tripartite a été étudié sous le point de vue de ses valeurs propres et de ses fonctions propres. En mécanique quantique, cette approche est très pratique puisqu'elle permet, en général, de trouver le spectre d'énergie d'un système et la forme que peuvent prendre les états associés aux énergies de celui-ci. Ceci dit, comme nous avons pu l'observer, les choses se compliquent lorsque le système à l'étude est de dimension infinie. Non seulement ceci peut rendre le spectre d'énergie continu, mais ceci peut aussi faire en sorte que les solutions générales sont des combinaisons linéaires de plus d'une fonction d'onde. La raison derrière un tel comportement est simple: dû au fait que le système est ouvert, deux conditions frontières peuvent être perdues (dépendamment du domaine d'énergie à l'étude), et donc deux paramètres du système peuvent rester inconnus.

En premier lieu, nous avons étudié le système dans le cas où son énergie se situe dans la bande d'énergie des leads. Le système, ayant sept paramètres inconnus ( $C_{\pm}$ ,  $D_{\pm}$ ,  $G_{\pm}$  et l'énergie) et seulement quatre équations frontières (en plus d'une condition de normalisation), dépend de deux paramètres libres, dont un est l'énergie des états. Ceci implique premièrement que le spectre d'énergie du système est continu, et deuxièmement que la forme obtenue pour les fonctions d'onde dépend de deux paramètres libres ( $E$  et  $\alpha$ ).

En deuxième lieu, pour obtenir de l'information supplémentaire sur le système, nous avons dû restreindre les énergies étudiées à celles étant à l'extérieur de la bande d'énergie des leads. En conséquence, nous avons obtenu un spectre discret et fini de valeurs propres réelles pour le cas  $N$  pair et le cas  $N$  impair. Nous avons aussi obtenu des expressions analytiques pour les fonctions d'onde, qui ne dépendent que des paramètres et de l'énergie du système. En insérant les valeurs propres déduites numériquement dans ces dernières, nous avons pu obtenir une forme explicite pour les états dont l'énergie est dans ce domaine. En particulier, nous avons constaté que pour un couplage suffisamment fort entre la chaîne de SSH et les leads, un nouveau type d'état émerge: l'état de haute énergie. Ce type d'état, dont l'énergie est à l'extérieur des bandes de la chaîne de SSH, est un état de surface qui se distingue de ceux de basse énergie par la forme qu'il prend. Dans le cas  $N$  pair et  $N$  impair, nous avons pu constater que l'amplitude associée à celui-ci est strictement décroissante dans la chaîne de SSH. Nous discuterons de son existence plus en détail dans le prochain chapitre.

En dernier lieu, nous avons étudié le cas pour lequel l'énergie du système est nulle. Ce cas est de grand intérêt, car il nous renseigne sur le comportement des états qui sont fortement localisés sur les frontières, et donc sur la topologie du système (dans le cas  $N$  pair). Le résultat le plus intéressant de cette étude est l'émergence des états fantômes. Ces états, qui sont fortement localisés sur le 2<sup>ème</sup> et le  $(N - 1)$ <sup>ème</sup> site, se distinguent des états de surface normaux par le fait qu'ils ne sont pas localisés sur l'interface qui sépare les différentes composantes du système. Il s'avère que l'existence de tels états va nous permettre de parler

d'un phénomène de transition de phase topologique pour ce système ouvert. Encore une fois, le prochain chapitre nous donnera de meilleurs outils pour discuter en profondeur de ces états.

## Chapitre 3

---

# Même système, nouvelle approche: Hamiltonien effectif

Comme nous l'avons vu dans le chapitre précédent, l'approche hamiltonienne appliquée à un système infini a ses bienfaits, mais restreint la quantité d'information que nous pouvons déduire de ce dernier. L'essentiel de ce problème vient du fait que les leads ont un spectre continu dans l'intervalle d'énergie  $[-2,2]$ . En physique de la matière condensée, il y a un moyen de contourner ce problème. En effet, il est possible de représenter la perturbation qu'effectue un système infini sur un système fini sous la forme d'un terme effectif [24], rendant ainsi le spectre d'énergie du système complet fini et discret. Ce terme effectif est simplement une matrice d'énergie propre dont la dimension dépend du type d'interaction qui relie les deux systèmes. Les matrices d'énergie propre sont reliées aux fonctions de Green de manière inhérente. Un tel système effectif est présenté à la Figure 3.1.

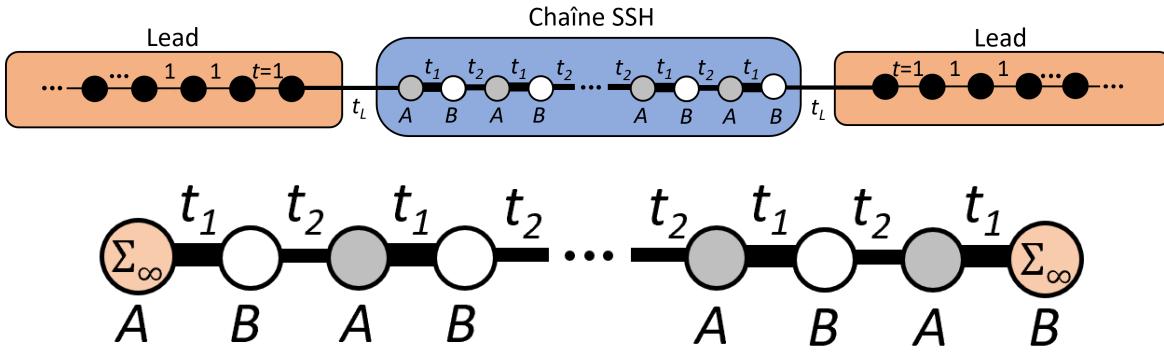
Nous allons utiliser cette nouvelle approche dans ce chapitre. D'abord, nous allons montrer comment dériver la forme générale d'un Hamiltonien effectif pour un système à deux composantes. La généralisation pour un système à trois composantes sera directe. De cette forme générale, nous déduirons l'Hamiltonien effectif de notre système tripartite. Pour ce faire, nous allons devoir calculer le potentiel effectif qui est associé aux deux systèmes infinis (les leads). Le résultat final sera écrit sous la forme d'une matrice de dimension  $N \times N$ , où  $N$  est la longueur de la chaîne de SSH.

À l'aide de cet Hamiltonien effectif, nous dériverons un deuxième Hamiltonien effectif, cette fois-ci de dimension  $(N - 2) \times (N - 2)$ . Pour ce faire, nous réutiliserons la méthode employée pour obtenir l'Hamiltonien effectif initial. Ce nouvel Hamiltonien nous permettra d'expliquer l'émergence des états fantômes ainsi que le phénomène de transition de phase qui se produit lorsque l'on fait varier  $t_L$  de 0 jusqu'à  $t_L \rightarrow \infty$ .

Puis, nous retournerons à l'Hamiltonien effectif  $N \times N$ . À l'aide de l'équation de Schrödinger, nous déterminerons une expression analytique pour ses vecteurs propres, et nous

trouverons une équation transcendante pour ses valeurs propres. Nous comparerons ces expressions à celles obtenues au chapitre précédent. Nous pourrions établir les similitudes ainsi que les différences entre les solutions obtenues par les deux différentes approches. En particulier, nous verrons que pour des énergies  $|E| > 2$ , les deux systèmes donnent exactement les mêmes valeurs propres et vecteurs propres, alors que pour  $|E| < 2$ , ce ne sera pas le cas. Nous utiliserons aussi cette approche pour discuter de l'émergence des états de haute énergie.

Enfin, nous concluons le chapitre en étudiant le cas particulier pour lequel la chaîne de SSH comporte seulement trois sites. Dû à la simplicité<sup>1</sup> d'un tel système, nous pourrions obtenir une forme analytique pour les valeurs propres. Cette sous-section nous permettra d'évaluer comment le nombre de solutions du système effectif est affecté par le paramètre  $t_L$ , de trouver les points critiques<sup>2</sup>  $t_{L_c}$  à partir desquels émergent les états de haute énergie, et d'évaluer le taux de fuite des états de la chaîne de SSH vers les leads (simplement «taux de fuite» dans ce qui suit). En particulier, nous pourrions vérifier que les états de surface ont un taux de fuite qui diverge près de  $t_L = 1$ .



**Fig. 3.1.** Représentation graphique du système tripartite versus celle du système effectif. Dans cette dernière, on place un potentiel effectif  $\Sigma_\infty$  sur le premier et le dernier site: ceux-ci englobent l'effet des perturbations qu'engendrent les leads sur la chaîne de SSH.

### 3.1. Hamiltonien effectif du système ouvert

Introduisons d'abord un résultat qui va nous permettre d'établir un pont entre l'Hamiltonien du système complet et celui du système effectif.

**Théorème 3.1.1.** Soit un système de dimension finie donné par l'Hamiltonien  $A$ , lié à un système de dimension finie ou infinie donné par l'Hamiltonien  $C$ , tel que les deux systèmes

<sup>1</sup> Il s'avère que toute généralisation à de plus grandes dimensions devient rapidement hautement non triviale.

<sup>2</sup> Le choix de ce symbole sera plus clair à la Sous-section 3.5: le symbole  $t_{L_c}$  est déjà utilisé pour représenter un autre point critique.



sont connectés par la matrice  $B$  ainsi que son conjugué hermitien  $B^\dagger$ . L'Hamiltonien d'un tel système bipartite  $H$  s'écrit

$$H = \begin{pmatrix} A & B \\ B^\dagger & C \end{pmatrix}. \quad (3.1.1)$$

Nous pouvons écrire un Hamiltonien effectif pour  $A$  qui inclut l'effet du système  $C$ ,

$$A^{\text{eff}} = A + BG_C B^\dagger, \quad (3.1.2)$$

où  $G_C$  est la fonction de Green de ce dernier [24].

DÉMONSTRATION. La fonction de Green de  $H$  est définie comme

$$G = (E - H)^{-1}. \quad (3.1.3)$$

Elle peut facilement être évaluée,

$$\begin{aligned} G &= \begin{pmatrix} G'_A & G'_B \\ G'_{B^\dagger} & G'_C \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E - A & B \\ B^\dagger & E - C \end{pmatrix}^{-1} \\ &\iff \begin{pmatrix} G'_A & G'_B \\ G'_{B^\dagger} & G'_C \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E - A & B \\ B^\dagger & E - C \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (3.1.4)$$

où nous avons écrit  $G'_i$  au lieu de  $G_i$  car ce terme est déjà utilisé (par définition,  $G_i = 1/(E - i)$ ). Ici,  $i = \{A, B, B^\dagger, C\}$ . En particulier, une expression pour  $G'_A$  peut être déduite,

$$G'_A \equiv (E - A^{\text{eff}})^{-1} = \left( E - A - B \frac{1}{E - C} B^\dagger \right)^{-1}. \quad (3.1.5)$$

L'Hamiltonien effectif de  $A$ , qui englobe l'effet de l'environnement sur l'Hamiltonien  $A$ , est donc défini comme

$$A^{\text{eff}} = A + B \frac{1}{E - C} B^\dagger = A + BG_C B^\dagger, \quad (3.1.6)$$

où la fonction de Green de  $C$  est définie comme  $G_C \equiv 1/(E - C)$ .  $\square$

Appliquons maintenant ce résultat au système tripartite à l'étude: le système fini  $A$  est, dans ce cas, une chaîne de SSH, et le système infini  $C$  est une lead:  $A = H_{\text{SSH}}$  et  $C = H_{\text{lead}}$ . Ils sont tous deux reliés par une constante de saut  $t_L$ , tel que la matrice couplant les deux systèmes est donnée par

$$B = \begin{pmatrix} \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \\ 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots \\ t_L & 0 & 0 & \dots \end{pmatrix}. \quad (3.1.7)$$

Dans ce cas,  $A$  est de dimension  $N \times N$ ,  $B$  est de dimension  $N \times \infty$ ,  $B^\dagger$  est de dimension  $\infty \times N$  et  $C$  est de dimension  $\infty \times \infty$ . Un calcul rapide montre que

$$BG_C B^\dagger = t_L^2 \begin{pmatrix} \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \cdots & 0 & 0 & 0 \\ \cdots & 0 & 0 & 0 \\ \cdots & 0 & 0 & G_{C_{1,1}} \end{pmatrix}, \quad (3.1.8)$$

où  $BG_C B^\dagger$  est de même dimension que  $H_{\text{SSH}}$ , et où  $G_{C_{1,1}}$  est l'élément de matrice (1,1) de la fonction de Green de  $C$ . Ainsi,  $H_{\text{SSH}}^{\text{eff}'}$  est donné par

$$H_{\text{SSH}}^{\text{eff}'} = \begin{pmatrix} 0 & t_1 & & & & \\ t_1 & 0 & t_2 & & & \\ & t_2 & 0 & t_1 & & \\ & & t_1 & 0 & \ddots & \\ & & & \ddots & \ddots & t \\ & & & & t & t_L^2 G_{C_{1,1}} \end{pmatrix}, \quad (3.1.9)$$

où  $t = t_1$  si  $N$  est de longueur paire, et  $t = t_2$  si  $N$  est de longueur impaire. Maintenant, pour reproduire le système complet, il est impératif d'associer ce nouveau système effectif à une lead à gauche, et en suivant le même raisonnement que précédemment, nous trouvons que l'Hamiltonien effectif de notre chaîne de SSH couplée à deux leads est

$$H_{\text{SSH}}^{\text{eff}} = \begin{pmatrix} t_L^2 G_{C_{1,1}} & t_1 & & & & \\ & t_1 & 0 & t_2 & & \\ & & t_2 & 0 & t_1 & \\ & & & t_1 & 0 & \ddots \\ & & & & \ddots & \ddots & t \\ & & & & & t & t_L^2 G_{C_{1,1}} \end{pmatrix}. \quad (3.1.10)$$

Tout ce qui reste à faire afin d'obtenir une expression complète pour  $H_{\text{SSH}}^{\text{eff}}$  est de trouver une expression analytique pour  $G_{C_{1,1}}$ .

**Théorème 3.1.2.** Soit l'Hamiltonien semi-infini

$$H_{\text{lead}} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & & & & \\ 1 & 0 & 1 & & & \\ & 1 & 0 & 1 & & \\ & & 1 & 0 & 1 & \\ & & & 1 & 0 & \ddots \\ & & & & \ddots & \ddots \end{pmatrix}. \quad (3.1.11)$$

La composante (1,1) de sa fonction de Green est donnée par [19, 24, 25]

$$G_{11} = \frac{1}{2} \left( E - \operatorname{sgn}(E + 2) \sqrt{E^2 - 4} \right). \quad (3.1.12)$$

DÉMONSTRATION. La fonction de Green peut être écrite sous la forme

$$G = (E - H_{\text{lead}})^{-1} = \sum_q \frac{|q\rangle \langle q|}{E - \varepsilon_q}, \quad (3.1.13)$$

où  $|q\rangle$  sont les vecteurs propres de  $H_{\text{lead}}$  et  $\varepsilon_q$ , ses valeurs propres. Au Chapitre 1, il a déjà été démontré que les valeurs propres de  $H_{\text{lead}}$  sont données par  $\varepsilon_q = 2 \cos(q)$ , où, pour cette preuve,  $2k = q$ , avec  $q \in (-\pi, \pi]$ . Nous pouvons vérifier que la solution

$$|q\rangle = \sum_{n=1}^{\infty} N_q \sin(nq) |n\rangle \quad (3.1.14)$$

respecte l'équation centrale qui gouverne l'Hamiltonien, c'est-à-dire (1.3.4), et l'équation frontière donnée par

$$-E |q\rangle_1 + |q\rangle_2 = 0. \quad (3.1.15)$$

Ainsi, (3.1.14) est une solution légitime de (1.3.3) avec la présente équation frontière. Alors, la composante  $\{n, m\}$  de (3.1.13), après avoir choisi la normalisation des états et à l'aide d'un argument de symétrie, devient

$$G_{nm} = \int_{q=0}^{\pi} \frac{4 \sin(nq) \sin(mq) dq}{E - 2 \cos(q)} \frac{1}{2\pi}, \quad (3.1.16)$$

ce qui implique que

$$G_{11} = \frac{2}{\pi} \int_0^{\pi} \frac{\sin^2(q)}{E - 2 \cos(q)} dq = \frac{1}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{\sin^2(q)}{E - 2 \cos(q)} dq. \quad (3.1.17)$$

Effectuons le changement de variable  $z = e^{iq}$ . À l'aide d'un peu d'algèbre, cette équation devient

$$G_{11} = -\frac{i}{4\pi} \oint \frac{dz}{z^2} \frac{(z^2 - 1)^2}{(z - z_+)(z - z_-)}, \quad (3.1.18)$$

où

$$z_{\pm} = \frac{E \pm \sqrt{E^2 - 4}}{2}. \quad (3.1.19)$$

Nous allons utiliser le théorème des résidus pour évaluer cette intégrale. Le contour choisi est le cercle unité allant dans le sens contraire à celui des aiguilles d'une montre. Dénotons

$$f(z) = \frac{1}{z^2} \frac{(z^2 - 1)^2}{(z - z_+)(z - z_-)}, \quad (3.1.20)$$

alors

$$G_{11} = \frac{1}{2} \sum \text{rés}(f, z_0) = \frac{1}{2} \sum_{|z_0| < 1} \text{rés}\left(\frac{(z^2 - 1)^2}{z^2(z - z_+)(z - z_-)}, z_0\right). \quad (3.1.21)$$

La fonction  $f$  a trois pôles, respectivement en  $z = \{0, z_-, z_+\}$ . Or, l'atteinte de ces pôles dépend de l'énergie du système. Nous voyons, par exemple, que pour  $E > 2$ ,  $z_+$  n'est pas à considérer car  $z_+ > 1$ , et que pour  $E < -2$ ,  $z_-$  n'est pas à considérer car  $z_- < -1$ . Étudions donc  $G_{11}$  cas par cas.

**Cas 1:**  $E > 2$

Dans ce cas, les pôles sont en  $z = 0$  et en  $z = z_-$ . D'un côté, le pôle en  $z = 0$  donne

$$\text{rés}(f, 0) = \lim_{z \rightarrow 0} \frac{d}{dz} \left( z^2 \frac{(z^2 - 1)^2}{z^2(z - z_+)(z - z_-)} \right) = \frac{z_- + z_+}{z_-^2 z_+^2}, \quad (3.1.22)$$

et de l'autre côté, le pôle en  $z = z_-$  donne

$$\text{rés}(f, z_-) = \lim_{z \rightarrow z_-} \frac{(z - z_-)(z^2 - 1)^2}{z^2(z - z_+)(z - z_-)} = \frac{(z_-^2 - 1)^2}{z_-^2(z_- - z_+)}. \quad (3.1.23)$$

Ainsi,

$$G_{11} = \frac{1}{2} \left( \text{rés}(f, 0) + \text{rés}(f, z_-) \right) = \frac{1}{2} \left( \frac{1 + z_-^2 z_+^2 - 2z_+^2}{z_+^2(z_- - z_+)} \right) = \frac{E - \sqrt{E^2 - 4}}{2}. \quad (3.1.24)$$

**Cas 2:**  $E < -2$

Dans ce cas, les pôles sont en  $z = 0$  et en  $z = z_+$ . Il suffit de calculer le résidu en  $z = z_+$ :

$$\text{rés}(f, z_+) = \lim_{z \rightarrow z_+} \frac{(z - z_+)(z^2 - 1)^2}{z^2(z - z_+)(z - z_-)} = \frac{(z_+^2 - 1)^2}{z_+^2(z_+ - z_-)}. \quad (3.1.25)$$

Ainsi,

$$G_{11} = \frac{1}{2} \left( \text{rés}(f, 0) + \text{rés}(f, z_+) \right) = \frac{1}{2} \left( \frac{1 + z_-^2 z_+^2 - 2z_-^2}{z_-^2(z_+ - z_-)} \right) = \frac{E + \sqrt{E^2 - 4}}{2}. \quad (3.1.26)$$

**Cas 3:**  $|E| < 2$

Dans ce cas, nous remarquons d'abord que  $|z_+| = |z_-| = 1$ . Ces pôles sont donc sur le contour d'intégration. En donnant une petite partie imaginaire positive à l'énergie,  $E = x + i\varepsilon$ , nous pouvons voir que, en fait,  $z_+$  se situe à l'extérieur du cercle unité, et donc que, comme pour le cas 1,

$$G_{11} = \frac{E - \sqrt{E^2 - 4}}{2}. \quad (3.1.27)$$

Au final, en combinant les trois cas particuliers, la solution générale pour  $G_{11}$  est donnée par

$$G_{11} = \frac{1}{2} \left( E - \text{sgn}(E + 2) \sqrt{E^2 - 4} \right). \quad (3.1.28)$$

□

Nous avons donc réussi à trouver un Hamiltonien effectif pour notre chaîne de SSH:

$$H_{\text{SSH}}^{\text{eff}} = \begin{pmatrix} \Sigma_{\infty} & t_1 & & & & & \\ t_1 & 0 & t_2 & & & & \\ & t_2 & 0 & t_1 & & & \\ & & t_1 & 0 & \ddots & & \\ & & & \ddots & \ddots & t & \\ & & & & & t & \Sigma_{\infty} \end{pmatrix}, \quad (3.1.29)$$

où

$$\Sigma_{\infty} = \frac{t_L^2}{2} \left( E - \text{sgn}(E + 2) \sqrt{E^2 - 4} \right). \quad (3.1.30)$$

## 3.2. Hamiltonien effectif du système à $N - 2$ sites

Pour expliquer l'émergence des états fantômes, il est fort utile de réutiliser la méthode développée dans la section précédente pour le cas où on se restreint à l'étude des composantes 2 à  $N - 1$  de la chaîne de SSH. Un tel calcul permet, d'ailleurs, de construire une base solide pour parler de topologie dans la limite  $t_L \gg 1$ . Pour cette raison, cette section se limite au cas  $N$  pair. Soit l'Hamiltonien (3.1.29) dans le cas où  $N$  est pair,

$$H_{\text{SSH}}^{\text{eff}} = \begin{pmatrix} \Sigma_{\infty} & t_1 & & & & & \\ t_1 & 0 & t_2 & & & & \\ & t_2 & 0 & t_1 & & & \\ & & t_1 & 0 & \ddots & & \\ & & & \ddots & \ddots & t_1 & \\ & & & & & t_1 & \Sigma_{\infty} \end{pmatrix}. \quad (3.2.1)$$

Nous désirons réécrire cet Hamiltonien de dimension  $N \times N$  sous la forme d'un Hamiltonien effectif de dimension  $(N - 2) \times (N - 2)$ . Pour ce faire, il est impératif de réexprimer les termes d'énergie propre localisés sur les sites 1 et  $N$  comme potentiel effectif sur les sites 2 et  $N - 1$ , respectivement. À l'aide de la formule (3.1.6), ceci est un calcul direct. Il s'avère utile de faire le tout en deux étapes: commençons par la frontière de droite. Dans ce cas, en se référant à (3.1.6), les composantes de cette expression sont données par

$$A = \begin{pmatrix} \Sigma_{\infty} & t_1 & & & & & \\ t_1 & 0 & t_2 & & & & \\ & t_2 & 0 & t_1 & & & \\ & & t_1 & 0 & \ddots & & \\ & & & \ddots & \ddots & t_2 & \\ & & & & & t_2 & 0 \end{pmatrix}, \quad (3.2.2)$$

$$B = \begin{pmatrix} \vdots \\ 0 \\ 0 \\ t_1 \end{pmatrix}, \quad (3.2.3)$$

et  $C = \Sigma_\infty$ . On note que  $A$  est de dimension  $(N-1) \times (N-1)$ ,  $B$  est de dimension  $(N-1) \times 1$  et  $B^\dagger$ , de dimension  $1 \times (N-1)$ . Un calcul direct montre que

$$BG_C B^\dagger = \frac{t_1^2}{E - \Sigma_\infty} \begin{pmatrix} \cdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \dots & 0 & 0 & 0 \\ \dots & 0 & 0 & 0 \\ \dots & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (3.2.4)$$

qui est une matrice de dimension  $(N-1) \times (N-1)$ . Alors, dans ce cas,

$$H_{\text{SSH}}^{\text{eff}'} = \begin{pmatrix} \Sigma_\infty & t_1 & & & & & & & & \\ t_1 & 0 & t_2 & & & & & & & \\ & t_2 & 0 & t_1 & & & & & & \\ & & t_1 & 0 & \cdots & & & & & \\ & & & \cdots & \cdots & t_2 & & & & \\ & & & & & t_2 & \sigma_\infty & & & \end{pmatrix}, \quad (3.2.5)$$

où  $\sigma_\infty = \frac{t_1^2}{E - \Sigma_\infty}$ . De même, en répétant ce travail avec le terme d'énergie propre de gauche, l'Hamiltonien effectif du système de dimension  $(N-2) \times (N-2)$  est donné par

$$H_{\text{SSH}}^{\text{eff}} = \begin{pmatrix} \sigma_\infty & t_2 & & & & & & & & \\ t_2 & 0 & t_1 & & & & & & & \\ & t_1 & 0 & t_2 & & & & & & \\ & & t_2 & 0 & \cdots & & & & & \\ & & & \cdots & \cdots & t_2 & & & & \\ & & & & & t_2 & \sigma_\infty & & & \end{pmatrix}. \quad (3.2.6)$$

Dans la limite  $t_L \rightarrow 1$ , on peut vérifier que ce résultat est valide. Il est assez intuitif<sup>3</sup> que dans cette limite,  $\sigma_\infty$  doit concorder avec l'expression donnée par (3.1.30) avec  $t_L$  remplacé par  $t_1$  (voir Figure 3.5 pour une représentation visuelle), c'est-à-dire que

$$\lim_{t_L \rightarrow 1} \sigma_\infty \equiv \lim_{t_L \rightarrow 1} \frac{t_1^2}{E - \Sigma_\infty} = \lim_{t_L \rightarrow 1} t_1^2 \Sigma_\infty,$$

---

<sup>3</sup> En effet, dans cette limite, on peut aussi voir le système comme étant une chaîne de SSH attachée à une lead de chaque côté via le paramètre de saut  $t_1$ .

où  $\lim_{t_L \rightarrow 1} \Sigma_\infty = G_{11}$ . Ceci se démontre aisément:

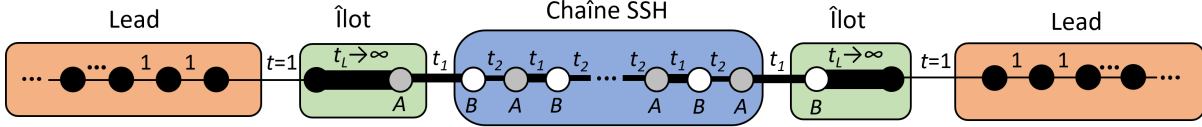
$$\begin{aligned}
\lim_{t_L \rightarrow 1} \frac{t_1^2}{E - \Sigma_\infty} &= \frac{2t_1^2}{E + \operatorname{sgn}(E + 2)\sqrt{E^2 - 4}} \\
&= \frac{2t_1^2}{E + \operatorname{sgn}(E + 2)\sqrt{E^2 - 4}} \times \frac{E - \operatorname{sgn}(E + 2)\sqrt{E^2 - 4}}{E - \operatorname{sgn}(E + 2)\sqrt{E^2 - 4}} \\
&= 2t_1^2 \left( \frac{E - \operatorname{sgn}(E + 2)\sqrt{E^2 - 4}}{E^2 - (E^2 - 4)} \right) \\
&= t_1^2 \left( \frac{E - \operatorname{sgn}(E + 2)\sqrt{E^2 - 4}}{2} \right) \\
&= t_1^2 G_{11} \\
&= \lim_{t_L \rightarrow 1} t_1^2 \Sigma_\infty,
\end{aligned}$$

ce qu'il fallait démontrer.

Pour  $t_L \gg 1$ ,  $E - \Sigma_\infty \propto t_L^2$ , ce qui implique que  $\sigma_\infty \propto t_L^{-2}$ . Par conséquent, peu importe l'énergie du système, dans la limite de fort couplage entre les trois composantes du système, l'Hamiltonien effectif  $(N - 2) \times (N - 2)$  tend vers l'Hamiltonien d'une chaîne de SSH isolée, dont le premier et dernier paramètre de sauts sont  $t_2$ . Ainsi, le système tripartite peut être vu comme la somme de cinq composantes non connectées les unes aux autres: deux leads qui perdent chacun un site, la chaîne de SSH qui perd un site à chaque extrémité (donc de longueur  $N - 2$ ), et 2 «îlots» à deux sites qui sont liés aux états de haute énergie. Pour cette raison, la topologie du système tripartite est, dans la limite  $t_L \gg 1$ , bien définie. En particulier, il s'avère que le fort couplage de la chaîne de SSH avec l'environnement cause un changement de phase topologique. Montrons ce phénomène à l'aide du cas pour lequel  $r > 1$ . Alors, pour  $t_L = 0$ , le système n'a pas d'états de surface: il est dans sa phase triviale. Ceci dit, dans la limite opposée,  $t_L \rightarrow \infty$ , le nouveau paramètre  $r \rightarrow r' \equiv t_2/t_1$  est maintenant inférieur à 1, ce qui implique que le système a maintenant deux états de surface: il est dans sa phase topologique (voir Figure 3.2). Par conséquent, le passage du paramètre  $t_L = 0 \rightarrow \infty$  engendre une transition de phase. D'ailleurs, la transition opposée se produit pour  $r < 1$ . Cette approche permet donc de parler rigoureusement de la topologie du système dans la limite  $t_L \gg 1$ . Ainsi, il nous est possible d'évaluer quantitativement la topologie de ce système tripartite dans la limite de très faible couplage et de très grand couplage. Ceci dit, entre ces deux limites, la topologie du système n'est pas encore bien comprise.

À l'aide de cette nouvelle représentation du système, il s'avère très facile d'expliquer l'émergence des états fantômes<sup>4</sup>: ce sont essentiellement des états de surface normaux pour le système  $(N - 2) \times (N - 2)$  dans la limite  $t_L \rightarrow \infty$ .

<sup>4</sup> Cette description n'est valide que pour  $r > 1$ : si  $r < 1$ , nous n'observons pas d'états fantômes. Notons aussi que les états fantômes peuvent avoir des énergies autres que  $E = 0$ : ce sont des états de basse énergie, mais celle-ci n'est pas nécessairement nulle.



**Fig. 3.2.** Système tripartite dans la limite où  $t_L \rightarrow \infty$ . La chaîne de SSH perd deux sites aux dépens des îlots. Ainsi, son premier et dernier paramètre de saut sont maintenant tous deux  $t_2$ . Il est à noter que les cinq systèmes sont complètement isolés les uns des autres.

En résumé, dans la limite  $t_L = 0$ , il n'y existe que des états de surface localisés sur le premier et le dernier site, et ce, seulement si  $r < 1$ . Dans la limite  $t_L \rightarrow \infty$ , il n'y existe que des états de surface localisés sur le deuxième et l'avant-dernier site (états fantômes), et ce, seulement si  $r > 1$ . Dans le prochain chapitre, une approche différente au problème nous permettra d'évaluer le poids (du mot anglais «weight»), c'est-à-dire la densité d'états locale<sup>5</sup>, de chacun de ces deux types d'états en fonction de  $t_L$ . En particulier, on pourra confirmer que le poids des états de surface (si  $r < 1$ ) est maximal pour  $t_L = 0$  et minimal pour  $t_L \rightarrow \infty$ , et que celui des états fantômes (si  $r > 1$ ) est minimal pour  $t_L = 0$  et maximal pour  $t_L \rightarrow \infty$ .

### 3.3. Valeurs propres et vecteurs propres du système effectif à $N$ sites

Dans cette section, nous allons trouver une expression générale pour les vecteurs propres du système effectif. Nous allons par la suite en déduire une expression pour les valeurs propres. Dans le premier chapitre, un ansatz pour les fonctions d'onde de la chaîne de SSH a déjà été obtenu, c'est-à-dire (1.1.9) pour  $N$  pair et (1.1.10) pour  $N$  impair. Il suffit maintenant d'y ajouter les deux nouvelles conditions frontières pour en déduire les coefficients  $C_{\pm}$ . Les deux équations aux frontières viennent de la première et dernière composante de l'équation de Schrödinger,

$$(H_{\text{SSH}}^{\text{eff}} - E) |\psi\rangle = 0. \quad (3.3.1)$$

#### 3.3.1. $N$ pair

Pour  $N$  pair, les équations frontières sont

$$\begin{aligned} (E - \Sigma_{\infty})\psi_1 - t_1\psi_2 &= 0, \\ (E - \Sigma_{\infty})\psi_N - t_1\psi_{N-1} &= 0. \end{aligned} \quad (3.3.2)$$

<sup>5</sup> Ce terme sera défini formellement à la Section 4.1.



En appliquant l'ansatz (1.1.9) dans la première équation de (3.3.2), on obtient

$$C_- = -e^{2i\phi} \left( \frac{\pm t_2 e^{-2ik} - \Sigma_\infty e^{-2i\phi}}{\pm t_2 e^{2ik} - \Sigma_\infty e^{2i\phi}} \right) C_+. \quad (3.3.3)$$

En appliquant l'ansatz (1.1.9) dans la deuxième équation de (3.3.2), on obtient

$$C_- = -e^{-2i\phi} e^{2i(N-2)k} \left( \frac{t_2 e^{2ik} \mp \Sigma_\infty e^{2i\phi}}{t_2 e^{-2ik} \mp \Sigma_\infty e^{-2i\phi}} \right). \quad (3.3.4)$$

En premier lieu, en insérant les coefficients  $C_\pm$  provenant de l'expression (3.3.3) dans cet ansatz, celui-ci devient

$$|\psi_n\rangle = \mp \frac{2ie^{i\phi} C_+}{t_2 E e^{2ik} - \Sigma_\infty (t_1 + t_2 e^{2ik})} \times \begin{cases} (E \Sigma_\infty - t_2^2) S_{n-1} - t_1 t_2 S_{n+1} & \text{si } n \text{ est impair,} \\ t_1 \Sigma_\infty S_{n-2} - t_2 (E - \Sigma_\infty) S_n & \text{si } n \text{ est pair.} \end{cases} \quad (3.3.5)$$

En deuxième lieu, en insérant les coefficients  $C_\pm$  provenant de l'expression (3.3.4) dans l'ansatz, il devient

$$|\psi_n\rangle = \frac{2ie^{-i\phi} C_+ e^{i(N-2)k}}{t_2 E e^{-2ik} - \Sigma_\infty (t_1 + t_2 e^{-i2k})} \times \begin{cases} t_1 \Sigma_\infty S_{N-n-1} - t_2 (E - \Sigma_\infty) S_{N-n+1} & \text{si } n \text{ est impair,} \\ (E \Sigma_\infty - t_2^2) S_{N-n} - t_1 t_2 S_{N-n+2} & \text{si } n \text{ est pair.} \end{cases} \quad (3.3.6)$$

Notons que l'expression (3.3.5) avec<sup>6</sup>  $\Sigma_\infty = t_L^2 e^{-2iq}$  est proportionnelle au premier<sup>7</sup> terme de (2.2.15), et que l'expression (3.3.6) avec  $\Sigma_\infty = t_L^2 e^{2iq}$  est proportionnelle au deuxième<sup>8</sup> terme de cette expression, qui donne la forme des fonctions d'onde pour le système tripartite<sup>9</sup> dans le cas où  $|E| < 2$ . Ainsi, la combinaison linéaire de ces deux nouvelles expressions nous redonne exactement les fonctions d'onde du système tripartite obtenues précédemment: cette nouvelle approche nous permet donc d'établir un contrôle de cohérence («consistency check») pour les fonctions d'onde du système à l'étude. On observe aussi que l'expression (2.2.21) obtenue au chapitre précédent, qui représente les fonctions d'onde pour  $|E| > 2$ , est proportionnelle à (3.3.5).

<sup>6</sup> À l'aide de (1.3.6) et de (3.1.30), on peut vérifier que pour  $|E| < 2$ , c'est-à-dire le domaine d'énergie duquel on obtient (2.2.15),  $\Sigma_\infty = t_L^2 e^{-2i|q|}$ . Les solutions pour  $|E| < 2$  sont une généralisation des solutions pour  $|E| > 2$ .

<sup>7</sup> Ce premier terme est lié à la particule qui vient de la droite.

<sup>8</sup> Ce deuxième terme est lié à la particule qui vient de la gauche.

<sup>9</sup> Pour alléger le texte, nous allons ainsi faire référence au système étudié au chapitre précédent.

Dans le cas à l'étude dans ce chapitre, comme  $C_+$  est arbitraire (nous n'avons pas encore choisi de normalisation pour les états), les solutions (3.3.5) et (3.3.6) sont valides et complètes: elles doivent donc coïncider. En exigeant que les deux solutions coïncident, on obtient une équation transcendante pour l'énergie du système effectif:

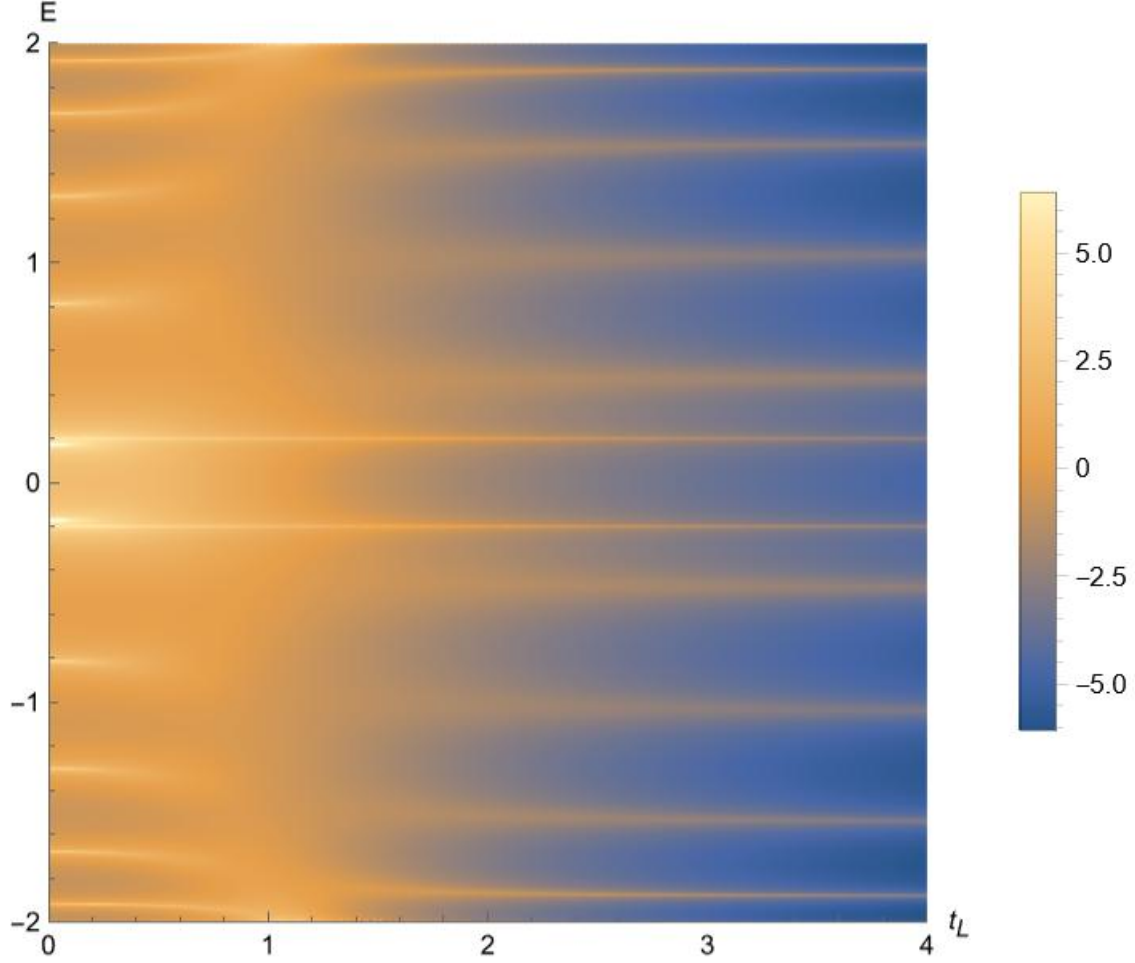
$$t_1(t_2^2 S_{N+2} + \Sigma_\infty^2 S_{N-2}) + t_2(t_2^2 - 2E\Sigma_\infty + \Sigma_\infty^2)S_N = 0. \quad (3.3.7)$$

Ainsi, (3.3.5) et (3.3.6) correspondent si et seulement l'énergie  $E$  à l'étude résout l'équation transcendante (3.3.7). D'un côté, comme le système tripartite possède des énergies qui ne solutionnent pas cette équation<sup>10</sup>, il possède des états pour lequel les expressions (3.3.5) et (3.3.6) ne se réduisent pas à l'une seule de ces deux expressions. D'un autre côté, les fonctions d'onde du système effectif peuvent toujours être données par l'une seule de ces deux expressions, comme pour toute énergie de ce système, ces deux expressions concordent. On en conclut donc que les fonctions d'onde du système effectif prennent des formes qui sont des solutions particulières des formes prises par les fonctions d'onde du système tripartite.

Comparons l'équation (3.3.7) à l'équation transcendante obtenue au chapitre précédent, (2.2.20), qui est valide pour  $|E| > 2$ . Pour de telles énergies, on veut réécrire  $\Sigma_\infty$  en fonction de  $\kappa$ , puis  $E$ , où, on le rappelle,  $q = i\kappa$  si  $E > 2$  et  $q = \pi/2 + i\kappa$  si  $E < -2$ . On voit aisément que  $|E| = 2 \cosh(2\kappa)$ , ce qui mène au fait que  $\Sigma_\infty = \pm t_L^2 e^{-2|\kappa|}$ , où  $\pm$  est le signe de l'énergie. En se rappelant que nous avons choisi  $\kappa > 0$ , nous avons au final que  $\Sigma_\infty = \pm t_L^2 e^{-2\kappa} = \pm t_L^2 e^{-\operatorname{arccosh}(\pm E/2)} = t_L^2 e^{-\operatorname{arccosh}(E/2)}$ . En insérant cette expression pour  $\Sigma_\infty$  dans (3.3.7), on obtient (2.2.20) (à un facteur multiplicatif près,  $e^{\operatorname{arccosh}(E/2)}$ ). Ceci n'est pas surprenant: les solutions obtenues par les deux méthodes devraient correspondre (du moins, pour  $|E| > 2$ , car c'est pour ce domaine que (2.2.20) est valide), comme ces deux approches représentent le même système physique.

On note aussi que les solutions de l'équation (3.3.7) seront réelles si et seulement si  $|\Re(E)| > 2$ . Autrement, les solutions sont complexes, et ce, dû au couplage des états de la chaîne de SSH avec ceux des leads (voir Figure 3.3). Cette équation peut être résolue de manière numérique, pour nous donner l'ensemble de solutions pour  $\{t_1, t_2, t_L, N\}$  donnés. Ensuite, on peut insérer ces solutions dans (3.3.5) ou (3.3.6) pour obtenir les fonctions d'onde associées à celles-ci.

<sup>10</sup> C'est une conclusion évidente, comme le système tripartite possède une infinité de solutions réelles pour  $E \in [-2, 2]$ .



**Fig. 3.3.** Graphe du logarithme de l'inverse du membre de gauche de l'équation (3.3.7) pour différentes valeurs d'énergie réelles dans la bande d'énergie des leads, et de  $t_L$ . Les points  $\{E, t_L\}$  associés à de grandes valeurs numériques (voir le code de couleur) représentent des états dont l'énergie a une petite composante imaginaire (la projection de l'énergie de ces états sur l'axe des réels est près d'être une singularité de (3.3.7)). Les paramètres du système sont  $t_1 = 0.9$ ,  $t_2 = 1.1$  et  $N = 10$ . On observe, entre autres, que le spectre d'énergie est élargi: ceci témoigne du fait que les solutions d'énergie dans cette région ( $|E| < 2$ ) sont complexes. Notons que les solutions  $E = \pm t_1 \mp t_2 = \mp 0.2$  sortent de l'intervalle à l'étude, comme elles correspondent à  $k = \pi/2$ : ce ne sont donc pas réellement des solutions à l'équation de Schrödinger. Note: prendre le logarithme de l'inverse de l'équation en question augmente la clarté du graphe.

### 3.3.2. $N$ impair

Pour  $N$  impair, les deux équations frontières sont

$$\begin{aligned}
 (E - \Sigma_\infty)\psi_1 - t_1\psi_2 &= 0, \\
 (E - \Sigma_\infty)\psi_N - t_2\psi_{N-1} &= 0.
 \end{aligned}
 \tag{3.3.8}$$

En appliquant l'ansatz (1.1.10) dans la première équation de (3.3.8), on obtient

$$C_- = -e^{2i\phi} \left( \frac{\pm t_2 e^{-2ik} - \Sigma_\infty e^{-2i\phi}}{\pm t_2 e^{2ik} - \Sigma_\infty e^{2i\phi}} \right) C_+. \quad (3.3.9)$$

En appliquant l'ansatz (1.1.10) dans la deuxième équation de (3.3.8), on obtient

$$C_- = -e^{2i\phi} e^{2i(N-1)k} \left( \frac{\pm t_1 - \Sigma_\infty e^{-2i\phi}}{\pm t_1 - \Sigma_\infty e^{2i\phi}} \right) C_+. \quad (3.3.10)$$

En insérant les coefficients  $C_\pm$  provenant de l'expression (3.3.9) dans l'ansatz, celui-ci devient

$$|\psi_n\rangle = \mp \frac{2ie^{i\phi} C_+}{t_2 E e^{2ik} - \Sigma_\infty (t_1 + t_2 e^{2ik})} \times \begin{cases} (E \Sigma_\infty - t_2^2) S_{n-1} - t_1 t_2 S_{n+1} & \text{si } n \text{ est impair,} \\ t_1 \Sigma_\infty S_{n-2} - t_2 (E - \Sigma_\infty) S_n & \text{si } n \text{ est pair.} \end{cases} \quad (3.3.11)$$

Aussi, en insérant maintenant les coefficients  $C_\pm$  provenant de l'expression (3.3.10) dans l'ansatz, il devient

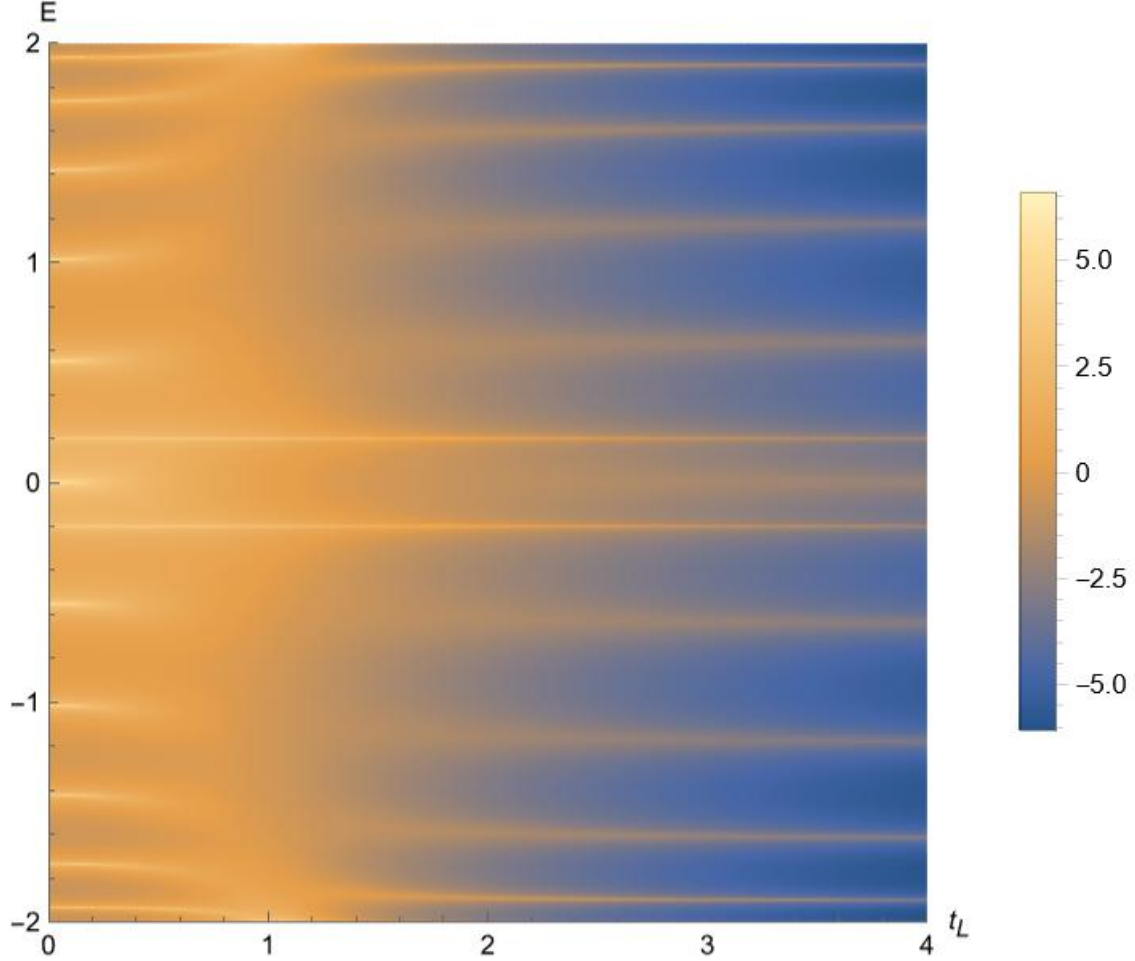
$$|\psi_n\rangle = \pm \frac{2ie^{i\phi} C_+ e^{i(N-1)k}}{E t_1 - \Sigma_\infty (t_1 + t_2 e^{2ik})} \times \begin{cases} (E \Sigma_\infty - t_1^2) S_{N-n} - t_1 t_2 S_{N-n+2} & \text{si } n \text{ est impair,} \\ t_2 \Sigma_\infty S_{N-n-1} - t_1 (E - \Sigma_\infty) S_{N-n+1} & \text{si } n \text{ est pair.} \end{cases} \quad (3.3.12)$$

Comme on l'a fait pour  $N$  pair, il est possible d'établir un lien entre les fonctions d'onde obtenues pour le système effectif et celles obtenues pour le système tripartite. Notons que (3.3.11) avec  $\Sigma_\infty = t_L^2 e^{-2iq}$  est proportionnelle au premier terme de (2.3.6), et que (3.3.12) avec  $\Sigma_\infty = t_L^2 e^{2iq}$  est proportionnelle au deuxième terme de cette expression, qui donne la forme des fonctions d'onde obtenues précédemment pour  $|E| < 2$ .

Encore une fois, les deux nouvelles solutions obtenues sont valides et complètes. En exigeant qu'elles concordent, nous obtenons une équation transcendante pour l'énergie:

$$t_1 t_2 S_{N+1} (E - 2\Sigma_\infty) + \Sigma_\infty S_{N-1} (\Sigma_\infty E - t_1^2 - t_2^2) = 0. \quad (3.3.13)$$

Il s'avère que, comme pour le cas  $N$  pair, cette équation transcendante concorde avec celle obtenue dans le chapitre précédent pour  $N$  impair, l'équation (2.3.8). Encore une fois, ceci n'est pas surprenant. Pour la même raison que celle mentionnée plus tôt, les solutions seront réelles si et seulement si  $|\Re(E)| > 2$  (voir Figure 3.4). On peut résoudre cette équation



**Fig. 3.4.** Graphe du logarithme de l'inverse du membre de gauche de l'équation (3.3.13) pour différentes valeurs d'énergie réelles dans la bande d'énergie des leads, et de  $t_L$ . Les paramètres du système sont  $t_1 = 0.9$ ,  $t_2 = 1.1$  et  $N = 11$ . On observe encore une fois que, dans cette région, le spectre d'énergie est élargi, et donc que les solutions d'énergie sont complexes. Notons que les solutions  $E = \pm t_1 \mp t_2 = \pm 0.2$  sortent de l'intervalle à l'étude, comme elles correspondent à  $k = \pi/2$ : ce ne sont donc pas réellement des solutions à l'équation de Schrödinger.

numériquement. À l'aide du spectre qui en découle, on peut ensuite obtenir les fonctions d'onde associées à chacune des solutions d'énergie.

### 3.4. Analyse des résultats

Cette section nous renseigne davantage sur ce que veulent dire les équations (2.2.15) et (2.3.6) qui, dans le chapitre précédent, donnent la forme la plus générale possible des fonctions d'onde pour le système avec  $N$  pair et  $N$  impair, respectivement. Comme nous l'avons constaté, la première composante de la fonction d'onde générale (2.2.15) est donnée par l'expression (3.3.5), et sa deuxième composante est donnée par l'expression (3.3.6). De

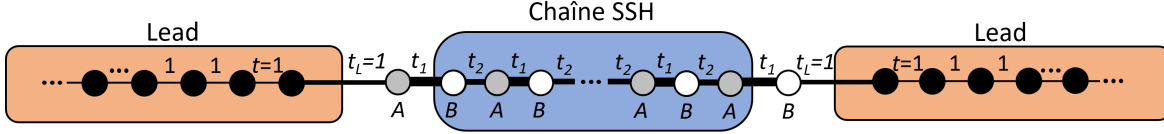
même, la première composante de la fonction d’onde (2.3.6) est donnée par (3.3.11), et sa deuxième composante est donnée par (3.3.12). Pour des valeurs d’énergie qui sont des solutions de (3.3.7) ((3.3.13) pour le cas  $N$  impair), et donc qui sont des solutions des équations transcendantes obtenues au chapitre précédent<sup>11</sup> dans le cas où  $|E| > 2$ , les deux composantes convergent vers la même expression. Par conséquent, pour de telles énergies, les fonctions d’onde associées aux différents systèmes (effectif vs infini) concordent exactement.

Il s’avère que les choses sont plus compliquées dans le cas où  $|\Re(E)| < 2$ . En effet, dans le chapitre précédent, nous obtenions un spectre continu de valeurs d’énergie réelles dans cet intervalle, alors que dans le présent chapitre, un spectre discret de valeurs d’énergie complexe à été obtenu. Ainsi, il y existe une infinité de fonctions d’onde qui solutionnent le système tripartite qui n’ont aucun équivalent provenant du système fini, comme celles-ci ont des énergies qui ne résolvent pas les équations transcendantes. Ceci dit, il est possible de voir ces deux résultats a priori différents comme deux représentations du même phénomène. Dans les deux cas, le spectre démontre qu’il y a un couplage des états de la chaîne de SSH avec ceux des leads. Dans le premier cas, ceci se voit dans le fait que le système tripartite acquière l’ensemble des énergies des leads. Dans le deuxième cas, ceci se voit dans le fait que les solutions dans cet intervalle acquièrent une partie imaginaire non nulle: ceci est la signature du couplage entre les états des différentes composantes du système tripartite, et ceci implique qu’il y a fuite des états de la chaîne de SSH vers les leads. Ce qui est important à noter est que le fait que les solutions de ce système soient complexes implique qu’un élargissement du spectre d’énergie est observé. Ceci revient à dire que la projection de ce spectre discret et complexe sur l’axe des énergies réelles donne un spectre continu. C’est exactement ce que nous observons à la Figure 3.3 et la Figure 3.4.

Portons une attention particulière au spectre du système effectif. L’Hamiltonien du système effectif, dû à ses composantes (1,1) et  $(N,N)$  sur lesquelles se trouvent des potentiels effectifs complexes, n’est plus hermitien. Ceci implique que les valeurs propres du système ne sont plus nécessairement réelles: il n’est donc pas surprenant qu’il y ait un élargissement du spectre, c’est-à-dire des valeurs propres complexes. Physiquement, comme mentionné plus tôt, la composante imaginaire des énergies peut être vue comme une mesure du taux de fuite des états du modèle de SSH vers les leads. Il s’avère que cette composante imaginaire est maximale en amplitude près de  $t_L = 1$ . Pour le cas particulier où  $t_L$  prend exactement cette valeur, ce paramètre de saut concorde avec le paramètre de saut des leads. Une telle configuration est illustrée à la Figure 3.5.

Ainsi, ce n’est pas surprenant que ce soit près de ce point que le taux de fuite des électrons hors de la chaîne de SSH soit maximale. Par ailleurs, il s’avère qu’à ce point critique, on peut voir le système comme étant composé d’une chaîne de SSH de longueur  $N - 2$ , dont

<sup>11</sup> On utilise ici le fait qu’il y a une correspondance un à un entre les solutions d’énergie  $|E| > 2$  obtenues pour le système tripartite et celles obtenues pour le système effectif.

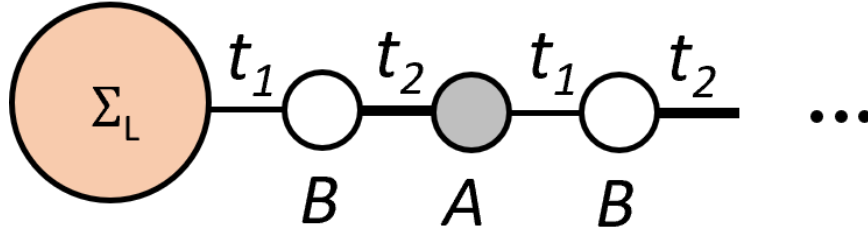


**Fig. 3.5.** Système tripartite pour  $t_L = 1$ . On peut voir le système comme étant composé d'une chaîne de SSH de longueur paire  $N - 2$  avec premier et dernier paramètre de saut  $t_2$ , qui est reliée à deux leads via le paramètre de saut  $t_1$ .

le premier et dernier paramètre de saut sont changés par rapport à la configuration initiale, et qui est couplée à des leads via le paramètre de saut  $t_1$  à gauche et  $t$  à droite,  $t$  étant le dernier paramètre de saut du système initial. En conservant cette interprétation du système pour  $t_L \neq 1$ , on observe que les frontières de la chaîne de SSH ne sont plus bien définies dans l'espace. C'est pour cette même raison que les états de basse énergie, qui étaient, pour  $t_L = 0$ , seulement que des états de surface «normaux», peuvent aussi se trouver sous forme d'états fantômes quand  $t_L$  est non nul, c'est-à-dire que ces états peuvent autant être fortement localisés sur les interfaces initiales (sites 1 et  $N$ ), que sur les nouvelles interfaces, (sites 2 et  $N - 1$ ). C'est donc l'interprétation physique que l'on donne à l'émergence des états fantômes. Sur un autre ordre d'idée, on observe aussi que l'élargissement du spectre (et donc le taux de fuite des états) diminue une fois que  $t_L$  passe 1. En particulier, pour  $t_L$  suffisamment grand, l'élargissement du spectre est négligeable: ceci nous permet de voir le système, dans la limite où  $t_L$  est très grand, comme étant de nouveau fermé.

Ensuite, comme mentionné plus tôt, cette méthode permet de plus aisément discuter des états de haute énergie rencontrés dans le chapitre précédent. Dans la limite des grandes énergies, au deuxième ordre en  $1/E$ , on peut montrer que  $\Sigma_\infty \simeq t_L^2/E$ . Comme, dans ce cas,  $E \simeq t_L$  pour de tels états,  $\Sigma_\infty \simeq t_L$ . Pour de grandes valeurs de  $t_L$ , le potentiel effectif localisé sur le premier et dernier site de la chaîne de SSH est donc très grand par rapport aux paramètres de saut  $t_1$  et  $t_2$ . Du point de vue d'un électron qui se situe sur le premier ou dernier site, ceci revient à dire que  $t_1$  et  $t_2$  sont très petits (voir Figure 3.6). Ainsi, la probabilité que ce dernier se déplace vers un site interne est très faible, d'où le fait que l'on retrouve une très grande amplitude sur les sites aux frontières, et une très faible amplitude partout ailleurs. Ceci explique aussi pourquoi ce phénomène de localisation sur les surfaces s'accroît lorsque  $t_L$  augmente.

L'avantage de la présente approche par rapport à l'approche précédente est donc qu'elle nous renseigne mieux sur les états avec énergie  $|\Re(E)| < 2$ . En particulier, elle nous permet de développer une intuition derrière l'émergence des états fantômes. Elle nous permet aussi de mesurer le taux de fuite des états de la chaîne de SSH vers les leads. Enfin, elle nous permet de discuter de la transition du système de petit  $t_L$  à grand  $t_L$ , c'est-à-dire d'un système fermé de longueur  $N$  à un système fermé de longueur  $N - 2$ . Ainsi, cette méthode



**Fig. 3.6.** Extrémité gauche du système effectif pour  $t_L$  grand. Dans ce cas,  $t_1$  et  $t_2$  sont, en comparaison, très petits. La probabilité que les électrons localisés sur le premier site se déplacent vers les sites suivants est très petite.

pose les bases pour nous permettre de discuter de topologie. D'un autre côté, elle aide aussi à expliquer la forte localisation des états de haute énergie  $|E| > t_1 + t_2$  sur les frontières du système de SSH lorsque  $t_L \gg 1$ .

### 3.5. Cas particulier: système à 3 sites

Nous allons terminer le chapitre en étudiant le système effectif pour lequel la chaîne de SSH possède seulement trois sites. Ce système est intéressant puisqu'il est assez complexe pour nous permettre de soulever plusieurs points importants, mais aussi assez simple pour nous donner de belles expressions analytiques. Soit

$$\mathcal{H} = \begin{pmatrix} \Sigma_\infty & t_1 & 0 \\ t_1 & 0 & t_2 \\ 0 & t_2 & \Sigma_\infty \end{pmatrix}. \quad (3.5.1)$$

Avant de se lancer dans les calculs, notons que le calcul de  $\Sigma_\infty$  fait au début de ce chapitre ne s'applique que pour des états dont l'énergie est réelle. Or, comme nous l'avons vu dans les sections précédentes, il s'avère que pour des énergies telles que  $|\Re(E)| < 2$ , la partie imaginaire correspondante est non nulle. Ainsi, l'expression obtenue n'est valide que dans le cas où le spectre d'énergie est à l'extérieur de cet intervalle. Dans la sous-section qui suit, nous allons obtenir une expression pour  $\Sigma_\infty$  dans le cas où l'énergie est complexe.

#### 3.5.1. Énergie propre pour $E \in \mathbb{C}$

Au lieu d'effectuer le calcul de  $G_{11} = \Sigma_\infty/t_L^2$  au long, nous pouvons utiliser notre intuition physique pour déterminer sa forme dans le cas où  $|\Re(E)| < 2$ , c'est-à-dire le cas pour lequel  $E \in \mathbb{C}$ . Pour de telles valeurs d'énergie, les états de la chaîne de SSH sont couplés avec ceux des leads, et on s'attend à observer une fuite de ces premiers vers l'environnement. À l'aide



de la première section de ce chapitre (voir en particulier (3.1.18) et (3.1.19)), on sait que

$$G_{11} = \frac{1}{2} \left( E \pm \sqrt{E^2 - 4} \right) = \frac{1}{2} \left( E \pm i\sqrt{4 - E^2} \right), \quad (3.5.2)$$

puisque<sup>12</sup> les pôles de  $G_{11}$  sont toujours  $\{0, z_-, z_+\}$ . Comme les états doivent avoir une durée de vie finie, la composante imaginaire de leur énergie doit être négative, et donc le signe  $(-)$  de  $G_{11}$  doit être choisi; autrement, il n'y aura pas de fuite. On peut donc résumer les résultats comme suit

$$G_{11} = \begin{cases} \frac{E - \sqrt{E^2 - 4}}{2} & \text{si } \Re(E) > 2, \\ \frac{E + \sqrt{E^2 - 4}}{2} & \text{si } \Re(E) < -2, \\ \frac{E - \sqrt{E^2 - 4}}{2} = \frac{E - i\sqrt{4 - E^2}}{2} & \text{si } -2 < \Re(E) < 2. \end{cases} \quad (3.5.3)$$

Nous allons appeler les expressions pour lesquelles il y a un  $(-)$  devant la racine carrée, solutions de type 1, et les solutions avec le  $(+)$  devant la racine carrée, solutions de type 2. L'énergie propre pour ce système est donc donnée par  $t_L^2 G_{11}$ , avec  $G_{11}$  tel que décrit ci-haut.

### 3.5.2. Valeurs propres du système

Pour obtenir les solutions de  $\mathcal{H}$ , nous allons trouver les valeurs d'énergie  $E$  telles que  $\det(E - \mathcal{H}) = 0$ . Soit,

$$\begin{aligned} E - \mathcal{H} &= \begin{pmatrix} E - \frac{t_L^2}{2} \left( E \pm \sqrt{E^2 - 4} \right) & -t_1 & 0 \\ -t_1 & E & -t_2 \\ 0 & -t_2 & E - \frac{t_L^2}{2} \left( E \pm \sqrt{E^2 - 4} \right) \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} E \left( 1 - \frac{t_L^2}{2} \right) \mp \frac{t_L^2}{2} \sqrt{E^2 - 4} & -t_1 & 0 \\ -t_1 & E & -t_2 \\ 0 & -t_2 & E \left( 1 - \frac{t_L^2}{2} \right) \mp \frac{t_L^2}{2} \sqrt{E^2 - 4} \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (3.5.4)$$

où les solutions avec le signe<sup>13</sup> du haut sont les solutions de type 2 et les solutions avec le signe du bas sont les solutions de type 1. Pour obtenir les valeurs propres de  $\mathcal{H}$ , nous exigeons que le déterminant de cette matrice soit nul:

$$\underbrace{\left[ E \left( 1 - \frac{t_L^2}{2} \right) \mp \frac{t_L^2}{2} \sqrt{E^2 - 4} \right]}_{\text{solutions de type X}} \underbrace{\left[ E \left[ E \left( 1 - \frac{t_L^2}{2} \right) \mp \frac{t_L^2}{2} \sqrt{E^2 - 4} \right] - t_1^2 - t_2^2 \right]}_{\text{solutions de type Y}} = 0. \quad (3.5.5)$$

On peut donc séparer les solutions en deux parties: les solutions de type X sont liées aux zéros de la parenthèse de gauche, et les solutions de type Y sont liées aux zéros de la parenthèse de droite.

<sup>12</sup> Une démonstration rigoureuse de ce résultat ne sera pas présentée, malgré le fait qu'elle peut être construite sans trop de difficulté.

<sup>13</sup> Nous utilisons la couleur rouge pour distinguer ce  $\pm$  de ceux qui vont suivre.

## Solutions de type X

On cherche les solutions de type X, c'est-à-dire celles qui respectent

$$E(2 - t_L^2) = \pm t_L^2 \sqrt{E^2 - 4}. \quad (3.5.6)$$

Nous allons distinguer trois cas. Nous allons d'abord étudier les solutions avec énergie réelle; nous allons ensuite étudier celles avec énergie imaginaire; enfin, nous allons étudier celles avec énergie complexe.

### Cas X.1: $E \in \mathbb{R}$

D'abord, comme  $E \in \mathbb{R}$ , on note que  $E^2 > 4$ . En mettant (3.5.6) au carré, on obtient que

$$E^2(1 - t_L^2) = -t_L^4 \iff E = \pm \frac{t_L^2}{\sqrt{t_L^2 - 1}}. \quad (3.5.7)$$

On note que  $t_L > 1$  est nécessaire pour que cette solution soit réelle. Ceci dit, cette expression résout l'équation (3.5.6) mise au carré, et n'est donc pas nécessairement une solution de (3.5.6). On doit donc vérifier pour quelles valeurs de  $t_L$  cette expression est valide. Sans perte de généralité, étudions le cas  $E > 0$ , de sorte que (3.5.6) prenne le signe  $(-)$ :

$$\frac{t_L^2}{\sqrt{t_L^2 - 1}}(2 - t_L^2) = -t_L^2 \sqrt{\frac{t_L^2}{\sqrt{t_L^2 - 1}} - 4}.$$

On peut montrer que cette équation est valide si et seulement si  $t_L^2 - 2 > 0$ . Par conséquent, la solution du cas X.1 est

$$E = \pm \frac{t_L^2}{\sqrt{t_L^2 - 1}} \quad \text{si } t_L > \sqrt{2}. \quad (3.5.8)$$

### Cas X.2: $E \in \mathbb{I}$

Dans ce cas, on écrit  $E = ib$ , avec  $b \in \mathbb{R}$ . Encore une fois, en mettant (3.5.6) au carré, on obtient que

$$b = \pm \frac{t_L^2}{\sqrt{1 - t_L^2}}. \quad (3.5.9)$$

Comme  $b$  doit être réel, on note d'abord que cette solution n'est valide que si  $t_L < 1$ . Aussi, montrons que cette expression n'est valide que si  $b < 0$ . En appliquant la solution donnée par (3.5.9) dans (3.5.6), et en prenant le signe  $(-)$ , on obtient:

$$\pm \left( \frac{t_L^2}{\sqrt{t_L^2 - 1}} \right) (2 - t_L^2) = -t_L^2 \sqrt{\frac{t_L^4}{t_L^2 - 1} - 4} = -t_L^2 \sqrt{\frac{t_L^4 - 4t_L^2 + 4}{t_L^2 - 1}} = - \left( \frac{t_L^2}{\sqrt{t_L^2 - 1}} \right) |t_L^2 - 2|.$$

Comme  $t_L < 1$ , ceci n'est vrai que pour la solution ayant le signe  $(-)$ . Ainsi, la solution du cas X.2 est

$$E = -i \frac{t_L^2}{\sqrt{1 - t_L^2}} \quad \text{si } t_L < 1. \quad (3.5.10)$$

Cas X.3:  $E \in \mathbb{C}$

Comme  $E \in \mathbb{C}$ ,  $|\Re(E)| < 2$ . Écrivons  $E = a + ib$ , où  $a, b \in \mathbb{R}$  et non nuls. En mettant (3.5.6) au carré, on obtient que

$$\begin{aligned} (a^2 - b^2 + 2iab)\left(1 + \frac{t_L^4}{4} - t_L^2\right) &= \frac{t_L^4}{4}(a^2 - b^2 - 4 + 2iab) \\ \iff (1 - t_L^2)(a^2 - b^2) + t_L^4 + i(1 - t_L^2)(2ab) &= 0. \end{aligned}$$

On voit que la partie imaginaire de cette équation n'a aucune solution non triviale, et donc qu'il n'y a aucune solution d'énergie complexe pour le cas X.

### Solutions de type Y

On cherche les solutions de type Y, c'est-à-dire telles que

$$E^2(2 - t_L^2) - 2\alpha = \pm Et_L^2 \sqrt{E^2 - 4}, \quad (3.5.11)$$

où on définit  $\alpha \equiv t_1^2 + t_2^2$ . Encore une fois, nous allons étudier les trois mêmes cas que ceux étudiés pour les solutions de type X. Dans ce qui suit, nous allons assumer que  $\alpha > 2$ , afin d'éviter certaines complications mathématiques sans intérêts physiques qui émergent dans la région où  $\alpha \leq 2$ .

Cas Y.1:  $E \in \mathbb{R}$

En mettant (3.5.11) au carré, on obtient que

$$\begin{aligned} E^4(4 + t_L^4 - 4t_L^2) + 4\alpha^2 - 4\alpha E^2(2 - t_L^2) &= t_L^4 E^2(E^2 - 4) \\ \iff E_{(\pm),\{\pm\}} &= (\pm) \sqrt{\frac{t_L^4 + \alpha(t_L^2 - 2)\{\pm\} \sqrt{(t_L^4 + \alpha(t_L^2 - 2))^2 + 4\alpha^2(t_L^2 - 1)}}{2(t_L^2 - 1)}}, \end{aligned} \quad (3.5.12)$$

où

$$(t_L^4 + \alpha(t_L^2 - 2))^2 + 4\alpha^2(t_L^2 - 1) = t_L^4 + 2\alpha t_L^2 + \alpha(\alpha - 4). \quad (3.5.13)$$

Pour cette expression et celles qui vont découler des deux prochains cas (Y.2 et Y.3), on note que les  $(\pm)$  sont indépendants des  $\{\pm\}$ , et vice-versa. On doit vérifier pour quelles valeurs de  $t_L$  cette expression est une solution de (3.5.11). Comme on désire obtenir une solution

réelle, on exige que (3.5.13) soit positif, ce qui requiert que

$$t_L > t_{L_c} \equiv \sqrt{2\sqrt{\alpha} - \alpha} \quad \text{ou} \quad \alpha > 4. \quad (3.5.14)$$

Si  $t_L > 1$ ,  $E_{(\pm),\{+\}}$  est toujours une solution, alors que  $E_{(\pm),\{-}}$  ne l'est pas, comme dans ce domaine de  $t_L$ , cette expression pour  $E$  n'est pas réelle.

Si  $t_L < 1$  avec  $t_L > t_{L_c} \equiv \sqrt{2\sqrt{\alpha} - \alpha}$ , ou que  $\alpha > 4$ ,  $E_{(\pm),\{+\}}$  est encore une fois une solution, alors que ce n'est pas le cas pour  $E_{(\pm),\{-}}$  (une vérification numérique suffit pour s'en convaincre). Ainsi, on en conclut que la solution du cas Y.1 est donnée par

$$E = \pm \sqrt{\frac{t_L^4 + \alpha(t_L^2 - 2) + \sqrt{(t_L^4 + \alpha(t_L^2 - 2))^2 + 4\alpha^2(t_L^2 - 1)}}{2(t_L^2 - 1)}} \quad \text{si } t_L > t_{L_c} \quad \text{ou} \quad \alpha > 4. \quad (3.5.15)$$

Cas Y.2:  $E \in \mathbb{I}$

On écrit  $E = ib$ , avec  $b \in \mathbb{R}$ . En mettant (3.5.11) au carré, on obtient:

$$\begin{aligned} b^4(4 + t_L^2 - 4t_L^2) + 4\alpha^2 + 4\alpha b^2(2 - t_L^2) &= t_L^4 b^2(b^2 + 4) \\ \iff b_{(\pm),\{\pm\}} &= (\pm) \sqrt{\frac{t_L^4 + \alpha(t_L^2 - 2)\{\pm\} + \sqrt{(t_L^4 + \alpha(t_L^2 - 2))^2 + 4\alpha^2(t_L^2 - 1)}}{2(1 - t_L^2)}}. \end{aligned} \quad (3.5.16)$$

Si  $t_L > 1$ ,  $b_{(-),\{-}}$  est une solution, alors que les trois autres choix de  $\pm$  n'en sont pas. En effet, on note d'abord que  $b_{(\pm),\{+\}}$  est imaginaire, et donc ne peut pas être une solution. Ensuite, montrons par absurde que  $b$  doit être négatif. Soit  $b > 0 \in \mathbb{R}$ , alors, de (3.5.11), avec  $(-)$ , on a que

$$\begin{aligned} -b^2(2 - t_L^2) - 2\alpha &= -(ib)t_L^2 \sqrt{-b^2 - 4} = bt_L^2 \sqrt{b^2 + 4} \\ \iff b^2(t_L^2 - 2) &= t_L^2 b \sqrt{b^2 + 4} + 2\alpha > t_L^2 b^2, \end{aligned} \quad (3.5.17)$$

ce qui est impossible, d'où la contradiction.

Si  $t_L < 1$ , il n'y a aucune telle solution. En effet, on note que dans ce cas,  $t_L^4 + \alpha(t_L^2 - 2) < 0$ . Ceci implique que  $b_{(\pm),\{\pm\}}$  est toujours imaginaire, peu importe le choix de signe  $(\pm)$ ,  $\{\pm\}$ .

Ainsi, la solution du cas Y.2 est donnée par

$$E = -i \sqrt{\frac{t_L^4 + \alpha(t_L^2 - 2) - \sqrt{(t_L^4 + \alpha(t_L^2 - 2))^2 + 4\alpha^2(t_L^2 - 1)}}{2(1 - t_L^2)}} \quad \text{ssi } t_L > 1. \quad (3.5.18)$$

Cas Y.3:  $E \in \mathbb{C}$

Écrivons  $E = a + ib$ , avec  $a, b \in \mathbb{R}$  et non nuls. Alors la solution générale

$$E_{(\pm),\{\pm\}} = (\pm) \sqrt{\frac{t_L^4 + \alpha(t_L^2 - 2)\{\pm\} \sqrt{(t_L^4 + \alpha(t_L^2 - 2))^2 + 4\alpha^2(t_L^2 - 1)}}{2(t_L^2 - 1)}}, \quad (3.5.19)$$

s'applique encore. Or, pour qu'elle soit complexe, on exige que  $t_L < t_{Lc}$  et que  $\alpha < 4$ . On peut montrer que dans ce cas, seulement  $E_{(+),\{+\}}$  et  $E_{(-),\{-}}$  sont des solutions du système. Nous faisons un résumé de l'ensemble des solutions du modèle de SSH pour  $N = 3$  dans le Tableau 3.1. De plus, nous illustrons le spectre d'énergie en fonction du paramètre  $t_L$  à la

Caractérisation des états du système à trois sites en fonction de $t_L$		
Valeur de $t_L$	Nombre de solutions	Type de solutions
1. $t_L > \sqrt{2}$	5	Purement réelles ou purement imaginaires. Deux solutions réelles et de signes opposés données par (3.5.15), une solution imaginaire donnée par (3.5.18), et deux autres solutions réelles et de signes opposés données par (3.5.8).
2. $1 < t_L < \sqrt{2}$	3	Purement réelles ou purement imaginaires. Les deux solutions réelles et de signes opposés sont données par (3.5.15), et la solution imaginaire est donnée par (3.5.18).
3. $t_L < 1$		
• $t_L > t_{Lc}$ ou $\alpha > 4$	3	Idem au cas 2, à l'exception que la solution imaginaire est donnée par (3.5.10).
• $t_L < t_{Lc}$ et $\alpha < 4$	3	Purement imaginaires ou complexes. La solution imaginaire est donnée par (3.5.10). Les deux solutions complexes (et de partie réelle avec signes opposés) sont données par (3.5.19), avec les signes $(+), \{+\}$ et $(-), \{-\}$ .

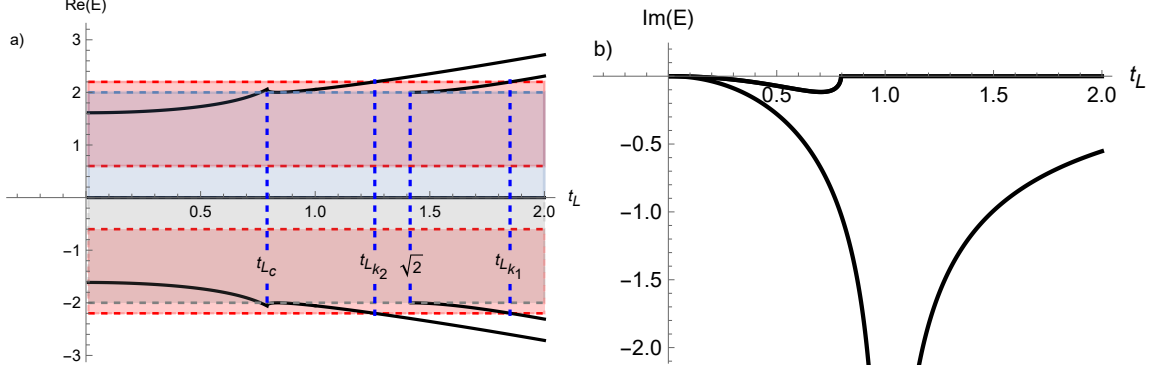
**Tableau 3.1.** Tableau présentant les principales différences entre les états qui émergent pour  $t_L > \sqrt{2}$ ,  $t_L < 1$  et  $t_L$  entre ces deux régions.

Figure 3.7.

### 3.5.3. Discussion portant sur le cas particulier $N = 3$

Dans cette section, nous avons obtenu des formes analytiques pour les valeurs propres du système de SSH pour  $N = 3$ . Ces formes nous permettent de faire plusieurs observations.

D'abord, elles nous permettent de connaître le nombre total de valeurs propres du système en fonction de  $t_L$ . Il s'avère qu'il y a toujours trois valeurs propres pour  $t_L < \sqrt{2}$ , et cinq



**Fig. 3.7.** Spectre d'énergie du modèle de SSH avec  $N = 3$  pour  $t_1 = 1.4$ ,  $t_2 = 0.8$ . Le spectre est séparé en deux: on illustre ses composantes réelles à gauche et on illustre ses composantes imaginaires à droite. (a) Les lignes pointillées rouges délimitent le spectre d'énergie dans la limite thermodynamique pour le modèle de SSH isolé, alors que les lignes pointillées grises (bleues) délimitent celui associé aux leads. Les lignes noires représentent le spectre d'énergie pour le système effectif. Comme  $\alpha < 4$ , pour  $t_L < t_{L_c} \approx 0.79$ , on observe des solutions qui se situent dans la bande d'énergie des leads, donc des solutions complexes. Pour  $t_L > t_{L_c}$ , les solutions sont réelles (à l'exception de l'état d'énergie nulle). (b) Pour  $t_L < t_{L_c}$ , tous les états ont une composante imaginaire non nulle. Les deux états dans les bandes de la chaîne de SSH ont la même composante imaginaire, qui tend vers zéro près de  $t_L = t_{L_c}$ . Dès que  $t_L > t_{L_c}$ , seul l'état d'énergie (réelle) nulle a une composante imaginaire non nulle.

pour  $t_L > \sqrt{2}$ , comme le témoigne la Figure 3.7. En général, pour une matrice de dimension  $n \times n$  qui ne dépend pas explicitement de ses valeurs propres, il y a au plus  $n$  solutions. Or, comme l'Hamiltonien du système dépend explicitement de l'énergie, il n'est pas surprenant que le nombre de solutions excède la dimension du système.

Ensuite, elles nous permettent de trouver les deux points critiques<sup>14</sup>  $t_{L_k}$  à partir desquels les états de haute énergie émergent. Pour ce faire, il suffit de résoudre les équations (3.5.8) et (3.5.15) pour  $t_L$ , dans le cas où  $E = t_1 + t_2$ . Les deux points critiques sont

$$t_{L_{k_1}} = \frac{\sqrt{(t_1 + t_2)\sqrt{(t_1 + t_2 - 2)(t_1 + t_2 + 2)} + t_1 + t_2}}{\sqrt{2}}, \quad (3.5.20)$$

et

$$t_{L_{k_2}} = \sqrt{\frac{\sqrt{t_1^2 t_2^2 (t_1 + t_2 - 2)(t_1 + t_2)^2 (t_1 + t_2 + 2)}}{(t_1 + t_2)^2}} + t_1 t_2. \quad (3.5.21)$$

Dans le cas particulier pour lequel  $t_1 = 1.4$  et  $t_2 = 0.8$ , ces points critiques sont  $t_{L_{k_1}} = 1.85$  et  $t_{L_{k_2}} = 1.26$ . On illustre ces transitions à la Figure 3.7.

<sup>14</sup> Il est important de faire la distinction entre les symboles  $t_{L_k}$  et  $t_{L_c}$ . Ce premier est lié à l'émergence des états de haute énergie, alors que ce deuxième détermine la frontière entre les solutions d'énergie réelle et celles d'énergie complexe.

Puis, elles nous permettent d'obtenir une expression pour la partie imaginaire des énergies, et donc de mesurer le taux de fuite des états en fonction de  $t_L$ . En particulier, ceci nous permet d'analyser le taux de fuite des états de surface, dont l'énergie est purement imaginaire, près de  $t_L = 1$ . Pour  $t_L = 1 - \epsilon$ ,  $\epsilon > 0$ , à l'aide de l'expression (3.5.10), on voit que cette énergie diverge. De même, pour  $t_L = 1 + \epsilon$ ,  $\epsilon > 0$ , à l'aide de l'expression (3.5.18), on observe le même phénomène. Ainsi, ceci implique que pour le cas  $N = 3$ , le taux de fuite de ces états est maximale pour  $t_L = 1$ . On peut visualiser ce comportement à la Figure 3.7. Ce phénomène concorde avec ce que nous avons vu dans la Section 3.3 (voir la Figure 3.3 et la Figure 3.4), c'est-à-dire que l'élargissement du spectre d'énergie est maximal pour  $t_L$  près de 1. D'un autre côté, on observe aussi qu'après le point critique  $t_L = 1$ , cette composante imaginaire décroît, jusqu'à tendre vers 0 quand  $t_L \rightarrow \infty$ .





# Chapitre 4

---

## Fonction de Green du système effectif

Dans tout ce qui précède, la méthode hamiltonienne a été utilisée pour analyser le système tripartite. Ceci nous a permis de déterminer les valeurs propres et vecteurs propres de ce dernier. Il y existe une autre approche, liée aux fonctions de Green [24], qui nous permet de faire un travail similaire, et qui est en quelque sorte plus adaptée que l'approche hamiltonienne pour étudier des systèmes ouverts. Dans ce chapitre, nous allons d'abord décrire cette approche, puis l'utiliser pour obtenir de l'information supplémentaire sur le système.

### 4.1. Discussion portant sur la signification physique des fonctions de Green

Avant d'aller en détail dans le calcul des fonctions de Green et des résultats qui en découlent, il est important de discuter du rôle que jouent celles-ci en physique de la matière condensée. D'abord, on définit la fonction de Green associée à un Hamiltonian  $H$  par

$$G = (E - H)^{-1}. \quad (4.1.1)$$

Les fonctions de Green résolvent l'équation de Schrödinger à laquelle on ajoute une source,

$$(E - H)G = \mathbf{1}, \quad (4.1.2)$$

où le terme de droite est la matrice unité de même dimension que l'Hamiltonian du système (c'est la source). On peut réécrire la fonction de Green sous la forme

$$G(\lambda) = \sum_n \frac{|\phi_n\rangle \langle \phi_n|}{\lambda - \lambda_n}, \quad (4.1.3)$$

où  $|\phi_n\rangle$  sont les vecteurs propres de  $H$ , et  $\lambda_n$  les valeurs propres associées à ceux-ci. Une quantité de grande importance dans cette branche de la physique est la densité d'états, qui indique, pour un système donné, le nombre d'états disponibles par unité d'énergie. Il s'avère que cette quantité est particulièrement directe à calculer à l'aide des fonctions de Green. Par

définition, la densité d'états s'écrit  $\mathcal{N}(\lambda) = \sum_n \delta(\lambda - \lambda_n)$ . Montrons que [26]

$$\mathcal{N}(\lambda) = \mp \frac{1}{\pi} \Im \left\{ \text{Tr } G^\pm(\lambda) \right\}, \quad (4.1.4)$$

où  $G^\pm(\lambda) = \lim_{s \rightarrow 0^+} G(\lambda \pm is)$ :

$$\begin{aligned} & \mp \frac{1}{\pi} \Im \left\{ \text{Tr } G^\pm(\lambda) \right\} \\ &= \mp \frac{1}{\pi} \Im \left\{ \text{Tr} \lim_{s \rightarrow 0^+} \sum_n \frac{|\phi_n\rangle \langle \phi_n|}{\lambda - (\lambda_n \pm is)} \right\} \\ &= \mp \frac{1}{\pi} \Im \left\{ \text{Tr} \sum_n \lim_{s \rightarrow 0^+} \frac{|\phi_n\rangle \langle \phi_n|}{(\lambda - \lambda_n) \mp is} \right\}. \end{aligned}$$

En utilisant l'identité

$$\lim_{y \rightarrow 0^+} \frac{1}{x \pm iy} = \mathcal{P}\left(\frac{1}{x}\right) \mp i\pi\delta(x), \quad (4.1.5)$$

l'expression devient

$$\begin{aligned} & \mp \frac{1}{\pi} \Im \left\{ \sum_{l,n} \langle \phi_l | \phi_n \rangle \langle \phi_n | \phi_l \rangle \left( \mathcal{P}\left(\frac{1}{\lambda - \lambda_n}\right) \mp i\pi\delta(\lambda - \lambda_n) \right) \right\} \\ &= \mp \frac{1}{\pi} \Im \left\{ \sum_n \left( \mathcal{P}\left(\frac{1}{\lambda - \lambda_n}\right) \mp i\pi\delta(\lambda - \lambda_n) \right) \right\} \\ &= \sum_n \delta(\lambda - \lambda_n) \\ &= \mathcal{N}(\lambda). \end{aligned}$$

ce qu'il fallait démontrer. De la deuxième à la troisième ligne de ce dernier calcul, on utilise le fait que la valeur principale de Cauchy  $\mathcal{P}$  de  $1/(\lambda - \lambda_n)$  est un nombre réel. On déduit de cette expression que

$$|\psi_i(\lambda)|^2 \propto \Im \{ G_{i,i}^\pm(\lambda) \}, \quad (4.1.6)$$

où  $\psi(\lambda)$  représente le vecteur propre associé à la valeur propre  $\lambda$ ,  $\Im \{ G_{i,i}^\pm(\lambda) \}$  la densité d'états locale (LDOS<sup>1</sup>) et  $i$  le  $i^{\text{ème}}$  site du système. Ainsi, il y existe une correspondance entre les fonctions de Green d'un Hamiltonien et les vecteurs propres de ce dernier. Nous allons utiliser celle-ci dans ce qui suit.

## 4.2. Obtention d'une expression pour les éléments diagonaux de la fonction de Green

Dans cette section, nous nous intéressons à calculer les éléments diagonaux de la fonction de Green associée à l'Hamiltonien du système effectif donné par (3.1.29) [27]. Par définition,

<sup>1</sup> De l'anglais «local density of states».

cette fonction de Green respecte l'équation

$$(E - H_{\text{SSH}}^{\text{eff}}) \cdot G_{\text{SSH}}^{\text{eff}} = \mathbf{1}. \quad (4.2.1)$$

Dénotons la  $n^{\text{e}}$  colonne de  $G_{\text{SSH}}^{\text{eff}}$  par  $g_n$ , de sorte que cette colonne respecte l'équation

$$(E - H_{\text{SSH}}^{\text{eff}}) \cdot g_n = (0, 0, \dots, 0, \underbrace{1}_{n^{\text{e}} \text{ composante}}, 0, \dots, 0)^T. \quad (4.2.2)$$

Nous allons voir dans ce qui suit que  $g_n$  prend quatre formes différentes, dépendamment de la parité du nombre total de sites du système, et de la parité du site  $n$ . Aussi, comme nous l'avons déjà mentionné, nous nous intéresserons seulement aux termes diagonaux, c'est-à-dire aux termes  $g_{n,n}$ . Nous pouvons réutiliser le Théorème 1.1.1 pour déterminer un ansatz pour le système.

### 4.2.1. Cas 1: $N$ impair, $n$ impair

L'ansatz pour  $g_n$  est, dans ce cas-ci,

$$g_n = \begin{pmatrix} g_{1,n} \\ g_{2,n} \\ g_{3,n} \\ g_{4,n} \\ \vdots \\ g_{n-2,n} \\ g_{n-1,n} \\ g_{n,n} \\ g_{n+1,n} \\ g_{n+2,n} \\ \vdots \\ g_{N-1,n} \\ g_{N,n} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{-i\phi} \\ \pm e^{i\phi} \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} e^{-i\phi} \\ \pm e^{i\phi} \end{pmatrix} e^{2ik} \\ \vdots \\ \begin{pmatrix} e^{-i\phi} \\ \pm e^{i\phi} \end{pmatrix} e^{i(n-3)k} \end{pmatrix} C_+ + \begin{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{i\phi} \\ \pm e^{-i\phi} \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} e^{i\phi} \\ \pm e^{-i\phi} \end{pmatrix} e^{-2ik} \\ \vdots \\ \begin{pmatrix} e^{i\phi} \\ \pm e^{-i\phi} \end{pmatrix} e^{-i(n-3)k} \end{pmatrix} C_- \cdot \quad (4.2.3)$$

**Explication:** Il est utile de définir le vecteur colonne  $g_n$  par blocs, de sorte que chacun des deux blocs (un incluant les sites 1 à  $n - 1$ , l'autre les sites  $n + 1$  à  $N$ ) respecte l'énoncé du Théorème 1.1.1 et est donc une solution de l'Hamiltonien de SSH. Par conséquent, nous pouvons utiliser l'ansatz qui découle de ce théorème, et utiliser les deux conditions frontières associées à chaque bloc pour en déterminer les coefficients inconnus ( $C_{\pm}$  pour le premier bloc,  $D_{\pm}$  pour le deuxième bloc). Notons qu'une cinquième équation frontière découle de la condition frontière qui relie les deux blocs. C'est précisément grâce à cette cinquième

équation qu'il est possible de déterminer  $g_{n,n}$ . Les équations frontières à résoudre sont donc:

$$(E - \Sigma_\infty)g_{1,n} - t_1g_{2,n} = 0, \quad (4.2.4)$$

$$-t_1g_{n-2,n} + Eg_{n-1,n} - t_2g_{n,n} = 0, \quad (4.2.5)$$

$$-t_2g_{n-1,n} + Eg_{n,n} - t_1g_{n+1} = 1, \quad (4.2.6)$$

$$-t_1g_{n,n} + Eg_{n+1,n} - t_2g_{n+2,n} = 0, \quad (4.2.7)$$

$$-t_2g_{N-1,n} + (E - \Sigma_\infty)g_{N,n} = 0. \quad (4.2.8)$$

Il s'avère que les équations frontières (4.2.4) et (4.2.5) donnent des expressions pour les  $C_\pm$  alors que les équations frontières (4.2.7) et (4.2.8) donnent des expressions pour  $D_\pm$ :

$$\begin{pmatrix} C_+ \\ C_- \end{pmatrix} = \frac{iEA_0}{t_2(t_1S_{n+1} + t_2S_{n-1}) - E\Sigma_\infty S_{n-1}} \begin{pmatrix} -e^{-i\phi}(\pm t_2e^{2ik} - \Sigma_\infty 2^{2i\phi}) \\ e^{i\phi}(\pm t_2e^{-2ik} - \Sigma_\infty e^{-2i\phi}) \end{pmatrix}, \quad (4.2.9)$$

$$\begin{pmatrix} D_+ \\ D_- \end{pmatrix} = \frac{iEA_0}{(t_1^2 - \Sigma_\infty E)S_{N-n} + t_1t_2S_{N-n+2}} \begin{pmatrix} e^{-i\phi}e^{-i(N-1)k}(\pm t_1 - \Sigma_\infty e^{2i\phi}) \\ -e^{i\phi}e^{i(N-1)k}(\pm t_1 - \Sigma_\infty e^{-2i\phi}) \end{pmatrix}. \quad (4.2.10)$$

En insérant ces résultats dans l'équation (4.2.6), il suffit d'isoler  $2A_0 = g_{n,n}$  pour obtenir que

$$\begin{aligned} g_{n,n} = & \left( E + t_2 \left( \frac{t_1 \Sigma_\infty S_{n-3} + t_2 (\Sigma_\infty - E) S_{n-1}}{t_1 t_2 S_{n+1} + (t_2^2 - E \Sigma_\infty) S_{n-1}} \right) \right. \\ & \left. + t_1 \left( \frac{t_2 \Sigma_\infty S_{N-n-2} + t_1 (\Sigma_\infty - E) S_{N-n}}{(t_1^2 - E \Sigma_\infty) S_{N-n} + t_1 t_2 S_{N-n+2}} \right) \right)^{-1}. \end{aligned} \quad (4.2.11)$$

### 4.2.2. Cas 2: $N$ impair, $n$ pair

Dans ce cas, l'ansatz pour  $g_n$  est

$$g_n = \begin{pmatrix} g_{1,n} \\ g_{2,n} \\ g_{3,n} \\ g_{4,n} \\ \vdots \\ g_{n-2,n} \\ g_{n-1,n} \\ g_{n,n} \\ g_{n+1,n} \\ g_{n+2,n} \\ \vdots \\ g_{N-1,n} \\ g_{N,n} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{-i\phi} \\ \pm e^{i\phi} \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} e^{-i\phi} \\ \pm e^{i\phi} \end{pmatrix} e^{2ik} \\ \vdots \\ \pm e^{i\phi} e^{i(n-4)k} \\ e^{-i\phi} e^{i(n-2)k} \end{pmatrix} C_+ + \begin{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{i\phi} \\ \pm e^{-i\phi} \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} e^{i\phi} \\ \pm e^{-i\phi} \end{pmatrix} e^{-2ik} \\ \vdots \\ \pm e^{-i\phi} e^{-i(n-4)k} \\ e^{i\phi} e^{-i(n-2)k} \end{pmatrix} C_+ \\ A_0 \\ \begin{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{-i\phi} \\ \pm e^{i\phi} \end{pmatrix} e^{ink} \\ \vdots \\ \pm e^{i\phi} e^{i(N-3)k} \\ e^{-i\phi} e^{i(N-1)k} \end{pmatrix} D_+ + \begin{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{i\phi} \\ \pm e^{-i\phi} \end{pmatrix} e^{-ink} \\ \vdots \\ \pm e^{-i\phi} e^{-i(N-3)k} \\ e^{i\phi} e^{-i(N-1)k} \end{pmatrix} D_+ \end{pmatrix}. \quad (4.2.12)$$

Les équations frontières à résoudre sont inchangées par rapport aux équations du cas précédent, à l'exception des trois équations centrales, qui deviennent

$$-t_2 g_{n-2,n} + E g_{n-1,n} - t_1 g_{n,n} = 0, \quad (4.2.13)$$

$$-t_1 g_{n-1,n} + E g_{n,n} - t_2 g_{n+1,n} = 1, \quad (4.2.14)$$

$$-t_2 g_{n,n} + E g_{n+1,n} - t_1 g_{n+2,n} = 0. \quad (4.2.15)$$

Dans ce cas, les  $C_{\pm}$  sont obtenus des équations (4.2.4) et (4.2.13), alors que les  $D_{\pm}$  sont obtenus des équations (4.2.8) et (4.2.15):

$$\begin{pmatrix} C_+ \\ C_- \end{pmatrix} = \frac{iEA_0}{t_2 S_n (\Sigma_{\infty} - E) + \Sigma_{\infty} t_1 S_{n-2}} \begin{pmatrix} e^{-i\phi} (\pm t_2 e^{2ik} - \Sigma_{\infty} e^{2i\phi}) \\ -e^{i\phi} (\pm t_2 e^{-2ik} - \Sigma_{\infty} e^{-2i\phi}) \end{pmatrix}, \quad (4.2.16)$$

$$\begin{pmatrix} D_+ \\ D_- \end{pmatrix} = \frac{iEA_0}{t_1 (E - \Sigma_{\infty}) S_{N-n+1} - \Sigma_{\infty} t_2 S_{N-n-1}} \begin{pmatrix} e^{-i\phi} e^{-i(N-1)k} (\pm t_1 - \Sigma_{\infty} e^{2i\phi}) \\ -e^{i\phi} e^{i(N-1)k} (\pm t_1 - \Sigma_{\infty} e^{-2i\phi}) \end{pmatrix}. \quad (4.2.17)$$

En insérant ces expressions dans l'équation (4.2.14), les éléments sur la diagonale de la fonction de Green sont donnés par

$$g_{nn} = \left( E + t_1 \left( \frac{(t_2^2 - E\Sigma_{\infty})S_{n-2} + t_1 t_2 S_n}{t_2 (\Sigma_{\infty} - E) S_n + t_1 \Sigma_{\infty} S_{n-2}} \right) + t_2 \left( \frac{(t_1^2 - E\Sigma_{\infty})S_{N-n-1} + t_1 t_2 S_{N-n+1}}{t_1 (\Sigma_{\infty} - E) S_{N-n+1} + t_2 \Sigma_{\infty} S_{N-n-1}} \right) \right)^{-1}. \quad (4.2.18)$$

### 4.2.3. Cas 3: $N$ pair, $n$ impair

Dans ce cas, l'ansatz pour  $g_n$  utilisé dans le cas 1 peut être réutilisé, à l'exception des derniers termes de ce dernier (dû au changement de la parité de  $N$ ), qui sont désormais donnés par

$$\begin{pmatrix} g_{N-1,n} \\ g_{N,n} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{-i\phi} \\ \pm e^{i\phi} \end{pmatrix} e^{i(N-2)k} D_+ + \begin{pmatrix} e^{i\phi} \\ \pm e^{-i\phi} \end{pmatrix} e^{-i(N-2)k} D_-. \quad (4.2.19)$$

Comme la seule différence entre ce cas et le cas 1 est liée à la dernière condition frontière, les  $C_{\pm}$  sont inchangés, alors que les  $D_{\pm}$  peuvent maintenant s'obtenir de l'équation (4.2.7) et de

$$-t_1 g_{N-1,n} + (E - \Sigma_{\infty}) g_{N,n} = 0. \quad (4.2.20)$$

Ces équations mènent à l'expression pour les  $D_{\pm}$ :

$$\begin{pmatrix} D_+ \\ D_- \end{pmatrix} = \frac{iEA_0}{t_2(E - \Sigma_{\infty})S_{N-n+1} - t_1\Sigma_{\infty}S_{N-n-1}} \begin{pmatrix} e^{i\phi}(t_2e^{-2ik} \mp \Sigma_{\infty}e^{-2i\phi})e^{-i(N-2)k} \\ -e^{-i\phi}(t_2e^{2ik} \mp \Sigma_{\infty}e^{2i\phi})e^{i(N-2)k} \end{pmatrix}. \quad (4.2.21)$$

En insérant ces deux résultats dans l'équation (4.2.6), il s'avère que  $g_{n,n}$  est donnée par

$$\begin{aligned} g_{n,n} = & \left( E + t_2 \left( \frac{t_1\Sigma_{\infty}S_{n-3} + t_2(\Sigma_{\infty} - E)S_{n-1}}{t_1t_2S_{n+1} + (t_2^2 - E\Sigma_{\infty})S_{n-1}} \right) \right. \\ & \left. + t_1 \left( \frac{(t_2^2 - E\Sigma_{\infty})S_{N-n-1} + t_1t_2S_{N-n+1}}{t_2(\Sigma_{\infty} - E)S_{N-n+1} + t_1\Sigma_{\infty}S_{N-n-1}} \right) \right)^{-1}. \end{aligned} \quad (4.2.22)$$

### 4.2.4. Cas 4: $N$ pair, $n$ pair

Dans ce cas, l'ansatz du cas 2 peut être réutilisé, à l'exception que, encore une fois, les derniers termes sont donnés par l'expression (4.2.19). Les équations frontières à résoudre sont les mêmes que celles du cas 2, à l'exception de la dernière, qui est donnée par (4.2.20). Ainsi, les  $C_{\pm}$  sont les mêmes que dans le cas 2, alors que les  $D_{\pm}$  sont maintenant donnés par

$$\begin{pmatrix} D_+ \\ D_- \end{pmatrix} = \frac{iEA_0}{(t_2^2 - \Sigma_{\infty}E)S_{N-n} + t_1t_2S_{N-n+2}} \begin{pmatrix} e^{i\phi}(t_2e^{-2ik} \mp \Sigma_{\infty}e^{-2i\phi})e^{-i(N-2)k} \\ -ie^{-i\phi}(t_2e^{2ik} \mp \Sigma_{\infty}e^{2i\phi})e^{i(N-2)k} \end{pmatrix}. \quad (4.2.23)$$

En insérant le tout dans l'équation (4.2.14), les éléments diagonaux de la fonction de Green sont donnés par

$$\begin{aligned} g_{n,n} = & \left( E + t_1 \left( \frac{(t_2^2 - E\Sigma_{\infty})S_{n-2} + t_1t_2S_n}{t_2(\Sigma_{\infty} - E)S_n + t_1\Sigma_{\infty}S_{n-2}} \right) \right. \\ & \left. + t_2 \left( \frac{t_1\Sigma_{\infty}S_{N-n-2} + t_2(\Sigma_{\infty} - E)S_{N-n}}{(t_2^2 - E\Sigma_{\infty})S_{N-n} + t_1t_2S_{N-n+2}} \right) \right)^{-1}. \end{aligned} \quad (4.2.24)$$

### 4.2.5. Résumé des quatre cas étudiés

Ainsi, au total, 4 expressions ont été obtenues pour les termes diagonaux  $g_{n,n}$  de la fonction de Green, tout dépendant de la parité du site et de la parité de la longueur de la chaîne:

$$g_{n,n} = \begin{cases} \left( E - t_2 \left( \frac{t_1 \Sigma_\infty S_{n-3} - t_2 (E - \Sigma_\infty) S_{n-1}}{(E \Sigma_\infty - t_2^2) S_{n-1} - t_1 t_2 S_{n+1}} \right) - t_1 \left( \frac{t_2 \Sigma_\infty S_{N-n-2} - t_1 (E - \Sigma_\infty) S_{N-n}}{(E \Sigma_\infty - t_1^2) S_{N-n} - t_1 t_2 S_{N-n+2}} \right) \right)^{-1} & \text{cas 1,} \\ \left( E + t_1 \left( \frac{(t_2^2 - E \Sigma_\infty) S_{n-2} + t_1 t_2 S_n}{t_1 \Sigma_\infty S_{n-2} - t_2 (E - \Sigma_\infty) S_n} \right) + t_2 \left( \frac{(t_1^2 - E \Sigma_\infty) S_{N-n-1} + t_1 t_2 S_{N-n+1}}{t_2 \Sigma_\infty S_{N-n-1} - t_1 (E - \Sigma_\infty) S_{N-n+1}} \right) \right)^{-1} & \text{cas 2,} \\ \left( E - t_2 \left( \frac{t_1 \Sigma_\infty S_{n-3} - t_2 (E - \Sigma_\infty) S_{n-1}}{(E \Sigma_\infty - t_2^2) S_{n-1} - t_1 t_2 S_{n+1}} \right) + t_1 \left( \frac{(t_2^2 - E \Sigma_\infty) S_{N-n-1} + t_1 t_2 S_{N-n+1}}{t_1 \Sigma_\infty S_{N-n-1} - t_2 (E - \Sigma_\infty) S_{N-n+1}} \right) \right)^{-1} & \text{cas 3,} \\ \left( E + t_1 \left( \frac{(t_2^2 - E \Sigma_\infty) S_{n-2} + t_1 t_2 S_n}{t_1 \Sigma_\infty S_{n-2} - t_2 (E - \Sigma_\infty) S_n} \right) - t_2 \left( \frac{t_1 \Sigma_\infty S_{N-n-2} - t_2 (E - \Sigma_\infty) S_{N-n}}{(E \Sigma_\infty - t_2^2) S_{N-n} - t_1 t_2 S_{N-n+2}} \right) \right)^{-1} & \text{cas 4.} \end{cases} \quad (4.2.25)$$

## 4.3. Étude de la densité d'états locale pour le système effectif

La fonction de Green, en plus de donner l'amplitude carrée des fonctions d'onde à une constante près, donne le poids relié à chaque état. Pour le système ouvert à l'étude, le poids des états change avec  $t_L$ , et donc celle-ci nous permet de voir comment ce poids est affecté par l'environnement. C'est ce poids que nous allons étudier dans cette section, comme nous avons déjà étudié la forme des fonctions d'onde dans les chapitres précédents. On note que ce sont les solutions d'énergie  $|\Re(E)| < 2$  qui sont intéressantes à étudier, car, comme nous l'avons vu dans le chapitre précédent, ce sont les états associés à celles-ci qui ont un taux de fuite non nul vers les leads. En particulier, nous allons nous concentrer sur les états à énergie nulle.

### 4.3.1. Cas $N$ pair

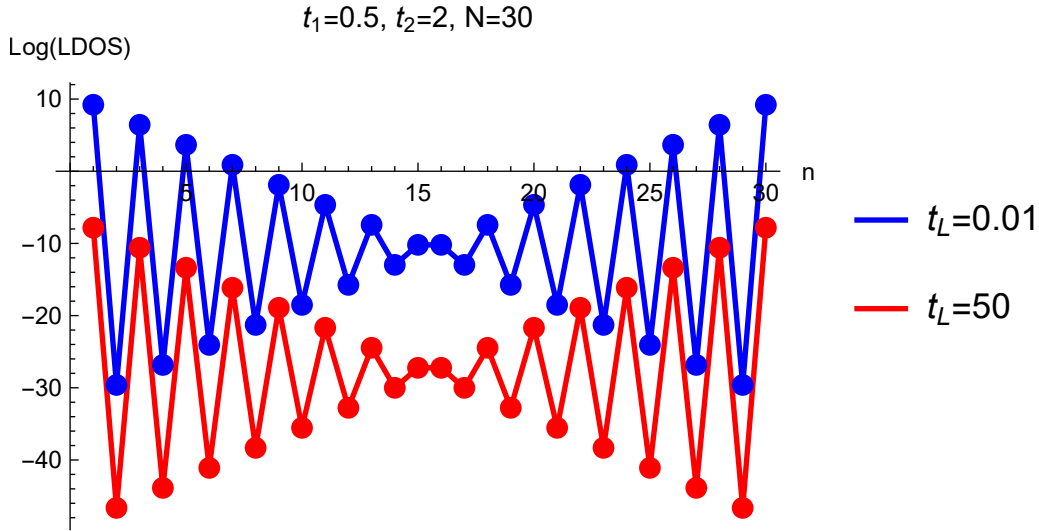
Pour  $E = 0$ , on peut montrer numériquement que si  $r < 1$ , pour les cas 3 et 4 de (4.2.25), le terme entre parenthèses multiplié par  $t_2$  est beaucoup plus grand que le terme entre parenthèses multiplié par  $t_1$ . Aussi, on peut montrer que si  $r > 1$ , le terme entre parenthèses

multiplié par  $t_1$  est beaucoup plus grand que le terme entre parenthèses multiplié par  $t_2$ . Ainsi, on peut faire l'approximation que, pour tout  $n$ ,

$$-\Im(g_{n,n}) \propto \begin{cases} \frac{1}{t_L^2} & \text{si } r < 1, \\ t_L^2 & \text{si } r > 1. \end{cases} \quad (4.3.1)$$

Nous avons déjà vu au Chapitre 2 que si  $r < 1$ , les états d'énergie nulle sont des états de surface, alors que si  $r > 1$ , les états d'énergie nulle sont des états fantômes.

Pour cette première configuration ( $r < 1$ ), l'expression (4.3.1) montre que les états de surface ont une très grande densité d'états locale pour  $t_L$  près de zéro, et que cette densité d'états locale diminue rapidement quand  $t_L$  augmente. Ceci est cohérent avec notre interprétation du système dans les limites  $t_L \ll 1$  et  $t_L \gg 1$ . Dans la première limite, on peut voir le système comme étant essentiellement isolé par rapport à l'extérieur, ce qui implique que les états de surface ont une énergie qui est très près d'être une singularité de la fonction de Green, d'où le fait que la densité d'états locale soit grande. Dans la deuxième limite, la chaîne de SSH est de longueur  $N - 2$  (elle a perdu deux sites aux frontières), et donc ses états sont restreints aux sites 2 à  $N - 1$ : la densité d'états locale des états de surface est ainsi très près de zéro. On présente ces résultats à la Figure 4.1.

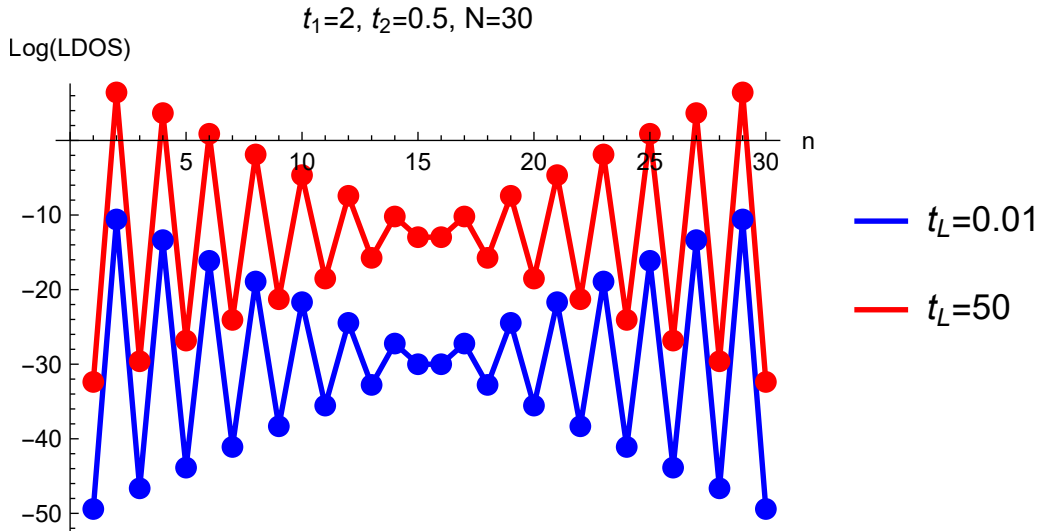


**Fig. 4.1.** Graphe du logarithme de la densité d'états locale associée à l'énergie zéro pour  $r = 1/4$  et différentes valeurs de  $t_L$ . Comme  $r < 1$ , il n'est pas possible d'observer des états fantômes: les états d'énergie nulle se retrouvent uniquement sous la forme d'états de surface. Pour  $t_L = 0.01$ , on observe un état de surface avec une très haute densité d'états locale. Puis, pour  $t_L = 50$ , on observe ce même état, mais avec une densité d'états locale très faible. Ceci est une preuve graphique de ce que nous avons dit plus haut: les états de surface ont une très grande densité d'états locale pour  $t_L$  près de zéro, et une très petite densité d'états locale pour  $t_L$  grand.



Pour la deuxième configuration ( $r > 1$ ), cette expression montre que pour  $t_L \ll 1$ , les états fantômes ont une très petite densité d'états locale, et que celle-ci croît rapidement lorsque  $t_L$  croît. Ceci n'est pas surprenant: dans la limite  $t_L \rightarrow 0$ , les états fantômes n'existent pas (c'est la chaîne de SSH isolée): c'est donc cohérent que leur densité d'états locale soit nulle. Dans la limite  $t_L \rightarrow \infty$ , ces états sont des états propres du système (on peut les voir comme étant des états de surface d'un système de longueur  $N - 2$  isolé), et c'est donc normal que l'énergie associée à ceux-ci soit une singularité de la fonction de Green. On observe ce comportement à la Figure 4.2.

Pour des états de basse énergie non nulle, on peut vérifier numériquement qu'un comportement similaire est observé, c'est-à-dire que les états de surface ont une densité d'états locale à peu près proportionnelle à  $1/t_L^2$ , et que les états fantômes ont une densité d'états locale à peu près proportionnelle à  $t_L^2$ .



**Fig. 4.2.** Graphe du logarithme de la densité d'états locale associée à l'énergie zéro pour  $r = 4$  et différentes valeurs de  $t_L$ . Pour  $t_L = 0.01$ , on observe un état fantôme avec une très faible densité d'états locale. Pour un grand  $t_L$ , on observe le même état, mais cette fois-ci avec une très grande densité d'états locale.

### 4.3.2. Cas $N$ impair

Dans ce cas, pour  $E = 0$ , on peut montrer que,  $\forall r$ ,

$$-\Im(g_{n,n}) \propto \begin{cases} \frac{1}{t_L^2} & \text{si } n \text{ est impair,} \\ t_L^2 & \text{si } n \text{ est pair.} \end{cases} \quad (4.3.2)$$

Dans le Chapitre 2, nous avons montré que si  $r < 1$ , la solution du système est donnée par la combinaison d'un état de surface à gauche et d'un état fantôme à droite, et que si  $r > 1$ ,

la solution est une combinaison d'un état de surface à droite et d'un état fantôme à gauche (voir Figure 4.3).

Pour  $t_L$  petit, les composantes impaires dominent les composantes paires, et donc le poids de l'état de surface ( $\propto 1/t_L^2$ ) domine le poids de l'état fantôme ( $\propto t_L^2$ ), que ceux-ci soient localisés à gauche ou à droite. Ceci est cohérent: dans la limite où  $t_L \rightarrow 0$ , on observe que des états de surface, qui sont localisés à gauche si  $r < 1$  et à droite si  $r > 1$ . Ceci dit, pour un grand  $t_L$ , le cas contraire se présente: l'état fantôme a un poids qui domine celui de l'état de surface, qui est très petit. Ceci, encore une fois, est cohérent avec l'interprétation du système que l'on fait dans la limite  $t_L \rightarrow \infty$ , car dans cette limite, les états fantômes sont des vecteurs propres du système.

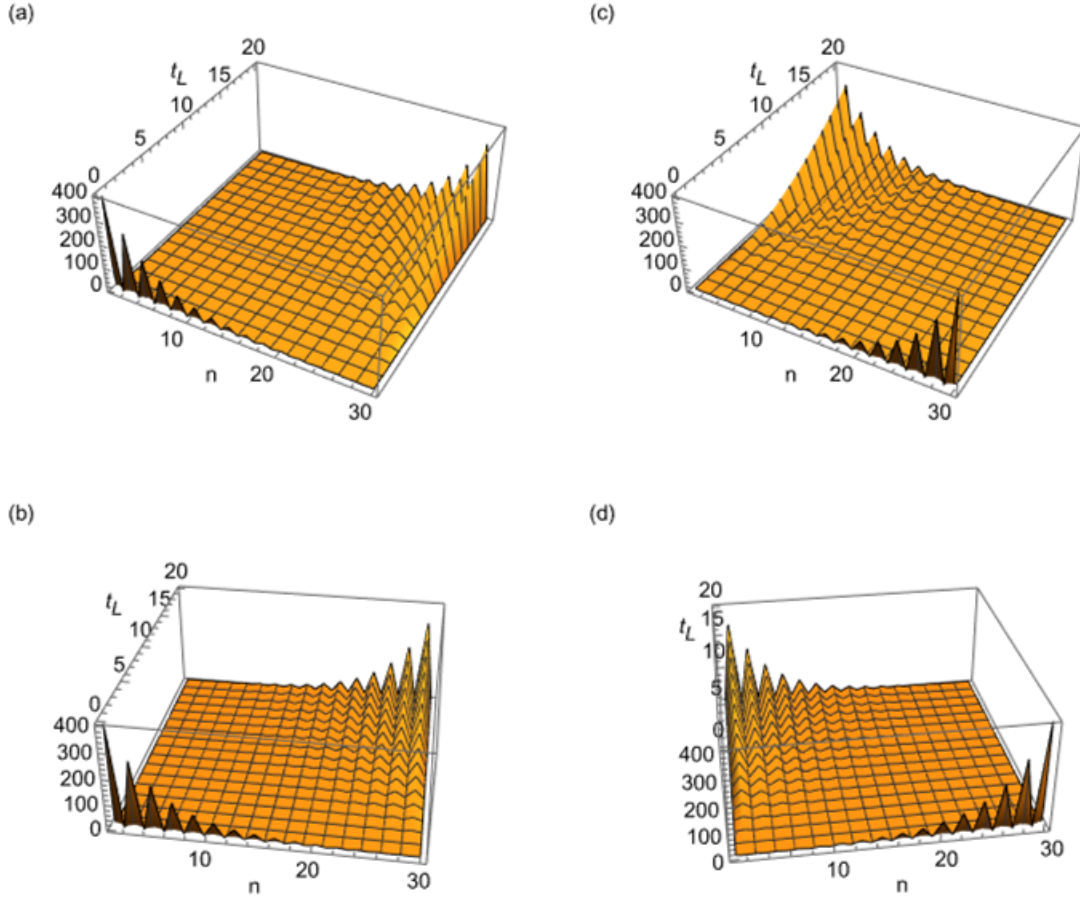
## 4.4. Analyse des résultats

Dans ce chapitre, une correspondance a été établie entre les fonctions de Green d'un Hamiltonien et les vecteurs propres de ce dernier. À l'aide de celle-ci, nous avons déterminé une manière d'évaluer le poids des états d'un système ouvert. Pour cette raison, nous avons calculé les éléments diagonaux de la fonction de Green du système effectif développé dans le chapitre précédent. Par conséquent, nous avons pu évaluer le poids des états de basse énergie de la chaîne de SSH couplée à un environnement. Les résultats sont résumés dans le Tableau 4.1.

Caractérisation des états de basse énergie (ÉBÉ) en fonction de la parité de $N$		
Parité de $N$	Type d'ÉBÉ	Poids des ÉBÉ en fonction de $t_L$
1. $N$ pair		
• $r < 1$	Dans ce cas dit topologique, on observe uniquement des états de surface.	Grand poids pour petit $t_L$ et petit poids pour grand $t_L$
• $r > 1$	Dans ce cas dit trivial, on observe uniquement des états fantômes.	Petit poids pour petit $t_L$ et grand poids pour grand $t_L$
2. $N$ impair		
• $\forall r$	États de surface et états fantômes	Le poids de l'état de surface domine pour petit $t_L$ , et le poids de l'état fantôme domine pour grand $t_L$ .

**Tableau 4.1.** Tableau présentant les principales différences entre les états de basse énergie d'un système pour lequel  $N$  est pair versus un système pour lequel  $N$  est impair, dans le cas où  $t_L$  est non nul.

Ces résultats concordent avec ceux des chapitres précédents. En particulier, ils nous permettent de mieux comprendre le phénomène de transition de phase topologique qui est



**Fig. 4.3.** Graphe du logarithme de la densité d'états locale associée à l'énergie nulle pour le cas  $N$  impair en fonction des sites  $n$  de la chaîne de SSH et du couplage entre les composantes du système tripartite,  $t_L$ . On observe la transition des états de surface vers des états fantômes au fur et à mesure que  $t_L$  augmente. Pour  $t_L < 1$ , les états de surface ont une amplitude beaucoup plus grande que celle des états fantômes. Ceci dit, passé ce point critique, les rôles commencent à s'inverser: la densité d'états locale pour l'état de surface diminue, alors que celle de l'état fantôme augmente. Pour  $t_L$  suffisamment grand, l'amplitude des états de surface est négligeable par rapport à celle des états fantômes. (a) et (b): les paramètres du système sont  $\{t_1, t_2, N\} = \{0.9, 1.1, 31\}$ , et donc on s'attend à avoir un état de surface à gauche dominant pour petit  $t_L$ , et un état fantôme à droite dominant pour grand  $t_L$ . (c) et (d): les paramètres du système sont  $\{t_1, t_2, N\} = \{1.1, 0.9, 31\}$ , et donc, dans ce cas, on s'attend à avoir un état de surface à droite dominant pour petit  $t_L$ , et un état fantôme à gauche dominant pour grand  $t_L$ .

observé pour le cas  $N$  pair. À l'aide des expressions obtenues pour le poids des états de basse énergie, il est possible de quantifier le phénomène de dissipation des états de surface, et le

phénomène d'émergence des états fantômes. Ceci nous permet donc de mieux comprendre ce qui se passe dans le domaine de  $t_L$  où la topologie du système n'est pas bien définie.

# Chapitre 5

---

## Conclusion

Dans ce mémoire, nous avons étudié le système tripartite composé d'une chaîne de SSH et de deux leads sous divers angles. En premier lieu, nous avons étudié chacune de ses composantes indépendamment. En particulier, nous avons démontré que la chaîne de SSH isolée possède des phases topologiques non triviales (si  $N$  est pair). Pour ce faire, nous avons montré que le nombre d'états de surface d'un tel système est un invariant topologique, c'est-à-dire un entier qui ne change pas sous une transformation adiabatique. Nous avons déterminé que la phase dans laquelle le système ne possède pas d'états de surface est triviale, alors que la phase dans laquelle le système possède deux états de surface est topologique. Nous avons démontré que le nombre d'enroulement est un autre invariant topologique, dont la valeur permet elle aussi de distinguer la phase triviale de la phase topologique. De plus, nous avons obtenu une équation transcendante pour les énergies de cette composante, nous permettant ainsi de déduire le spectre d'énergie du système pour un ensemble de paramètres donné. Enfin, nous avons obtenu une expression pour les fonctions d'onde de la chaîne de SSH ainsi que celles des leads.

En deuxième lieu, nous avons étudié le système tripartite en son entièreté. Dû au fait que ce système est de dimension infinie, certaines complications se sont ajoutées. Pour les états dont l'énergie est dans la bande des leads, nous avons montré, sans surprise, que le spectre d'énergie qui leur est associé est continu (et ce, comme le spectre des leads est continu). Ceci étant dit, nous avons tout de même pu obtenir une expression élégante pour les fonctions d'onde associées à ces états. Ensuite, nous avons porté notre attention aux états dont l'énergie est à l'extérieur de ce domaine. Pour de tels états, nous avons pu obtenir une équation transcendante pour l'énergie: ceci nous a permis de déduire le spectre d'énergie du système. À l'aide de ce spectre, nous avons observé des états qui n'ont pas d'analogue pour le système de SSH isolé: les états de haute énergie. Ces états ont des énergies dont l'amplitude est supérieure à la borne supérieure du spectre d'énergie de la chaîne de SSH,  $t_1 + t_2$ , et ont un comportement similaire aux états de basse énergie: ils sont fortement

localisés sur les frontières de la chaîne de SSH. Enfin, nous avons étudié les états à énergie nulle. Nous y avons fait une découverte fascinante: les fonctions d'onde associées à ces états sont données par la combinaison linéaire des états de surface de la chaîne de SSH isolée, ainsi que des états dits fantômes. Une propriété surprenante de ces derniers est qu'ils sont fortement localisés sur le deuxième et l'avant-dernier site de la chaîne de SSH. Nous avons noté qu'une vérification numérique permet de se convaincre que ces états fantômes peuvent aussi avoir une énergie non nulle.

En troisième lieu, nous avons étudié le système effectif qui découle du système tripartite: ceci nous a donc permis d'écrire l'Hamiltonien total sous la forme d'une matrice de dimension  $N \times N$  et, dans un deuxième temps, sous la forme d'une matrice de dimension  $(N - 2) \times (N - 2)$ . Nous avons utilisé ce premier Hamiltonien pour effectuer un contrôle de cohérence («consistency check»), et nous avons conclu que les solutions du système effectif et du système tripartite concordent pour des énergies à l'extérieur du spectre des leads. Ceci dit, pour des énergies à l'intérieur de ce spectre, nous avons pu remarquer que les résultats obtenus ne concordent pas exactement. Deux éléments clés distinguent ces deux systèmes: d'un côté, le système tripartite peut prendre toutes les énergies dans cet intervalle, et est donc continu et infini, alors que le système effectif a un spectre discret et complexe. D'un autre côté, nous avons montré que les fonctions d'onde du système effectif sont un cas particulier de celles du système tripartite. Ceci dit, nous nous sommes convaincus que ce premier élément distinctif était simplement un différent moyen d'illustrer le fait que le système en question est ouvert: la projection du spectre complexe sur l'axe des réels engendre un spectre continu, ce qui témoigne de ce fait. Ensuite, nous avons utilisé l'Hamiltonien  $(N - 2) \times (N - 2)$  pour discuter de la topologie du système tripartite dans la limite de fort couplage  $t_L$ . Nous avons fait la démonstration que dans cette limite, les sites 2 à  $N - 1$  de la chaîne de SSH peuvent être vus comme un système fermé. Ceci nous a donc permis de conclure qu'un changement de phase se produit lorsque l'on passe de la limite de faible couplage à la limite de grand couplage.

En quatrième lieu, nous avons évalué la densité d'états locale du système effectif. Pour ce faire, nous avons obtenu une expression analytique pour les éléments diagonaux de la fonction de Green associés à ce système. Une telle démarche nous a permis d'évaluer le poids des états à basse énergie en fonction du couplage  $t_L$ . Pour le cas dont la topologie est quantifiable (c'est-à-dire  $N$  pair), nous savions déjà, à l'aide du Chapitre 2, que pour  $r < 1$ , ces états prennent uniquement la forme d'états de surface «normaux», et que pour  $r > 1$ , ils prennent seulement la forme d'états fantômes. Pour ce premier choix de paramètres ( $r < 1$ ), nous avons montré que les états de surface ont un très grand poids pour un faible couplage, et un très petit poids pour un grand couplage: le poids est essentiellement proportionnel à  $1/t_L^2$ . Pour ce deuxième choix de paramètres ( $r > 1$ ), nous avons obtenu le résultat contraire,

c'est-à-dire que les états fantômes ont un très petit poids pour un faible couplage, et un très grand poids pour un grand couplage: le poids est essentiellement proportionnel à  $t_L^2$ .

Nous pouvons finalement réunir les résultats obtenus dans ces chapitres pour conclure sur le thème principal de ce mémoire: la topologie du système tripartite (pour  $N$  pair). Les points importants provenant des différents chapitres sont les suivants:

- Du premier, on présente comment quantifier la topologie d'un système fermé.
- Du deuxième, on observe que le système tripartite possède deux types d'états de basse énergie (un étant l'état de surface, l'autre l'état fantôme).
- Du troisième, on montre que dans la limite de grand couplage, le système tripartite peut être à nouveau vu comme étant fermé.
- Du quatrième, on montre comment le poids de ces états de basse énergie varie avec  $t_L$ .

En jumelant tous ces résultats, on peut en tirer la conclusion suivante. Pour  $t_L$  près de zéro, le système est dans une phase topologique donnée: il possède soit deux états de basse énergie (a), soit aucun (b). En augmentant  $t_L$ , la topologie du système n'est plus bien définie. Aussi, le système ne possède plus d'état propre de basse énergie, à strictement parler. Ceci dit, la densité d'états locale nous dit essentiellement à quel point ces états sont proches d'être des états propres du système. Pour (a), les états de surface initiaux sont donc de moins en moins, entre guillemets, des états propres du système quand  $t_L$  augmente, jusqu'à ce que leur densité d'états locale tende vers 0 quand  $t_L$  tend vers l'infini. Ainsi, dans cette limite, le système est maintenant dans sa phase opposée: il ne possède aucun état de surface. Cette phase est bien définie puisque dans cette limite, le système peut à nouveau être vu comme fermé (mais avec  $N - 2$  sites). Pour (b), les états fantômes sont, entre guillemets, de plus en plus des états propres du système quand  $t_L$  augmente, jusqu'à ce que leur densité d'états tende vers l'infini quand  $t_L$  tend vers l'infini. Ainsi, dans cette limite, le système est lui aussi dans sa phase opposée: il possède deux états de surface (c'est-à-dire les états fantômes du système de longueur  $N - 2$ ). Par conséquent, pour toute valeur de  $r$  initiale, le changement de faible à fort couplage engendre une transition de phase topologique.

La topologie du système est donc bien définie pour un faible et un fort couplage. Ceci dit, entre ces limites, nos résultats ne sont pas concluants. Une différente approche serait donc, dans un travail futur, nécessaire pour mieux comprendre ce qui se produit dans cette région.

Le champ d'études des systèmes ouverts/non-hermitiens est un domaine en pleine expansion, et plusieurs systèmes similaires à celui analysé dans ce mémoire ont récemment été étudiés. Par exemple, un groupe de chercheurs s'est intéressé à une chaîne de SSH à laquelle a été ajouté une alternance de gains et de pertes sur la diagonale principale, et ils ont réussi à y calculer un invariant topologique (une phase de Berry) [17]. Dans ce même article, une chaîne de SSH avec perte sur le premier site et gain sur le dernier a aussi été

étudiée. Par contre, aucun invariant n'a pu y être établi, dû à l'absence de périodicité (c'est un «non-Bloch Hamiltonian», de l'anglais). Le calcul d'invariants topologiques pour des systèmes non-hermitiens et «non-Bloch» n'est pas encore un élément bien compris et maîtrisé par la communauté de physiciens: les invariants topologiques calculés pour des systèmes fermés ne se généralisent pas bien vers des systèmes ouverts. Pour s'attaquer à ce problème, de nouvelles idées ont tout récemment été publiées dans la littérature [16, 28, 29, 30, 31, 32]. La continuation du projet présenté dans ce mémoire serait donc d'utiliser ces nouveaux développements afin de pouvoir quantifier la topologie du système tripartite, et ce, pour tout couplage entre les composantes du système.



## Références bibliographiques

---

- [1] R. E. Peierls. *Quantum Theory of Solids*. Oxford : Clarendon Press, 1955.
- [2] W. P. Su, J. R. Schrieffer, and A. J. Heeger. “Solitons in Polyacetylene”. In: *Phys. Rev. Lett.* 42 (25 June 1979), pp. 1698–1701. DOI: 10.1103/PhysRevLett.42.1698. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.42.1698>.
- [3] R. Rajaraman. *Solitons and Instantons: An Introduction to Solitons and Instantons in Quantum Field Theory*. North-Holland personal library. North-Holland Publishing Company, 1982. ISBN: 9780444862297. URL: <https://books.google.ca/books?id=1XucQgAACAAJ>.
- [4] B. R. Weinberger et al. “Magnetic susceptibility of doped polyacetylene”. In: *Phys. Rev. B* 20 (1 July 1979), pp. 223–230. DOI: 10.1103/PhysRevB.20.223. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.20.223>.
- [5] I. B. Goldberg et al. “Electron spin resonance of polyacetylene and AsF<sub>5</sub>-doped polyacetylene”. In: *The Journal of Chemical Physics* 70.3 (1979), pp. 1132–1136. DOI: 10.1063/1.437613. URL: <https://doi.org/10.1063/1.437613>.
- [6] A. Snow et al. “ESR study of polyacetylene”. In: *Journal of Polymer Science: Polymer Letters Edition* 17.5 (1979), pp. 263–267. DOI: <https://doi.org/10.1002/pol.1979.130170503>.
- [7] James C. W. Chien et al. “Polymerization of acetylene”. In: *Journal of Polymer Science: Polymer Letters Edition* 18.1 (1980), pp. 45–52. DOI: <https://doi.org/10.1002/pol.1980.130180109>.
- [8] Hideki Shirakawa, Takeo Ito, and Sakuji Ikeda. “Electrical properties of polyacetylene with various cis-trans compositions”. In: *Die Makromolekulare Chemie* 179.6 (1978), pp. 1565–1573. DOI: <https://doi.org/10.1002/macp.1978.021790615>.
- [9] C. K. Chiang et al. “Electrical Conductivity in Doped Polyacetylene”. In: *Phys. Rev. Lett.* 39 (17 Oct. 1977), pp. 1098–1101. DOI: 10.1103/PhysRevLett.39.1098. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.39.1098>.
- [10] W. P. Su, J. R. Schrieffer, and A. J. Heeger. “Soliton excitations in polyacetylene”. In: *Phys. Rev. B* 22 (4 Aug. 1980), pp. 2099–2111. DOI: 10.1103/PhysRevB.22.2099.

- [11] János K. Asbóth, László Oroszlány, and András Pályi. “A Short Course on Topological Insulators”. In: *Lecture Notes in Physics* (2016). ISSN: 1616-6361. DOI: 10.1007/978-3-319-25607-8. URL: <http://dx.doi.org/10.1007/978-3-319-25607-8>.
- [12] Meri Zaimi et al. “Detecting topological edge states with the dynamics of a qubit”. In: *Physics Letters A* 388 (2021), p. 127035. ISSN: 0375-9601. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.physleta.2020.127035>.
- [13] Joel Moore. “The birth of topological insulators”. In: *Nature* 464 (Mar. 2010), pp. 194–8. DOI: 10.1038/nature08916.
- [14] Dizhou Xie et al. “Topological characterizations of an extended Su–Schrieffer–Heeger model”. In: *npj Quantum Information* 5.1 (May 2019). ISSN: 2056-6387. DOI: 10.1038/s41534-019-0159-6. URL: <http://dx.doi.org/10.1038/s41534-019-0159-6>.
- [15] Savannah Garmon and Kenichi Noba. “Reservoir-assisted symmetry breaking and coalesced zero-energy modes in an open PT-symmetric Su-Schrieffer-Heeger model”. In: *Physical Review A* 104.6 (Dec. 2021). ISSN: 2469-9934. DOI: 10.1103/physreva.104.062215. URL: <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevA.104.062215>.
- [16] Anselmo Marques and Ricardo Dias. “Multihole edge states in Su-Schrieffer-Heeger chains with interactions”. In: *Physical Review B* 95 (Mar. 2017). DOI: 10.1103/PhysRevB.95.115443.
- [17] Felix Dangel et al. “Topological invariants in dissipative extensions of the Su-Schrieffer-Heeger model”. In: *Physical Review A* 98.1 (July 2018). ISSN: 2469-9934. DOI: 10.1103/physreva.98.013628. URL: <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevA.98.013628>.
- [18] Nicolas Delnour. “Topology, Quantum Dots, and Open Systems”. Mémoire M. Sc. Université de Montréal, 2021. URL: <http://hdl.handle.net/1866/26560>.
- [19] Hichem Eleuch, Michael Hilke, and Richard MacKenzie. “Probing Anderson localization using the dynamics of a qubit”. In: *Phys. Rev. A* 95 (6 June 2017), p. 062114. DOI: 10.1103/PhysRevA.95.062114. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.95.062114>.
- [20] N. W. Ashcroft and N. D. Mermin. *Solid State Physics*. Holt-Saunders, 1976.
- [21] Mildred S Dresselhaus, Gene Dresselhaus, and Ado Jorio. *Applications of group theory to the physics of solids*. Springer Berlin, 2008.
- [22] P. Delplace, D. Ullmo, and G. Montambaux. “Zak phase and the existence of edge states in graphene”. In: *Physical Review B* 84.19 (Nov. 2011). ISSN: 1550-235X. DOI: 10.1103/physrevb.84.195452. URL: <http://dx.doi.org/10.1103/PhysRevB.84.195452>.
- [23] Gene H. Golub and Charles F. Van Loan. *Matrix Computations (3rd Ed.)* USA: Johns Hopkins University Press, 1996. ISBN: 0801854148.
- [24] Supriyo Datta. *Quantum Transport: Atom to Transistor*. Cambridge University Press, 2005. DOI: 10.1017/CB09781139164313.

- [25] Jorge L. D’Amato and Horacio M. Pastawski. “Conductance of a disordered linear chain including inelastic scattering events”. In: *Phys. Rev. B* 41 (11 Apr. 1990), pp. 7411–7420. DOI: 10.1103/PhysRevB.41.7411. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevB.41.7411>.
- [26] E.N. Economou. *Green’s Functions in Quantum Physics*. Springer Series in Solid-State Sciences. Springer, 2006. ISBN: 9783540122661. URL: <https://books.google.ca/books?id=s0gsAAAAYAAJ>.
- [27] Nicolas Delnour et al. “Probing topological edge states via the decoherence dynamics of quantum dots”. En préparation.
- [28] B. Ostahie and A. Aldea. “Spectral analysis, chiral disorder and topological edge states manifestation in open non-Hermitian Su-Schrieffer-Heeger chains”. In: *Physics Letters A* 387 (2021), p. 127030. ISSN: 0375-9601. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.physleta.2020.127030>. URL: <https://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0375960120308975>.
- [29] Flore K. Kunst et al. “Biorthogonal Bulk-Boundary Correspondence in Non-Hermitian Systems”. In: *Phys. Rev. Lett.* 121 (2 July 2018), p. 026808. DOI: 10.1103/PhysRevLett.121.026808. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.121.026808>.
- [30] Daniel Leykam et al. “Edge Modes, Degeneracies, and Topological Numbers in Non-Hermitian Systems”. In: *Phys. Rev. Lett.* 118 (4 Jan. 2017), p. 040401. DOI: 10.1103/PhysRevLett.118.040401. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.118.040401>.
- [31] Ken-Ichiro Imura and Yositake Takane. “Generalized Bloch band theory for non-Hermitian bulk–boundary correspondence”. In: *Progress of Theoretical and Experimental Physics* 2020.12 (Sept. 2020). 12A103. ISSN: 2050-3911. DOI: 10.1093/ptep/ptaa100. eprint: <https://academic.oup.com/ptep/article-pdf/2020/12/12A103/35611802/ptaa100.pdf>. URL: <https://doi.org/10.1093/ptep/ptaa100>.
- [32] Kazuki Yokomizo and Shuichi Murakami. “Non-Bloch Band Theory of Non-Hermitian Systems”. In: *Phys. Rev. Lett.* 123 (6 Aug. 2019), p. 066404. DOI: 10.1103/PhysRevLett.123.066404. URL: <https://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.123.066404>.