

7. $\mathbb{Z}_2$ topologische Invarianten

Im der Minimalvariante des Kane-Mele Modells mit $\lambda_e = \lambda_i = 0$ hatten wir gesehen, daß die Chern Zahl $Ch = Ch_T + Ch_B = 0$ verschwindet aber die Differenz $|Ch_T - Ch_B| = 0, 2$ zwei Werte annehmen kann. Wir wollen hier diese $\mathbb{Z}_2$ topologische Invarianten verallgemeinern.

7.1 Kramers Doublet von Randmoden

betrachten TR invarianten topologischen Isolatoren mit offenen RIB parallel zur y-Achse $\Rightarrow$ Randmode

$\psi_1(x, k_y)$ 1-Teilchen Randmode mit Energie E_0 in Bandlücke

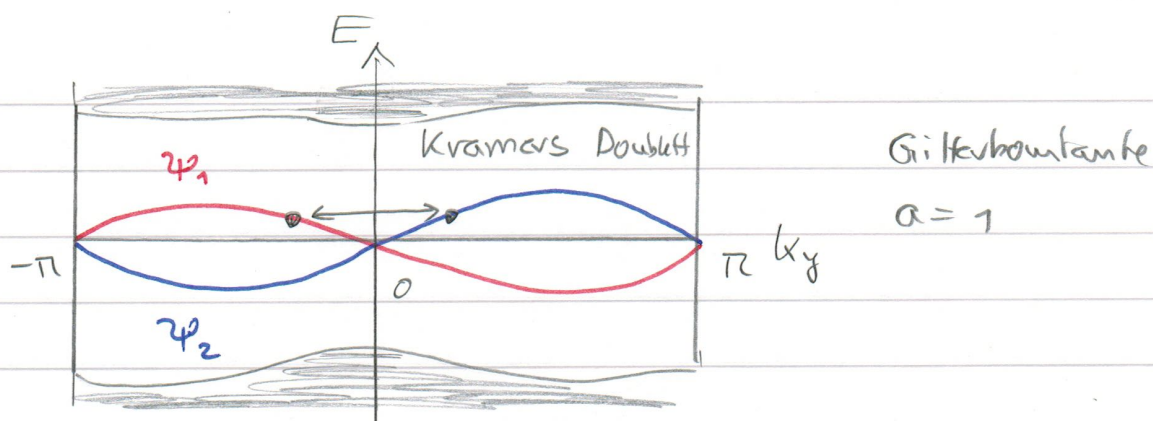
Kramers Theorem (S.66) $\Rightarrow$

$$(7.1) \quad \exists \quad \underline{\psi}_{-2}(x, k_y) \text{ mit } \underline{\psi}_{-2}(x, -k_y) = T \underline{\psi}_{-1}(x, k_y)$$

mit Energie $E = E_0$

Kramers Doublet von Randmoden

an den TR invarianten Punkten $k_y = (0, \pm\pi)$ liegt Entartung in Energie und Impuls vor.
(Gitterkonstante $a \equiv 1$)



Frage: Was passiert am Entartungspunkten $k_y = 0, \pm\pi$
Streuung von $\psi_1 \leftrightarrow \psi_2$?

Antwort: Nein!

Kopplung ist durch TR Invarianz verboten, solange H_{pert} TR invariant

Bew: Störung H_1

$$T = UK \quad T^2 = -1 \quad (\text{Fermion})$$

d.h. $U^T = -U$

$$\begin{aligned}
 \langle T\phi | T\psi \rangle &= \sum_{m,p,r} (U_{mp} K \phi_p)^* U_{mr} K \psi_r \\
 (7.2) \quad &= \sum_{m,p,r} U_{mp}^* \phi_p U_{mr} \psi_r^* = \\
 &= \sum_{m,p,r} \underbrace{U_{pm}^+ U_{mr}}_{\delta_{pr}} \psi_r^* \phi_p = \langle \psi | \phi \rangle
 \end{aligned}$$

Wählen $|T\psi\rangle = T|\psi\rangle = H_1|\phi\rangle$

$$T^2|\psi\rangle = -|\psi\rangle = T H_1|\phi\rangle = T H_1 T^{-1} T|\phi\rangle = H_2 T|\phi\rangle$$

$$\langle \psi | = -\langle T\phi | H_2 \quad \text{damit} \quad \langle \psi | H_1 = -\langle T\phi | H_2$$

$$\langle T\phi | H_1 |\phi\rangle = -\langle \psi | \phi \rangle = -\langle T\phi | T\psi \rangle = -\langle T\phi | H_2 |\phi\rangle$$

(7.3)

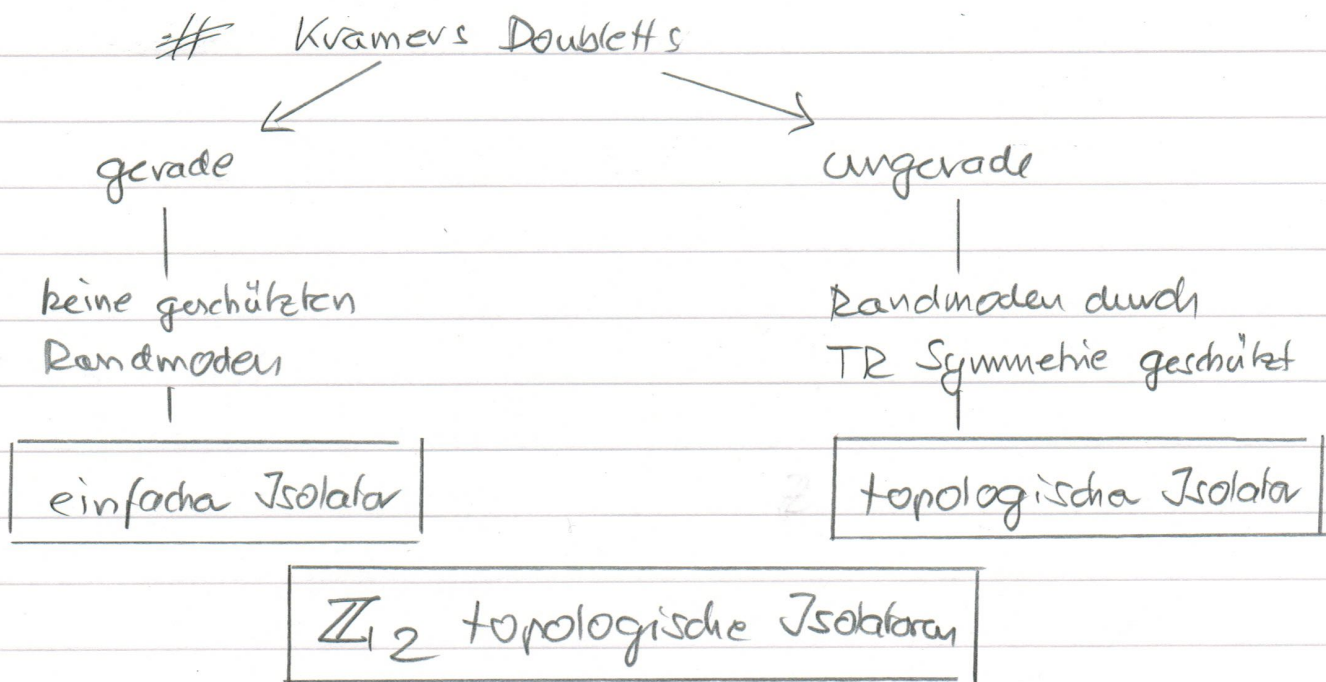
 $\Rightarrow$

$$\langle T\phi | H_n | \phi \rangle \equiv 0$$

 $\forall H_n$ mit

$$T H_n T^{-1} = H_n$$

Dies lässt sich auf mehrfache Kramers Doublets erweitern, wenn die Zahl der Doublets ungerade ist. Falls diese gerade ist, ist eine Kopplung möglich



7.2 $\mathbb{Z}_2$ Invariante: Nullstellen des Pfaffians

betrachten Matrix Elemente von T in der Eigenbasis des Hamiltonians (Bloch Zustände)

$$(7.4) \quad \langle u_i(\vec{k}) | T | u_j(\vec{k}) \rangle = M_{ij}(\vec{k})$$

$M_{ij}(\vec{k})$ ist antisymmetrisch

$$(7.5) \quad M_{ij}(\vec{k}) = -M_{ji}(\vec{k})$$

denn: $M_{ij}(\vec{k}) = \langle u_i(\vec{k}) | T | u_j(\vec{k}) \rangle \quad T = UK$

$$= u_i(\vec{k})^*_m U_{mn} u_j(\vec{k})^*_n$$

$$\left[\text{da } T^2 = -1 \quad U^T = -U \quad (U^\dagger = U^{-1}) \right]$$

$$= -u_i(\vec{k})^*_m U_{nm} u_j(\vec{k})^*_n$$

$$= -\langle u_j(\vec{k}) | T | u_i(\vec{k}) \rangle = -M_{ji}(\vec{k}) \quad \square$$

Definieren geraden und ungeraden Unterraum

$$\mathcal{H}_g \equiv \{ |u\rangle \}_{\text{gerade}}$$

$$\mathcal{H}_u \equiv \{ |u\rangle \}_{\text{ungerade}}$$

$$\boxed{T \mathcal{H}_g \hat{=} \mathcal{H}_g}$$

$$\boxed{T \mathcal{H}_u \perp \mathcal{H}_u}$$

Nun wollen wir eine Größe betrachten die zwischen Wellenfunktionen aus $\mathcal{H}_g$ und $\mathcal{H}_u$ unterscheiden kann

Pfaffian

$$(7.6) \quad \boxed{P(\vec{k}) = \text{Pf} [M_{jk}(\vec{k})]}$$

Einschub: Pfaffian einer antisymmetrischen Matrix

$$M_{jk} = -M_{kj} \quad n \times n \text{ Matrix}$$

$$\underline{n = 2m+1} \quad \boxed{\text{Pf}(\underline{M}) \equiv 0} \quad (7.7)$$

$\underline{n = 2m}$: Π Menge aller Partitionen von $(1, 2, \dots, 2m)$ in Paare; Anzahl ist $(2m-1)!!$

$$\alpha \in \Pi : \{ (i_1 j_1) (i_2 j_2) \dots (i_m j_m) \}$$

$$i_k < j_k \text{ und } i_1 < i_2 < i_3 < \dots$$

$$M_\alpha \equiv \text{sgn}(\alpha) M_{i_1 j_1} M_{i_2 j_2} \dots M_{i_m j_m}$$

$\text{sgn}(\alpha)$ ist Vorzeichen der Permutation

$$\begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & \dots & 2m \\ i_1 & j_1 & i_2 & j_2 & \dots & j_m \end{bmatrix}$$

$$\boxed{\text{Pf}(\underline{M}) \equiv \sum_{\alpha \in \Pi} M_\alpha} \quad (7.8)$$

Eigenschaften:

(7.9)

$$\text{Pf}(\underline{M}^2) = \text{Det}(\underline{M})$$

(7.10)

$$\text{Pf}(\underline{B} \underline{M} \underline{B}^T) = \text{Det}(\underline{B}) \text{Pf}(\underline{M})$$

$$(7.11) \quad \text{Pf}[\lambda \underline{M}] = \lambda^m \text{Pf}[\underline{M}]$$

$$(7.12) \quad \text{Pf}[\underline{M}^T] = (-1)^m \text{Pf}[\underline{M}]$$

Beispiele:

$$\underline{M} = \begin{bmatrix} 0 & a \\ -a & 0 \end{bmatrix}$$

$$\text{Pf}[\underline{M}] = a$$

$$\underline{M} = \begin{bmatrix} 0 & \lambda_1 & & & \\ -\lambda_1 & 0 & & & \\ & & 0 & \lambda_2 & \\ & & -\lambda_2 & 0 & \\ & & & & \ddots & \\ & & & & & 0 & \lambda_m \\ & & & & & -\lambda_m & 0 \end{bmatrix}$$

$$\text{Pf}(\underline{M}) = \lambda_1 \cdot \lambda_m$$

• Offensichtlich gilt $\text{Pf}(\underline{E}) = 0$ für ungerade Dimensionen

• $P(\vec{b})$ ist nicht eichinvariant, da $|u_i(\vec{b})\rangle \rightarrow |u_i'(\vec{b})\rangle = R_{ij} |u_j\rangle$

$$P(\vec{b}) \rightarrow P'(\vec{b}) = \det(R^*) P(\vec{b})$$

aber

$$|P(\vec{b})| \text{ ist eichinvariant}$$

betrachten 2 Bänder

$$i, j \in (1, 2)$$

$\mathcal{H}_u$

$$|P(\vec{b})| = 0 \quad |u_i(\vec{b})\rangle \in \mathcal{H}_u$$

hier

(7.11)

$\mathcal{H}_g$

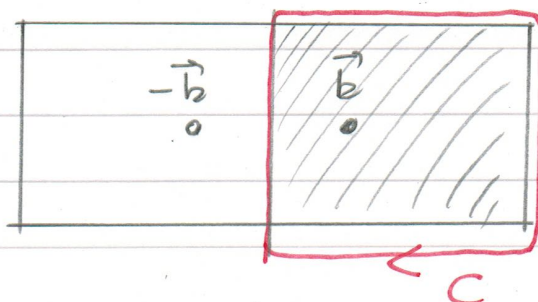
$$M_{12} M_{12}^* = 1$$

(7.12)

$$|P(\vec{b})| = 1$$

$$|2i(\vec{b})\rangle \in \mathcal{H}_g$$

Jetzt können wir eine $\mathbb{Z}_2$ topologische Invariante definieren. Dazu teilen wir die BZ in 2 Hälften so daß $\vec{b}$ und $-\vec{b}$ sich in verschiedenen Teilen liegen



$$I = \# \text{ der Nullstellen von } P(\vec{b}) \text{ in der halben BZ modulo } 2$$

$\mathbb{Z}_2$ topologische Invariante (ohne Beweis)

(7.13)

$$I = \frac{1}{2\pi i} \oint_C d\vec{b} \cdot \vec{\nabla} \ln(P(\vec{b})) \quad \text{mod } 2$$

Problem: Was ist die anschauliche Bedeutung von I ?
Kann man I in irgendeiner Form messen?