

4. Zeitumkehr und Zeitumkehrinvarianz

Bevor wir weitere Chern Isolatoren und topologische Isolatoren diskutieren können, wollen wir uns etwas näher mit Zeitumkehrtransformationen für Gitterfermionen beschäftigen

4.1. Spinlose Teilchen

Zeitumkehr $T: t \rightarrow -t$

$$(4.1) \quad T \hat{x} T^{-1} \stackrel{!}{=} \hat{x} \quad T \hat{p} T^{-1} \stackrel{!}{=} -\hat{p}$$

$$\Rightarrow T [\hat{x}, \hat{p}] T^{-1} = T i \hbar T^{-1} = -i \hbar$$

T ist anti-unitär d.h. proportional zur komplexen Konjugation K und ggf. einer weiteren unitären Transformation U

$$(4.2) \quad \boxed{T = UK}$$

$$U^\dagger = U^{-1} \\ K = K^{-1}$$

Es gilt

$$(4.3) \quad \boxed{T^2 = \pm 1}$$

Beweis:

Beweis

$$T^2 = UKUK = UU^* = U(U^\dagger)^{-1} = A$$

da $T^2 |\varphi\rangle = e^{i\varphi} |\varphi\rangle \Rightarrow A$ diagonal

$$A = A^T$$

$$\Rightarrow U = AU^T \quad \text{und} \quad U^T = UA^T = UA$$

$$\Rightarrow U = AUA \Rightarrow A = \pm 1 \quad \square$$

$$(4.4) \quad \begin{array}{|l} T^2 = 1 \Rightarrow U = U^T \\ T^2 = -1 \Rightarrow U = -U^T \end{array} \quad \begin{array}{l} \text{symmetrisch} \\ \text{antisymmetrisch} \end{array}$$

(A) Wirkung der Zeitumkehr auf spinlose Teilchen im Gitter

$$\hat{a}_e = \alpha \hat{x}_e + i\beta \hat{p}_e \quad e\text{-Orbitales}$$

$$(4.5) \quad \boxed{T \hat{a}_e T^{-1} = T(\alpha \hat{x}_e + i\beta \hat{p}_e) T^{-1} = \hat{a}_e}$$

$$(4.6) \quad \begin{array}{l} \text{hier} \\ T = \text{Transp.} \end{array} \quad \boxed{U = \mathbb{1} \quad \text{d.h.} \quad T = K} \quad \begin{array}{l} \text{nur 1 Kompo-} \\ \text{nente} \end{array}$$

$$T \hat{a}_e T^{-1} = T \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{b}} e^{i\vec{b} \cdot \vec{R}_e} \tilde{a}_{\vec{b}} T^{-1}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{b}} e^{-i\vec{b} \cdot \vec{R}_e} T \tilde{a}_{\vec{b}} T^{-1} \stackrel{!}{=} \hat{a}_e$$

$$= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{b}} e^{i\vec{b} \cdot \vec{R}_e} \tilde{a}_{\vec{b}}$$

$$(4.7) \quad \boxed{T \tilde{a}_{\vec{k}} T^{-1} = \tilde{a}_{-\vec{k}}}$$

check:

$$\hat{p} = \sum_{\vec{k}} \hbar \vec{k} \tilde{a}_{\vec{k}}^{\dagger} \tilde{a}_{\vec{k}}$$

$$T \hat{p} T^{-1} = \sum_{\vec{k}} \hbar \vec{k} T \tilde{a}_{\vec{k}}^{\dagger} \tilde{a}_{\vec{k}} T^{-1}$$

$$= \sum_{\vec{k}} \hbar \vec{k} \tilde{a}_{-\vec{k}}^{\dagger} \tilde{a}_{-\vec{k}} = - \sum_{\vec{k}} \hbar \vec{k} \tilde{a}_{\vec{k}}^{\dagger} \tilde{a}_{\vec{k}} \\ = -\hat{p} \quad \checkmark$$

D.h. ein 1-Teilchen Hamiltonoperator

$$H = \sum_{\vec{k}} h(\vec{k}) \tilde{C}_{\vec{k}}^{\dagger} \tilde{C}_{\vec{k}}$$

ist dann und nur dann zeitumkehrinvariant
TR (time-reversal) invariant, falls

$$H = \sum_{\vec{k}} h(\vec{k}) \tilde{C}_{\vec{k}}^{\dagger} \tilde{C}_{\vec{k}} = T H T^{-1} \\ = \sum_{\vec{k}} T h(\vec{k}) T^{-1} T \tilde{C}_{\vec{k}}^{\dagger} \tilde{C}_{\vec{k}} T^{-1} \\ = \sum_{\vec{k}} T h(\vec{k}) T^{-1} \tilde{C}_{-\vec{k}}^{\dagger} \tilde{C}_{-\vec{k}} \\ \Rightarrow h(\vec{k}) = h(-\vec{k})$$

$$(4.8) \quad \Rightarrow \quad \boxed{T h(\vec{k}) T^{-1} = h(-\vec{k})}$$

TR invariante Hamiltonian

(B) Verschwinden der Hall Leitfähigkeit für
TR-invariante Systeme spinloser Teilchen

TR Invarianz:

$$h(\vec{k}) |\psi(\vec{k})\rangle = T^{-1} h(-\vec{k}) T |\psi(\vec{k})\rangle = \varepsilon_{\vec{k}} |\psi(\vec{k})\rangle$$

d.h. falls $|\psi(\vec{k})\rangle$ Eigenfunktion von $h(\vec{k})$
 $\Rightarrow T |\psi(\vec{k})\rangle$ — von $h(-\vec{k})$

Block Funktion $u_{-\vec{k}} = T u_{\vec{k}} = u_{\vec{k}}^*$

Berry curvature

$$\begin{aligned} F_{lm}(\vec{k}) &= -i \left(\langle \partial_l u_{\vec{k}} | \partial_m u_{\vec{k}} \rangle - l \leftrightarrow m \right) \\ &= -i \left(\langle \partial_l u_{-\vec{k}}^* | \partial_m u_{-\vec{k}}^* \rangle - l \leftrightarrow m \right) \\ &= -i \left(\langle \partial_m u_{-\vec{k}} | \partial_l u_{-\vec{k}} \rangle - l \leftrightarrow m \right) \\ &= - F_{lm}(-\vec{k}) \end{aligned}$$

Integration $\int_{BZ} d\vec{k} \rightarrow 0$

(4.9)

$$\boxed{C = 0 \quad \sigma_{xy} = 0}$$

$\nexists$ QHEffekt für spinlose Teilchen mit TR Symmetrie

4.2 Zeitumkehr für Teilchen mit Spin

Wie transformiert sich der Spin unter TR ?

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} \Rightarrow T \vec{L} T^{-1} = -\vec{L}$$

Daher sollte

(4.10)

$$T \vec{S} T^{-1} = -\vec{S}$$

Rotation des Spins um beliebige Achse um π
Konvention: y -Achse

(4.11)

$$T = e^{-i\pi \hat{S}_y} K$$

$$\text{d.h. } U = e^{-i\pi \hat{S}_y}$$

$$T^2 = e^{-i\pi \hat{S}_y} K e^{-i\pi \hat{S}_y} K = e^{-i\pi \hat{S}_y} e^{i\pi \hat{S}_y^*}$$

$$S_y^* = -i S_y \Rightarrow T^2 = e^{-2\pi i \hat{S}_y}$$

Bosonen

(4.12)

$$T^2 = 1$$

Fermionen

$$T^2 = -1$$

Vorsicht: gilt für jeweils 1 Teilchen!

Kramers Theorem

Für einen TR invarianten Hamiltonian H von Fermionen (halbzahliger Spin) gilt, daß jeder Eigenzustand mit einer ungeraden Anzahl von Fermionen (mindestens) zweifach entartet ist

(A) Zeitumkehr in Gittermodellen von Fermionen (halbzahliger Spin)

$$H = \sum_{\vec{b}, \vec{b}'} \tilde{C}_{\vec{b}}^+ h_{\vec{b}\vec{b}'}(\vec{b}) \tilde{C}_{\vec{b}'}^-$$

Es gilt:

(4.13)

$$\begin{aligned} T \hat{C}_{j\uparrow} T^{-1} &= \hat{C}_{j\downarrow} \\ T \hat{C}_{j\downarrow} T^{-1} &= -\hat{C}_{j\uparrow} \end{aligned}$$

Das sieht auf den ersten Blick seltsam aus, denn es folgt

$$T^2 \hat{C}_{j\uparrow} T^{-2} = -\hat{C}_{j\uparrow} \quad \text{siehe Gl. (4.12)?}$$

aber: $\hat{C}_{j\uparrow}$ erniedrigt die Teilchenzahl um 1!

$|\psi\rangle$ Zustand mit ungerader Teilchenzahl

$$T^2 \hat{C}_{j\downarrow} T^{-2} |\psi\rangle = -T^2 \hat{C}_{j\downarrow} |\psi\rangle \quad (4.12)$$

$$= -T^2 |\tilde{\psi}\rangle \quad |\tilde{\psi}\rangle \text{ hat gerade Teilchenzahl}$$

$$= -|\tilde{\psi}\rangle = -\hat{C}_{j\downarrow} |\psi\rangle$$

kompakte Form für Spin $1/2$: $i\sigma^y = \begin{pmatrix} 0 & +1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$

$$(4.11) \quad \boxed{T \hat{C}_{j\lambda} T^{-1} = i \sigma_{\lambda\lambda'}^y \hat{C}_{j\lambda'}}$$

$\Rightarrow$ im Fourierraum

$$(4.15) \quad \boxed{T \tilde{C}_{\vec{k}\lambda} T^{-1} = i \sigma_{\lambda\lambda'}^y \tilde{C}_{-\vec{k}\lambda'}}$$

D.h. ein 1-Teilchen Hamiltonoperator für Spin- $1/2$ Teilchen

$$H = \sum_{\vec{k}\lambda\lambda'} h^{\lambda\lambda'}(\vec{k}) \tilde{C}_{\vec{k}\lambda}^\dagger(\vec{k}) \tilde{C}_{\vec{k}\lambda'}(\vec{k})$$

ist TR invariant falls

$$H \stackrel{!}{=} T H T^{-1}$$

$$= \sum_{\vec{b} \lambda \lambda'} T h^{\lambda \lambda'}(\vec{b}) T^{-1} T \tilde{C}_{\lambda}^{+}(\vec{b}) \tilde{C}_{\lambda'}(\vec{b}) T^{-1}$$

$$= \sum_{\substack{\vec{b} \lambda \lambda' \\ \lambda'' \lambda'''}} T h^{\lambda \lambda'}(\vec{b}) T^{-1} \tilde{C}_{\lambda''}^{+}(-\vec{b}) i(\sigma^y)^T_{\lambda'' \lambda} \cdot i(\sigma^y)_{\lambda' \lambda'''} \tilde{C}_{\lambda'''}(-\vec{b})$$

$$= \sum_{\substack{\vec{b} \lambda \lambda' \\ \lambda'' \lambda'''}} i(\sigma^y)^T_{\lambda'' \lambda} h^{\lambda \lambda'}(\vec{b})^* i \sigma^y_{\lambda' \lambda'''} \cdot \tilde{C}_{\lambda''}^{+}(-\vec{b}) \tilde{C}_{\lambda'''}(-\vec{b})$$

$$= \sum_{\substack{\vec{b} \lambda \lambda' \\ \lambda'' \lambda'''}} i(\sigma^y)^T_{\lambda'' \lambda} h^{\lambda \lambda'}(-\vec{b})^* i \sigma^y_{\lambda' \lambda'''} \tilde{C}_{\lambda''}^{+}(\vec{b}) \tilde{C}_{\lambda'''}(-\vec{b})$$

$$\Rightarrow (4.16) \quad \left| \begin{array}{l} h^{\lambda \lambda'}(\vec{b}) = i(\sigma^y)^T_{\lambda \lambda''} [h^{\lambda'' \lambda'''}(-\vec{b})]^* i \sigma^y_{\lambda''' \lambda} \end{array} \right.$$

(Summenkonvention!)

TR invariable Spin 1/2 Hamiltonians

► Falls (4.8) und (4.16) nur für bestimmte $\vec{k} = \vec{k}_0$ gilt, nennt man diese $\vec{k}_0$ TR invariable Punkte des Hamiltonians

► Auch für TR invariable Hamiltonians $\Rightarrow C_{\vec{k}_0} = 0$