

7.3. TR Polarisation

Für den trivialen QSH-E hatten wir gesehen, daß die Differenz der Chernzahlen $Ch_\uparrow - Ch_\downarrow$ eine topologische Invariante darstellt. Die Chernzahl $Ch_\uparrow$ charakterisiert das Windung der Polarisation $P_\uparrow$ beim Durchlaufen eines periodischen Parameters. Dies wollen wir jetzt auf den Fall gekoppelter Spins verallgemeinern.

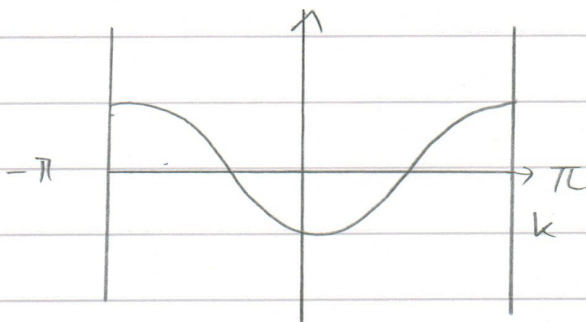
Zunächst 1D Gitter mit TR Invarianz

• 1 Spinloses Teilchen

$$T = K$$

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

$$(7.14) \quad \boxed{T h(\vec{k}) T^{-1} = h^*(\vec{k}) = h(\vec{k}) = h(-\vec{k})}$$



• 1 Spin 1/2 Teilchen

$$T = -i \sigma_y K$$

$$(7.15) \quad \boxed{\underline{h}(\vec{k}) = i(\underline{\sigma}_y^T) \underline{h}(-\vec{k})^* i \underline{\sigma}_y}$$

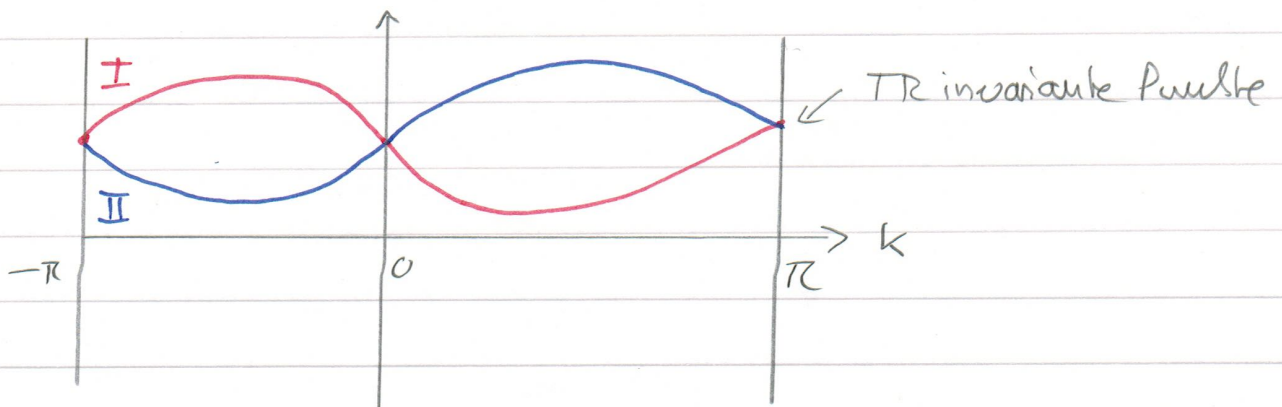
$$\underline{h}(\bar{b}) = \begin{bmatrix} h_{11}(\bar{b}) & h_{12}(\bar{b}) \\ h_{21}(\bar{b}) & h_{22}(\bar{b}) \end{bmatrix} \stackrel{!}{=} \begin{bmatrix} h_{22}^*(-\bar{b}) & -h_{21}^*(-\bar{b}) \\ -h_{12}^*(-\bar{b}) & h_{11}^*(-\bar{b}) \end{bmatrix}$$

da gelten muß $h_{11}(\bar{b}) = h_{11}^*(\bar{b})$ $h_{22}(\bar{b}) = h_{22}^*(\bar{b})$
 und $-h_{12}^*(\bar{b}) = h_{21}(\bar{b})$, folgt bei TR Symmetrie

$$\begin{bmatrix} h_{11}(\bar{b}) & h_{12}(\bar{b}) \\ h_{21}(\bar{b}) & h_{22}(\bar{b}) \end{bmatrix} \stackrel{!}{=} \begin{bmatrix} h_{22}(-\bar{b}) & -h_{12}(-\bar{b}) \\ -h_{21}(-\bar{b}) & h_{11}(-\bar{b}) \end{bmatrix}$$

$$\varepsilon_{\pm}(\bar{b}) = \frac{1}{2} \left(h_{11} + h_{22} \pm \sqrt{h_{11}^2 + 4|h_{12}|^2 - 2h_{11}h_{22} + h_{22}^2} \right) \bar{b}$$

$$\varepsilon_{\pm}(-\bar{b}) = \frac{1}{2} \left(h_{22} + h_{11} \pm \sqrt{h_{11}^2 + 4|h_{12}|^2 - 2h_{11}h_{22} + h_{22}^2} \right) -\bar{b}$$



Bandsstruktur hat Kramers-Paare

$$(7.16) \quad |u^{\pm}_{-k}\rangle = e^{i\pi_k} T |u^{\pm}_k\rangle$$

$\Rightarrow$ • berechne Polarisation nur von einer der beiden Lösungen des Kramers Doublets in der gesamten Brillouinzone (BZ)

$\Rightarrow$ • Alternative: betrachte beide Lösungen aber nur in der halben BZ

Zakphase bzw Polarisation einer Lösung des Kramerspaares

$$(7.17) \quad P^S = \frac{i}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dk \sum_a \langle u_{a,k}^S | \nabla_k | u_{a,k}^S \rangle$$

besetzte
Bänder

$S = I, II$

$$A^S(k) \equiv i \sum_a \langle u_{a,k}^S | \nabla_k | u_{a,k}^S \rangle$$

(besetzt)

man gilt

$$P^I = \frac{1}{2\pi} \int_0^{\pi} dk (A^I(k) + A^I(-k))$$

Zshg. zwischen $A^I(-k)$ und $A^{II}(k)$

$$A^I(-k) = -i \sum_a \langle u_{a,-k}^I | \nabla_k | u_{a,-k}^I \rangle \quad \nabla_{-k} = -\nabla_k$$

$$= -i \sum_a \langle T u_{a,k}^{II} | \nabla_k | T u_{a,k}^{II} \rangle$$

$$= -i \sum_a i \nabla_k x_{ka} \langle T u_{a,k}^{II} | T u_{a,k}^{II} \rangle$$

$$= -i \sum_a \langle T u_{a,k}^{\text{II}} | \nabla_k | T u_{a,k}^{\text{II}} \rangle + \sum_a \nabla_k \chi_{ka}$$

weiterhin $T = UK$ mit $U^{-1} = U^+$ (ohne Bandindex a)

$$\langle T u_k^{\text{II}} | T u_k^{\text{II}} \rangle = (U_{mn} u_{kn}^{\text{II}*})^* \nabla_k U_{mp} u_{kp}^{\text{II}*}$$

$$= \underbrace{U_{nm}^+ U_{mp}}_{\delta_{np}} u_{kn}^{\text{II}} \nabla_k u_{kp}^{\text{II}*} = u_{kn}^{\text{II}} \nabla_k u_{kn}^{\text{II}*}$$

$$\stackrel{\text{part. Int.}}{=} - u_{kn}^{\text{II}} \nabla_k u_{kn}^{\text{II}} = - \langle u_k^{\text{II}} | \nabla_k | u_k^{\text{II}} \rangle$$

d.h.

$$A^{\text{I}}(-k) = A^{\text{II}}(k) + \sum_a \nabla_k \chi_{ka}$$

$\Rightarrow$

$$P^{\text{I}} = \frac{1}{2\pi} \int_0^\pi dk (A^{\text{I}}(k) + A^{\text{II}}(k)) + \frac{1}{2\pi} \int_0^\pi dk \sum_a \nabla_k \chi_{ka}$$

$$(7.18) \quad P^{\text{I}} = \frac{1}{2\pi} \left[\int_0^\pi dk (A^{\text{I}}(k) + A^{\text{II}}(k)) + \sum_a (\chi_{\pi a} - \chi_{0a}) \right]$$

Nun wollen wir den letzten Term in einer anderen Form schreiben mit Hilfe der sog. Verknüpfungsmatrix die unitär ist ($U(2N)$)

$$(7.19) \quad \boxed{B_{mn}^{\text{ve}}(k) \equiv \langle u_{m,-k}^{\text{ve}} | T u_{n,k}^{\text{ve}} \rangle}$$

m, n Band
indizes

$= 2, 4, \dots, 2N$

Wegen TR Invarianz gilt

$$(i) \quad |u_{a,-k}^I\rangle = e^{i\chi_{ka}} |T u_{a,k}^II\rangle$$

$$\begin{aligned} T |u_{a,-k}^I\rangle &= T e^{i\chi_{ka}} T^{-1} \underbrace{T^2}_{=-1} |u_{a,k}^II\rangle \\ &= -e^{-i\chi_{ka}} |u_{a,k}^II\rangle \end{aligned}$$

$$(ii) \quad |u_{a,-k}^II\rangle = -e^{i\chi_{-ka}} T |u_{a,k}^I\rangle$$

$\Rightarrow$

$$B_{mn}^{II,I}(k) = \langle u_{m,-k}^II | T |u_{n,k}^I\rangle = -\delta_{mn} e^{-i\chi_{-kn}}$$

sonst

$$B_{m,n}^{I,II}(k) = -B_{m,n}^{II,I}(-k)$$

d.h. B ist Block-diagonal

$$(7.20) \quad B_{m,n}(k) = \begin{bmatrix} \ddots & & \\ & \begin{bmatrix} 0 & -e^{-i\chi_{-kn}} \\ e^{-i\chi_{kn}} & 0 \end{bmatrix} & \\ & & \ddots \end{bmatrix} \begin{matrix} II \\ I \\ \end{matrix}$$

$$(7.21) \quad \Rightarrow \quad \sum_a (\chi_{\pi a} - \chi_{0a}) = i \ln \left[\frac{\text{Pf}(B(\pi))}{\text{Pf}(B(0))} \right]$$

Damit bekommen wir schließlich

$$(7.22) \quad P^I = \frac{1}{2\pi} \int_0^\pi dk \underbrace{(A^I(k) + A^{II}(k))}_{A(k)} + i \ln \frac{\text{Pf}(B(\pi))}{\text{Pf}(B(0))}$$

wenn wir hingegen einem der Kramers paar Lösungen folgen können ist die äquivalente aber einfachere Form

$$(7.23) \quad P^I = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^\pi dk A^I(k)$$

besser

analog findet man

$$(7.24) \quad P^{II} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^0 dk (A^I(k) + A^{II}(k)) - i \ln \frac{\text{Pf}(B(\pi))}{\text{Pf}(B(0))}$$

d.h. die totale Polarisation

$$P = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^\pi dk A(k) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^\pi dk A^I(k) + A^{II}(k)$$

Das winding von P verschwindet ($\neq$ Chernzahl wegen TR Symmetrie)!

Aber:

TR - Polarisation

$$(7.25) \quad \boxed{P_T = P_I - P_{II} = \frac{1}{2\pi} \left\{ \int_0^\pi dk A(k) - \int_{-\pi}^0 dk A(k) + 2i \ln \frac{\text{Pf}[B(\pi)]}{\text{Pf}[B(0)]} \right\}}$$

Man kann zeigen, daß gilt

$$P_T = \frac{1}{2\pi i} \left[\int_0^\pi dk \text{Tr} \{ B^\dagger \nabla_k B \} - 2 \ln \frac{\text{Pf}[B(\pi)]}{\text{Pf}[B(0)]} \right]$$

Mit Hilfe der Block-Diagonalität von B findet man

$$\text{Tr} \{ B^\dagger \nabla_k B \} = \nabla_k \ln \text{Det}[B(k)]$$

und somit

$$(7.26) \quad \boxed{P_T = \frac{1}{\pi i} \ln \left[\frac{\sqrt{\text{Det}[B(\pi)]}}{\text{Pf}[B(\pi)]} \frac{\text{Pf}[B(0)]}{\sqrt{\text{Det}[B(0)]}} \right]}$$

Benutzt

da gilt $\text{Det}[B] = \text{Pf}[B]^2$ ist $P_T \bmod 2$

P_T ist $\mathbb{Z}_2$ topologischer Index

P_T kann zwei Werte annehmen

(i) $Pf[B(0)]$ und $Pf[B(\pi)]$ haben
dasselbe Vorzeichen

$$\boxed{P_T = 0} \quad \text{mod } 2$$

(ii) $Pf[B(0)]$ und $Pf[B(\pi)]$ haben
entgegengesetzte Vorzeichen

$$\boxed{P_T = 1} \quad \text{mod } 2$$

- Im Fall (i) muß es eine gerade Anzahl von Nullstellen von $Pf[B(k)]$ in $k \in (0, \pi)$ geben
- Im Fall (ii) muß es eine ungerade Anzahl von Nullstellen geben

Erweiterung auf 2D Gittermodelle mit TR Invarianz

Hinzufügen eines periodischen Parameters, z.B. k_y , zum Hamiltonian der adiabatisch geändert wird erlaubt es Änderungen der TR Polarisation zu betrachten

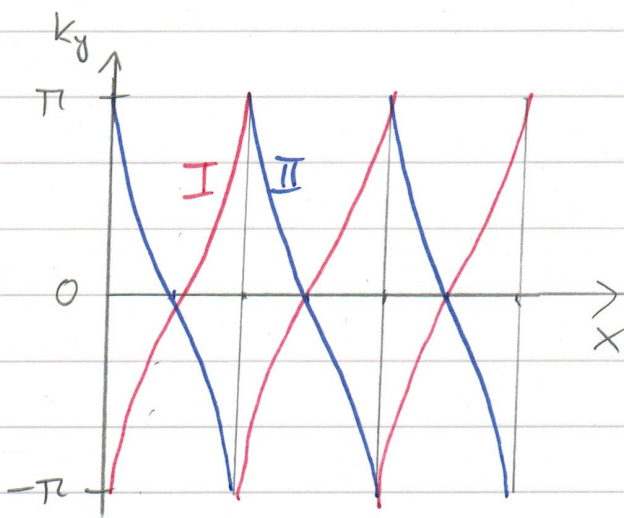
$$\Delta P_T = P_T[k_{y1}] - P_T[k_{y2}]$$

Beim Durchlaufen der ganzen Periode (Brillouinzone)

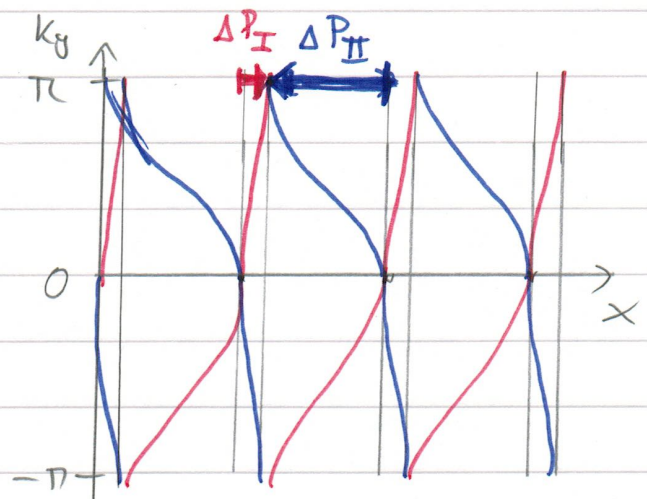
erhält man analog zur Chernzahl des
2D

topologischen $\mathbb{Z}_2$ Index

$$(7.27) \quad I = \frac{1}{j} \left[\frac{\text{Det } B[\vec{k}_j]}{\text{Pf } B[\vec{k}_j]} \right]$$



2 TR Kopien eines
Chern Isolators mit
 $\text{Ch}_I = -\text{Ch}_{II} = 1$



TR invarianter topologischer
Isolator

$$\Delta P_I - \Delta P_{II} = 1$$

die TR Partner werden bei $k_y = 0$ ausgetauscht.