

**Matière de Dirac et topologie dans les systèmes
à plusieurs particules**
Master 2 ICFP
Ecole Normale Supérieure

Pascal Simon

2015-2016

Table des matières

1	Équation de Dirac : court résumé	1
1.1	Introduction historique	1
1.2	Équation de Dirac	1
1.3	Solutions de l'équation de Dirac	3
1.4	Théorie des trous et conjugaison de charge	4
1.4.1	Concepts des trous	4
1.4.2	Conséquences	4
1.4.3	Conjugaison de charge	4
1.5	Cas de la masse nulle	5
1.6	Paradoxe de Klein et "Zitterbewegung"	6
1.6.1	Paradoxe de Klein	6
1.6.2	Zitterbewegung	7
2	Graphène et équation de Dirac	11
2.1	Modèle de liaisons fortes	11
2.2	Théorie de basse énergie	13
2.3	Symétries microscopiques à basse énergie	14
2.3.1	Symétrie par renversement du temps	14
2.3.2	Symétrie d'inversion	15
2.3.3	Remarques sur la chiralité	15
2.4	Au delà de l'équation de Dirac	16
2.5	Paradoxe de Klein dans le graphène	17
2.6	Graphène sous champ magnétique	17
2.7	Fermions de Dirac massifs à 2D	19
2.7.1	Isolant de Semenoff	19
2.7.2	Isolant de Haldane	20
2.7.3	Isolant de Kekulé	22
2.8	Équation de Dirac inhomogène	22
3	Quelques applications de la topologie en matière condensée	24
3.1	Introduction à quelques notions de topologie	24
3.1.1	Espaces topologiques et homéomorphismes	25
3.1.2	Invariants topologiques	25
3.1.3	Homotopie	26
3.2	Applications en matière condensée	28
3.2.1	Défauts topologiques	28
3.2.2	Particule sur anneau	29
3.3	Phase de Berry	31
3.3.1	Généralités	31
3.3.2	Nombre de Chern	33
3.3.3	Expression en termes d'éléments de matrice	33
3.4	Éffet Aharonov-Bohm revisité	34
3.5	Un modèle à deux niveaux	35
3.6	Monopôles de Dirac	35
3.7	Spin classique et quantique	36

3.7.1	Cas d'un spin sous champ magnétique	36
3.7.2	Equations du mouvement du spin	38
3.7.3	Traitement quantique du spin par l'intégrale fonctionnelle	38
3.7.4	Effet tunnel du spin d'une molécule magnétique	39
3.7.5	Chaîne de spin	41
3.7.6	Quelques propriétés des termes topologiques de type Wess-Zumino	42
3.8	Phase de Berry dans l'espace réciproque	43
3.8.1	Bandes de Bloch	43
3.8.2	Symétries	45
3.8.3	Exemples	45
3.9	Transport adiabatique et polarisation	49
3.9.1	Courant pompé	49
4	Isolants topologiques	52
4.1	Effet Hall quantique	52
4.1.1	Classique	52
4.1.2	Quantique	53
4.1.3	Une première explication	55
4.1.4	TKKN	57
4.1.5	Un argument plus général : Niu-Thouless-Wu	58
4.2	Effet Hall quantique anormal et isolants de Chern	59
4.2.1	Retour sur le modèle de Haldane comme prototype d'effet Hall quantique anormal	60
4.2.2	Etats de bord chiraux	62
4.3	Isolants topologiques bidimensionnels	64
4.3.1	Spin-orbite intrinsèque. Modèle de Kane-Mele	64
4.3.2	Hétérostructures de HgTe/CdTe	65
4.3.3	États de bords hélicoïdaux et dégénérescence de Kramers	66
4.4	Isolants topologiques $3D$	67
4.5	Supraconducteurs topologiques et fermions de Majorana	67
4.6	Classification des isolants et supraconducteurs topologiques	67
4.7	Bilan, perspectives et problèmes ouverts	67

Chapitre 1

Équation de Dirac : court résumé

1.1 Introduction historique

Pour illustrer les problèmes qui surviennent lorsque l'on essaie de concilier principe de relativité et la description quantique d'une particule ponctuelle, considérons une particule relativiste d'impulsion $p = mc$. Or le principe d'incertitude de Heisenberg impose $\Delta x \Delta p \geq \hbar$. On voit donc que pour des échelles de longueur plus petites que la longueur de Compton $\bar{\lambda} = \frac{\hbar}{mc}$, le concept de particule quantique ponctuelle pose problème. En effet, déterminer la position de la particule avec une précision plus petite que la longueur de Compton demande des énergies plus grandes que l'énergie de masse, nécessitant la création de nouvelles particules. La description à une particule que fournit la mécanique quantique n'est pas satisfaisante pour les particules relativistes. La théorie quantique des champs permet de résoudre une bonne partie de ces difficultés. Néanmoins pour des échelles d'énergie intermédiaire, on peut essayer de combiner mécanique quantique à une particule et relativité.

Pour cela, un bon point de départ consiste à utiliser le principe d'équivalence $E \rightarrow i\hbar\partial_t$ et $\vec{p} \rightarrow \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}$. Ainsi une particule non relativiste d'énergie $E = \frac{p^2}{2m} + \text{const}$ satisfait à l'équation de Schrödinger

$$i\hbar\frac{d|\psi\rangle}{dt} = -\frac{\nabla^2}{2m}|\psi\rangle = \hat{H}|\psi\rangle. \quad (1.1)$$

Pour une particule relativiste d'énergie

$$E^2 = p^2c^2 + m^2c^4, \quad (1.2)$$

le principe de correspondance donne l'équation de Klein-Gordon

$$-\hbar^2\frac{d^2}{dt^2}|\psi\rangle = m^2c^2|\psi\rangle - \hbar^2c^2\vec{\nabla}^2|\psi\rangle. \quad (1.3)$$

Il s'agit du moyen le plus simple d'allier la mécanique quantique et l'invariance de Lorentz.

Cette équation pourrait paraître satisfaisante, cependant elle souffre de plusieurs problèmes. Lorsque l'on cherche à définir une densité de probabilité par la relation

$$\rho = j^0 = \frac{i}{2m}(\psi^*\partial_t\psi - \psi\partial_t\psi^*),$$

on constate que cette quantité n'a aucune raison d'être définie positive et ne peut donc définir une densité de probabilité.

Un second problème survient lorsque l'on cherche des solutions de type onde plane à l'équation de Klein Gordon. Les solutions d'énergie négatives $E = -\sqrt{p^2c^2 + m^2c^4}$ ont le même statut que les solutions d'énergie positives $E = \sqrt{p^2c^2 + m^2c^4}$. Le spectre n'est donc pas borné inférieurement !

Cette description pose donc problème.

1.2 Équation de Dirac

Pour y remédier, Dirac propose alors d'ajouter des conditions supplémentaires à l'équation alliant relativité et mécanique quantique. Dirac veut conserver la linéarité en temps de l'équation de Schrödinger. Il cherche quelle est l'équation différentielle du premier ordre la plus simple avec les contraintes suivantes

1. les solutions vérifient une équation de continuité du type $\partial_\mu j^\mu = 0$ (où $j^\mu = (\rho, \vec{j})$) avec une densité $j^0 \geq 0$
2. l'équation doit être covariante pour assurer l'invariance de Lorentz, item les solutions vérifient la relation de dispersion $E^2 = p^2 c^2 + m^2 c^4$. Il souhaite ainsi trouver une équation dont le "carré" redonne l'équation de Klein-Gordon.

Pour ce faire il est nécessaire d'utiliser une représentation matricielle¹.

Dirac proposa l'équation matricielle du premier ordre suivante

$$(i\vec{\alpha} \cdot \vec{\nabla} + \beta m)\psi = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi \quad (1.4)$$

où $\vec{\alpha}$ et β sont deux matrices. Nous noterons pour la suite $\hat{H}_D = i\vec{\alpha} \cdot \vec{\nabla} + \beta m$. Nous avons alors deux contraintes à vérifier :

- L'équation (1.4) élevée au carré doit redonner l'équation de Klein-Gordon
- Le Hamiltonien \hat{H}_D doit être hermitien

Afin de vérifier ces conditions, Dirac a proposé les relations d'anticommutation suivante entre les matrices α et β

$$\{\alpha_i, \alpha_k\} = 0 \text{ pour } i \neq k \text{ où } i, k = 1, 2, 3 \quad (1.5)$$

$$\{\alpha_i, \beta\} = 0 \quad (1.6)$$

$$\alpha_i^2 = \beta_i^2 = 1 \quad (1.7)$$

Les matrices α_i et β n'ont donc que des valeurs propres égales à ± 1 . Comme α_i et α_j anticommulent pour $i \neq j$, il est aisé de montrer en utilisant le déterminant que la dimension des matrices doit être pair. Comme les matrices de Pauli de dimension 2 ne satisfont pas à toutes ces contraintes, il faudra chercher des matrices de taille minimum $n = 4$.

Pour des matrices α et β vérifiant effectivement ces relations on obtient alors que l'équation

$$-\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} |\psi\rangle = \hat{H}_D^2 |\psi\rangle$$

redonne effectivement l'équation de Klein-Gordon. Le problème majeur est que les conditions d'anticommutation précédentes donnent lieu à plusieurs solutions.

Dans la notation de Dirac, on pose²

$$\gamma^0 = \beta, \quad \gamma^i = \beta \alpha^i, \quad (1.8)$$

les matrices γ^μ étant appelées matrices de Dirac et vérifiant les relations de commutation

$$\{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} = 2g^{\mu\nu}, \quad (1.9)$$

où $g^{\mu\nu}$ est le tenseur métrique égal à 1 pour $\mu = \nu = 0$, -1 pour $\mu = \nu = 1, 2, 3$ et 0 sinon. On aboutit de cette manière à l'équation de Dirac sous la forme suivante

$$\boxed{(i\gamma^\mu \partial_\mu - m)\psi = 0}, \quad (1.10)$$

pouvant s'abrégé en utilisant la notation de Feynman sous la forme

$$(i\cancel{\partial} - m)\psi = 0,$$

où par définition un quadrivecteur barré est donné par

$$\cancel{A} = A_\mu \gamma^\mu. \quad (1.11)$$

1. On notera que deux équations redonnent la relation de dispersion relativiste lorsque celles-ci sont élevées au carré. Ces équations sont

$$E = \pm \sqrt{p^2 c^2 + m^2 c^4},$$

et on voit que l'équation de Dirac fera donc nécessairement apparaître des solutions d'énergie positive et d'énergie négative. Le problème de l'interprétation des solutions d'énergie négatives demeure donc.

2. On utilise ici la notation conventionnelle en relativité restreinte qui veut que les indices latins désignent les composantes 1 à 3 et les indices grecs les composantes 0 à 4.

Vient alors le problème de la représentation des matrices de Dirac celle-ci étant multiple en ne se basant que sur les relations de commutations. La représentation de Dirac donne la forme suivante pour les matrices de Dirac

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} I_2 & 0 \\ 0 & -I_2 \end{pmatrix} \quad \gamma^i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ -\sigma_i & 0 \end{pmatrix},$$

où les σ_i désignent les matrices de Pauli. Les matrices de Dirac sont alors des matrices 4×4 .

D'autres représentations sont également possibles, citons juste la représentation de Majorana dans laquelle on définit les matrices

$$\alpha_{1M} = -\alpha_1 \quad \alpha_2 = \beta \quad \alpha_{3M} = -\alpha_3 \quad \beta_M = \alpha_2.$$

Avec

$$\alpha^i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ \sigma_i & 0 \end{pmatrix} \quad \beta = \begin{pmatrix} I_2 & 0 \\ 0 & I_2 \end{pmatrix},$$

on obtient alors l'équation de Majorana

$$(\partial_t + \vec{\alpha}_M \cdot \vec{\nabla} + i\beta_M m)\psi = 0.$$

Le terme en facteur de ψ est ici réel, et par conséquent les solutions de l'équation de Majorana vérifient $\psi_M^* = \psi_M$. Les particules qui satisfont l'équation de Majorana sont leur propre antiparticule. Elles ne possèdent donc pas de charge! Majorana avait postulé que les neutrinos pouvaient être décrits cette équation. Il semble que cela ne soit pas le cas. A ce jour nous ne connaissons pas de particules élémentaires de type Majorana. Nous verrons par contre à la fin du cours des quasi-particules de Majorana dans des systèmes de matière condensée.

Les solutions de l'équation de Dirac sont données sous la forme d'un **bi-spineur**, un vecteur à 4 composantes. On note

$$\psi = \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix}$$

où chacune des quantités φ et χ sont des spineurs à deux composantes la première donnant les solutions d'énergie positive et la seconde les solutions d'énergie négative. De cette manière nous obtenons deux équations différentielles couplées pour χ et φ

$$\begin{aligned} i\partial_t \varphi &= m\varphi + \frac{1}{i} \vec{\sigma} \cdot \vec{\nabla} \chi \\ i\partial_t \chi &= m\chi - \frac{1}{i} \vec{\sigma} \cdot \vec{\nabla} \varphi \end{aligned}$$

La quantité ψ^\dagger vérifie également l'équation de Dirac en définissant $(\gamma^0)^\dagger = \gamma^0$, $\gamma^i = (\beta\alpha)^i = \alpha\beta = \gamma^0\gamma^i\gamma^0$ et $\bar{\psi} = \psi^\dagger\gamma^0$, on obtient alors l'équation

$$\bar{\psi}(i\overleftarrow{\not{\partial}} + m) = 0,$$

où la flèche orientée vers la gauche au dessus de la dérivée signifie que celui-ci agit sur les éléments situés à sa gauche.

Il est alors immédiat de montrer que moyennant l'équation $\partial_\mu(\bar{\psi}\gamma^\mu\psi) = 0$, la densité de probabilité

$$j^0 = \bar{\psi}\gamma^0\psi = \psi^\dagger\psi = \varphi^*\varphi + \chi\chi^*$$

est définie positive et que

$$\vec{j} = \psi^\dagger\vec{\alpha}\psi.$$

On peut également vérifier que l'équation de Dirac est invariante de Lorentz ce qui est moins évident.

1.3 Solutions de l'équation de Dirac

Si l'on recherche des solutions type ondes planes de la forme

$$\begin{aligned} \psi_+(x) &= e^{-ikx}u(k) \text{ pour les énergies positives} \\ \psi_-(x) &= e^{ikx}v(k) \text{ pour les énergies négatives,} \end{aligned}$$

où u et v sont des bi-spineurs. On obtient pour les quantités spinorielles $u(k)$ et $v(k)$ les équations linéaires suivantes

$$(k - m)u(k) = 0 \quad (1.12)$$

$$(k + m)v(k) = 0. \quad (1.13)$$

On admettra que les solutions de ces équations sont données par

$$u^\alpha(k) = \frac{k + m}{\sqrt{2m(m + E)}} u^\alpha(m, 0)$$

$$v^\alpha(k) = -\frac{k - m}{\sqrt{2m(m + E)}} v^\alpha(m, 0),$$

où $E = k^0 = \sqrt{\vec{k}^2 + m^2}$ et les solutions à $k = 0$ sous la forme canonique

$$u^{(1)}(m, 0) = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad u^{(2)}(m, 0) = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$v^{(1)}(m, 0) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad v^{(2)}(m, 0) = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Les spineurs canoniques vérifient les normalisations suivantes

$$\bar{u}^\alpha(k)u^\beta(k) = \delta_{\alpha\beta} ; \bar{u}^\alpha(k)v^\beta(k) = 0$$

$$\bar{v}^\alpha(k)v^\beta(k) = -\delta_{\alpha\beta} ; \bar{v}^\alpha(k)u^\beta(k) = 0.$$

Ces vecteurs de base sont aussi états propres de l'opérateur de spin défini par $\Sigma_3 = \frac{1}{2}\sigma_3 \otimes \sigma_3$.

1.4 Théorie des trous et conjugaison de charge

1.4.1 Concepts des trous

Comme nous l'avons souligné, l'équation de Dirac ne résout pas le problème des solutions d'énergie négatives déjà présent au niveau de l'équation de Klein-Gordon. Dirac proposa une interprétation hardie et originale à plusieurs particules. Dirac supposa que tous les niveaux d'énergie négative sont remplis. Ainsi un électron d'énergie négative peut être excité créant un trou dans les états d'énergie négative de charge opposée dans la **mer de Dirac**. Ce trou dans la mer de Dirac est l'antiparticule de l'électron et est appelé positron.

1.4.2 Conséquences

La conséquence de cette interprétation est que la vision usuelle à une particule est erronée dans la mesure où chaque électron va avec son antiparticule³ et la rencontre de deux antiparticules les fait s'annihiler générant deux photons d'impulsion opposée dans le référentiel du centre de masse

$$e^+ + e^- \longrightarrow 2\gamma.$$

Le nombre de particule n'est donc pas conservé dans l'équation de Dirac : ce n'est pas un bon nombre quantique. Il est donc nécessaire d'adopter une approche à plusieurs particules.

1.4.3 Conjugaison de charge

En présence d'un champ électro-magnétique le couplage réduit nécessite d'effectuer la transformation

$$\partial_t \rightarrow \partial_t + ieA_\mu,$$

3. "Toujours par deux ils vont".

l'équation de Dirac se réécrivant alors

$$(i\partial - e\mathcal{A} - m)\psi = 0.$$

Nous cherchons une solution ψ^C (conjugué de ψ) de telle sorte qu'en changeant le signe de la charge $e \rightarrow -e$ on obtienne l'équation

$$(i\partial + e\mathcal{A} - m)\psi^C = 0.$$

On relie ψ à ψ^C par l'opération de conjugaison de charge

$$\psi = \hat{C}\psi^C,$$

où \hat{C} est appelé opérateur de conjugaison de charge. Il s'agit d'un opérateur vérifiant

$$\hat{C}^\dagger = \hat{C}^T = \hat{C}^{-1} = -\hat{C},$$

et la relation d'unitarité modifiée

$$\hat{C}\gamma_\mu^\dagger\hat{C}^{-1} = -\gamma_\mu.$$

On pourra à titre d'exercice vérifier que dans la représentation de Dirac, moyennant les conditions précédentes l'opérateur de conjugaison de charge a pour expression

$$C = i\gamma^2\gamma^0 = \begin{pmatrix} 0 & i\sigma_2 \\ -i\sigma_2 & 0 \end{pmatrix}.$$

L'équation vérifiée par ψ^C donne alors une solution sous la forme d'un spineur

$$\psi = \begin{pmatrix} u_{\uparrow}^e \\ u_{\downarrow}^e \\ v_{\uparrow}^h \\ v_{\downarrow}^h \end{pmatrix},$$

les notations e et h signifiant électron et trou (hole) et les flèches indiquant l'orientation du spin des particules considérées.

1.5 Cas de la masse nulle

Dans le cas où la masse m des électrons est nulle il est pratique de se placer dans la base chirale. Le changement de base fait intervenir une modification de l'expression des matrices de Dirac, et ainsi, nous avons dans cette base

$$\gamma_c^0 = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \quad \gamma_c^i = \begin{pmatrix} 0 & \sigma_i \\ -\sigma_i & 0 \end{pmatrix}.$$

Le passage d'une base à l'autre est effectué via la relation de changement de base $\gamma_c^i = U\gamma_D U^{-1}$, où la matrice de changement de base U est donnée par

$$U = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix}.$$

Dans cette base l'équation de Dirac devient sous sa forme matricielle

$$\begin{pmatrix} 0 & -\frac{1}{c}\partial_t + \vec{\sigma} \cdot \vec{\nabla} \\ -\frac{1}{c}\partial_t - \vec{\sigma} \cdot \vec{\nabla} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varphi \\ \chi \end{pmatrix} = 0.$$

Nous obtenons donc les deux équations différentielles découplées

$$\left(-\frac{1}{c}\partial_t + \vec{\sigma} \cdot \vec{\nabla}\right) \varphi = 0 \tag{1.14}$$

$$\left(-\frac{1}{c}\partial_t - \vec{\sigma} \cdot \vec{\nabla}\right) \chi = 0 \tag{1.15}$$

Les vecteurs φ et χ vérifiant cette équation sont appelés spineurs de Weyl.

La base dans laquelle nous nous sommes placés est appelée chirale car en posant la matrice

$$\gamma_c^5 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix},$$

et en l'appliquant aux spineurs $\begin{pmatrix} \varphi \\ 0 \end{pmatrix}$, $\begin{pmatrix} 0 \\ \chi \end{pmatrix}$, on obtient réciproquement le vecteur initial et son opposé. Ces deux spineurs étant les solutions d'équations différentielles découplées, on obtient alors simplement un changement de signe pour la deuxième solution. Cependant dans le cas où la masse était non nulle, l'application d'une telle matrice sur les spineurs dont les composantes sont reliées par des équations différentielles couplées, on aurait mélangé les états propres. Ainsi la présence de la masse est responsable d'un mélange des états propres et exhibe donc un comportement oscillatoire entre les différents états propres. C'est ce phénomène d'oscillation des états propres qui permet d'attribuer une masse aux neutrinos qui oscillent entre les trois saveurs électronique, muonique et tauique.

1.6 Paradoxe de Klein et "Zitterbewegung"

1.6.1 Paradoxe de Klein

Considérons le cas de l'équation de Klein-Gordon en présence d'un champ électromagnétique. Nous avons alors en couplage minimal

$$\begin{aligned} \partial_t &\rightarrow \partial_t + \frac{ie}{\hbar c} \Phi \\ \vec{\nabla} &\rightarrow \vec{\nabla} - \frac{ie}{\hbar c} \vec{A}. \end{aligned}$$

Dans le cas où seul le potentiel scalaire Φ est non nul, l'équation de Klein-Gordon s'écrit

$$-\hbar^2 \left[\partial_t + \frac{ie}{\hbar} \phi \right]^2 \psi = (-e^2 \vec{\nabla}^2 + m^2 c^4) \psi. \quad (1.16)$$

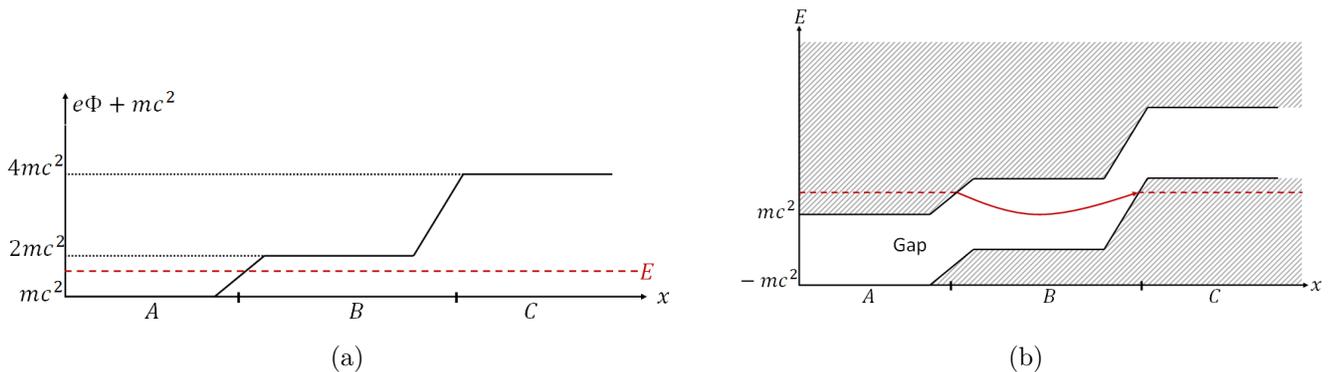


FIGURE 1.1 – (a) Nous considérons un potentiel constant par morceau. Pour se faire nous divisons notre espace entre trois zones A , B et C sur lesquelles le potentiel $e\Phi + mc^2$ est donné par mc^2 , $2mc^2$ et $4mc^2$ respectivement. (b) La résolution de l'équation de Klein Gordon nous donne deux bandes d'énergie entre lesquelles les électrons peuvent "tunneller".

Considérons le potentiel représenté sur la FIGURE (1.1.a), en cherchant une solution en onde plane de la forme $\psi = Ce^{i(px-Et)}$, nous obtenons la relation de dispersion

$$p^2 = \frac{1}{c^2} (E - e\phi - mc^2)(E - e\phi + mc^2).$$

En résolvant l'équation (1.16) dans les différentes zones A , B et C pour une énergie E telle que présentée sur la figure ($mc^2 < E < 2mc^2$), nous avons

- Dans la région A : 2 solutions réelles pour p
- Dans la région B : $p^2 < 0$ et donc dans cet intervalle nous obtenons une onde évanescence, ce qui est attendu.
- Dans la région B : $p^2 > 0$ et donc dans cette zone deux ondes qui se propagent, ce qui est inattendu.

On peut calculer le courant

$$j_x = \frac{\hbar}{2mi}(\psi^* \partial_x \psi - \psi \partial_x \psi^*) = \frac{p + p^*}{2m} \psi^* \psi,$$

et nous constatons qu'effectivement dans les régions A et C le courant est non nul. Ce paradoxe est appelé **Paradoxe de Klein**.

L'équation aux valeurs propres nous donne pour l'énergie

$$(E - e\phi)^2 = p^2 c^2 + m^2 c^4 \Rightarrow E = e\phi \pm \sqrt{p^2 c^2 + m^2 c^4},$$

et ainsi nous avons des zones d'énergies autorisées de la forme présentée sur la FIGURE (1.1.b). Nous voyons alors que notre paradoxe n'en est pas réellement un dans la mesure où dans la zone C il existe effectivement des états d'énergie E permettant aux électrons se propageant dans la zone A de tunneler au travers de la zone B pour se retrouver dans la zone C. Le problème qui se pose alors est que la bande d'énergie inférieure n'est pas limitée par valeurs inférieures, et ainsi tous les électrons devraient s'y engouffrer ce qui conduirait à un collapse de l'univers. L'idée de Dirac pour contrer ce paradoxe est de supposer que cette bande inférieure qui est donc la mer de Dirac est remplie, de cette manière les électrons de la zone A ne peuvent plus se propager dans la zone C, ce qui évite les problèmes précédents.

Notons que ce résultat n'est pas une particularité de l'équation de Klein-Gordon mais se retrouve également dans l'équation de Dirac. Pour ce faire, on pourra par exemple considérer l'exemple de la transmission d'une particule de Dirac à travers une barrière de hauteur V . Le lecteur est fortement incité à résoudre ce problème à titre d'exercice. La correction est tirée de Itzykson et Zuber, Quantum field theory, figure à la fin du chapitre, Fig. 1.2

1.6.2 Zitterbewegung

Si l'on considère une particule classique non soumise à des potentiels extérieurs, celle-ci va évoluer linéairement dans l'espace en raison de la conservation de la quantité de mouvement et du moment angulaire. La question que nous nous posons ici est de savoir quelles sont les quantités conservées dans l'équation de Dirac dans le cas de la masse nulle, et donc de déterminer les quantités commutant avec le Hamiltonien de Dirac \hat{H}_D .

À deux dimensions, notre Hamiltonien de Dirac s'écrit

$$\hat{H}_D = c\alpha_x \hat{p}_x + c\alpha_y \hat{p}_y.$$

L'impulsion est conservée, mais qu'en est-il du moment cinétique? Nous avons selon l'axe \vec{u}_z

$$\begin{aligned} [\hat{l}_z, \hat{H}_D] &= [\hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x, c\alpha_x \hat{p}_x + c\alpha_y \hat{p}_y] \\ &= i\hbar(c\alpha_x \hat{p}_y - c\alpha_y \hat{p}_x) \\ &= i\hbar(\vec{\alpha} \wedge \vec{p})_z. \end{aligned}$$

Cette quantité n'est pas nulle, et par conséquent le moment cinétique n'est pas conservé. Cependant on peut montrer que le moment cinétique total $\hat{J} = \hat{l} + \hat{s}$ est conservé, où $\vec{s} = \frac{1}{2}\hbar\vec{\Sigma}$ est le spin de la particule avec

$$\vec{\Sigma} = \begin{pmatrix} \vec{\sigma} & 0 \\ 0 & \vec{\sigma} \end{pmatrix}.$$

On se pose alors la question de savoir quelle est la trajectoire d'une particule de Dirac. Pour répondre à cette question, nous devons résoudre l'équation

$$\begin{aligned} \frac{d\hat{r}}{dt} &= \frac{1}{i\hbar}[\hat{r}, \hat{H}_D] \\ &= \frac{1}{i\hbar}[\hat{r}, c\vec{\alpha} \cdot \hat{p} + \beta mc^2] \\ &= \frac{c}{i\hbar}[\hat{r}, \vec{\alpha} \cdot \hat{p}] = c\hat{\alpha} \end{aligned}$$

où \hat{r} est l'opérateur position.

Pour déterminer l'accélération calculons

$$\begin{aligned}\frac{d\alpha_x}{dt} &= \frac{1}{i\hbar}[\alpha_x, \hat{H}_D] \\ &= \frac{1}{i\hbar}\{\alpha_x, \hat{H}_D\} - \frac{2}{i\hbar}\hat{H}_D\alpha_x \\ &= \frac{2c}{i\hbar}p_x - \frac{2}{i\hbar}\hat{H}_D\alpha_x,\end{aligned}$$

et donc en définitive

$$\frac{d\hat{\alpha}_x}{dt} + \frac{2}{i\hbar}\hat{H}_D\alpha_x = 2\frac{c\hat{p}_x}{i\hbar},$$

ce qui nous donne pour la position l'équation différentielle du second ordre

$$\frac{d\hat{x}}{dt} = c\alpha_x(t) = c^2\hat{p}_x\hat{H}_D^{-1} + e^{\frac{2i\hat{H}_Dt}{\hbar}}(c\alpha_x(0) - c^2\hat{p}_x\hat{H}_D^{-1}).$$

Le premier terme en $c^2\hat{p}_x\hat{H}_D^{-1}$ correspond à la vélocité selon x d'une particule d'impulsion \hat{p}_x et d'énergie E . Il s'agit donc du terme classique attendu. Par contre le second terme est nouveau. Nous sommes en présence d'un terme d'oscillation $e^{\frac{2i\hat{H}_Dt}{\hbar}}$. Ce terme engendre pour l'évolution de $\hat{x}(t)$ des oscillations de la trajectoire. Ainsi le non-conservation du moment angulaire orbital entraîne des déviations autour de la trajectoire rectiligne. On peut effectuer l'intégration pour obtenir la trajectoire :

$$\hat{x} = \hat{x}_0 + c^2\hat{p}_x\hat{H}_D^{-1}t - \frac{1}{2}i\hbar\hat{H}_D^{-1}(c\alpha_x(t) - c^2\hat{p}_x\hat{H}_D^{-1}).$$

Quand bien même cela n'est pas apparent, cette expression est hermitique. Cette expression montre que se superpose à la trajectoire rectiligne une oscillation d'amplitude $\mathcal{O}(\hbar c/E)$ et de fréquence $2E/\hbar$. Ces oscillations furent reconnues pour la première fois par Schroedinger qui les nomma **zitterbewegung**.

62 QUANTUM FIELD THEORY

we compute as above the normalization condition

$$\int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \frac{m}{E} \sum_{\alpha} (|b(p, \alpha)|^2 + |d(p, \alpha)|^2) = 1 \quad (2-59)$$

and, with the notation $\tilde{p} = (p^0, -\mathbf{p})$, the total current is

$$\begin{aligned} J^i(t) = & \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \frac{m}{E} \left\{ \frac{p^i}{E} \sum_{\alpha} [|b(p, \alpha)|^2 + |d(p, \alpha)|^2] \right. \\ & + i \sum_{\alpha\alpha'} [b^*(\tilde{p}, \alpha) d^*(p, \alpha') e^{2iEt} \bar{u}^{(\alpha)}(\tilde{p}) \sigma^{i0} v^{(\alpha')}(p) \\ & \left. - b(\tilde{p}, \alpha) d(p, \alpha') e^{-2iEt} \bar{v}^{(\alpha')}(p) \sigma^{i0} u^{(\alpha)}(\tilde{p}) \right\} \quad (2-60) \end{aligned}$$

It is now time dependent. Besides the group velocity term, there is a real, oscillating term. The frequency of these oscillations is very high—larger than

$$2m \frac{c^2}{\hbar} \simeq 2 \times 10^{21} \text{ s}^{-1}$$

This phenomenon, traditionally called zitterbewegung, is an example of the difficulties due to the negative energy states in the framework of a one-particle theory.

A more striking manifestation is the famous Klein paradox. Let us idealize the localization process by a square potential barrier of height V in the half space $z \equiv x^3 > 0$ (Fig. 2-1). Consider now in the $z < 0$ half space an incident positive energy plane wave of momentum $k > 0$ along the z axis:

$$\psi_{\text{inc}}(z) = e^{ikz} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ k \\ E+m \\ 0 \end{pmatrix} \quad (\text{spin-up along the } z \text{ axis})$$

The reflected wave has the form

$$\psi_{\text{ref}}(z) = a e^{-ikz} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ -k \\ E+m \\ 0 \end{pmatrix} + b e^{-ikz} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ k \\ E+m \end{pmatrix}$$

(superposition of spin-up and spin-down positive energy solutions). In the $z > 0$ half space, i.e., in the presence of the constant potential V , the transmitted wave has a similar form:

$$\psi_{\text{trans}}(z) = c e^{iqz} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ q \\ E-V+m \\ 0 \end{pmatrix} + d e^{-iqz} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ -q \\ E-V+m \end{pmatrix}$$

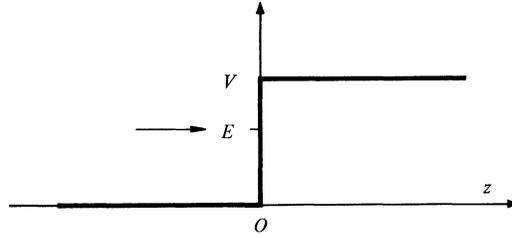


Figure 2-1 Klein's paradox in a square potential.

with an effective momentum q of

$$q = [(E - V)^2 - m^2]^{1/2}$$

Writing down the continuity of the solution at $z = 0$,

$$\psi(z) = \theta(-z)[\psi_{\text{inc}}(z) + \psi_{\text{ref}}(z)] + \theta(z)\psi_{\text{trans}}(z)$$

determines the coefficients a, \dots, d :

$$b = d = 0 \quad (\text{no spin-flip})$$

$$1 + a = c$$

$$1 - a = rc \quad \text{where } r \equiv \frac{q}{k} \frac{E + m}{E - V + m}$$

As long as $|E - V| < m$, q is imaginary and the transmitted wave decays exponentially; beyond a few Compton wavelengths, it is negligible. If we increase V so as to restrict this penetration region, the transmitted wave becomes oscillatory when $V \geq E + m$.

The computation of the transmitted, reflected, and incident currents yields

$$\frac{j_{\text{trans}}}{j_{\text{inc}}} = \frac{4r}{(1+r)^2} \quad \frac{j_{\text{ref}}}{j_{\text{inc}}} = \left(\frac{1-r}{1+r}\right)^2 = 1 - \frac{j_{\text{trans}}}{j_{\text{inc}}}$$

The conservation of probabilities does indeed look satisfied:

$$j_{\text{inc}} = j_{\text{trans}} + j_{\text{ref}}$$

Unfortunately, since $r < 0$, the reflected flux is larger than the incident one! We are again in trouble when we try to localize the particle within a distance of the order of the Compton wavelength.

In spite of these difficulties, the Dirac equation and its one-particle interpretation are very useful and physically sensible as long as we consider external forces which are slowly varying on a scale of a few Compton wavelengths. They provide us with the first relativistic corrections to the Schrödinger picture. This is what we are going to explore at length in the next sections, before returning to a deeper investigation of the meaning of negative energy states. We now realize that the difficulties which led us to disregard the Klein-Gordon equation have not been really solved. Even though we shall pursue this discussion in the framework of the spin $\frac{1}{2}$ theory because of its important physical implications, we could as well concern ourselves with the scalar case within the same range of validity. This is another instance where important physical theories were constructed for what seems afterwards to be unconvincing motivations.

Chapitre 2

Graphène et équation de Dirac

2.1 Modèle de liaisons fortes

Le graphène est un matériau bi-dimensionnel formé d'atomes de carbones dont l'ordonnancement se fait sous la forme d'un réseau en nid d'abeille de paramètre de maille $a \approx 0.142\text{nm}$. Le nombre d'atomes par maille élémentaire est donc de 2. Les vecteurs de base de ce réseau sont notés $\vec{\delta}_1$, $\vec{\delta}_2$ et $\vec{\delta}_3$. Le réseau hexagonal n'est pas un réseau de Bravais. Néanmoins, on peut le définir comme deux sous-réseaux triangulaires entrelacés, A et B , composés de la moitié des atomes (Cf. FIGURE (2.1)). Les vecteurs de base de ce nouveau réseau sont notés \vec{a}_1 , \vec{a}_2 et \vec{a}_3 . Dans un système de coordonnées cartésiennes plan (\vec{e}_x, \vec{e}_y) , l'ensemble de ces vecteurs sont donnés par

$$\begin{aligned}\vec{a}_1 &= \sqrt{3}a\vec{e}_x \\ \vec{a}_2 &= \frac{a}{2}(\sqrt{3}\vec{e}_x + 3\vec{e}_y) \\ \vec{a}_3 &= \frac{1}{2}(\vec{a}_2 - \vec{a}_1).\end{aligned}$$

et

$$\begin{aligned}\vec{\delta}_{1,2} &= \frac{a}{2}(\pm\sqrt{3}\vec{e}_x + \vec{e}_y) \\ \vec{\delta}_3 &= -a\vec{e}_y.\end{aligned}$$

Nous allons décrire le graphène dans le cadre d'un modèle de liaisons fortes. On décrit alors le système en autorisant le saut des électrons entre différents sites du réseau avec une amplitude $t \approx 2.7\text{eV}$. Nous nous limiterons dans un premier temps aux plus proches voisins. Le Hamiltonien du système s'écrit alors de la manière suivante

$$\hat{H}_0 = t \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_j, \quad (2.1)$$

la sommation portant sur les plus proches voisins. Ce Hamiltonien peut encore s'écrire en sommant sur les vecteurs \vec{r}_A du sous-réseau A comme

$$\hat{H}_0 = t \sum_{\vec{r}_A} \sum_{\alpha=1,2,3} \left[\hat{c}_B^\dagger(\vec{r}_A + \vec{\delta}_\alpha) \hat{c}_A(\vec{r}_A) + h.c. \right].$$

Notons au passage qu'il est possible d'inclure également un terme de saut t' prenant en compte les interactions entre seconds voisins, cependant il s'avère que $|t'| \approx 0.2\text{eV} \ll t$. Nous négligerons donc ce terme ici (concrètement il reviendra dans une limite de basse énergie à un décalage du niveau de Fermi, et ainsi un ajustement adéquat du potentiel chimique permettra de se ramener au cas où $t' = 0$).

Il faut alors diagonaliser ce Hamiltonien pour obtenir la relation de dispersion de ce système. Pour ce faire, passons dans l'espace de Fourier grâce à la relation

$$\hat{c}_A(\vec{r}_i) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}_i} \hat{c}_A(\vec{k}). \quad (2.2)$$

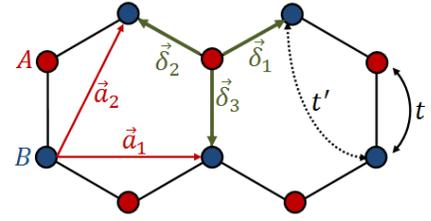


FIGURE 2.1 – Structure du graphène et sous-réseau.

Réintroduisant cette expression dans le Hamiltonien (2.1), on obtient alors en utilisant la relation $\sum_{\vec{r}_i} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}_i} = N\delta_{\vec{k},\vec{0}}$

$$\hat{H}_0 = t \sum_{\vec{k}} \left[\gamma(\vec{k}) \hat{c}_B^\dagger(\vec{k}) \hat{c}_A(\vec{k}) + \text{h.c.} \right],$$

où $\gamma(\vec{k}) = \sum_{\alpha} e^{i\vec{\delta}_\alpha \cdot \vec{k}}$, soit en effectuant le calcul en prenant l'expression explicite des vecteurs $\vec{\delta}_\alpha$

$$\gamma(\vec{k}) = 2e^{ik_y \frac{a}{2}} \cos\left(\frac{a\sqrt{3}k_x}{2}\right) + e^{-ik_y a}. \quad (2.3)$$

Le Hamiltonien peut encore se mettre sous la forme d'un produit de matrices et de vecteurs

$$\hat{H} = t \sum_{\vec{k}} \begin{pmatrix} \hat{c}_A^\dagger & \hat{c}_B^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \gamma^*(\vec{k}) \\ \gamma(\vec{k}) & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{c}_A(\vec{k}) \\ \hat{c}_B(\vec{k}) \end{pmatrix}.$$

La relation de dispersion sera alors donnée en diagonalisant la matrice contenue dans l'expression ci-dessus, et l'on trouve alors que

$$E_{\vec{k}} = \pm t |\gamma(\vec{k})|. \quad (2.4)$$

Cette résolution est due à Wallace et a été proposée en 1947. La relation de dispersion dans la première zone de Brillouin est représentée sur la figure (2.2.a). Le spectre est symétrique autour de l'énergie nulle. Le signe + correspond à la bande de conduction et le signe - à la bande de valence.

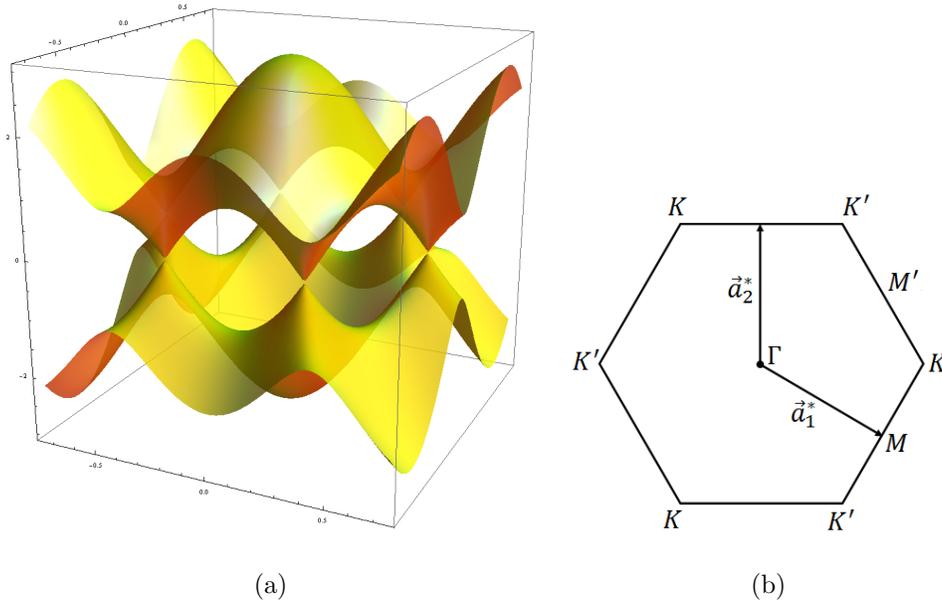


FIGURE 2.2 – (a) Relation de Dispersion du graphène dans le modèle des liaisons fortes. (b) Première zone de Brillouin du graphène.

Si l'on avait pris en compte les termes de seconds voisins, la nouvelle dispersion de relation s'écrit

$$E_{\vec{k}} = \pm t |\gamma(\vec{k})|' - 2t' \sum_{i=1}^3 \cos(\vec{k}\vec{a}_i) \quad (2.5)$$

Le terme de saut entre seconds voisins brise la symétrie particule-trou du spectre mais ne modifie pas la présence de points où les deux bandes se touchent. La question est alors à quelle points de la zone de Brillouin correspond le niveau de Fermi, ce qui revient donc à résoudre l'équation $\gamma(\vec{k}) = 0$. Dans l'espace réciproque, les vecteurs conjugués de \vec{a}_1 et \vec{a}_2 sont donnés par

$$\begin{aligned} \vec{a}_1^* &= \frac{2\pi}{3} \left(\vec{e}_x - \frac{\vec{e}_y}{\sqrt{3}} \right) \\ \vec{a}_2^* &= \frac{4}{3} \frac{\pi}{a} \vec{e}_y \end{aligned}$$

vérifiant donc la relation

$$\vec{a}_i \cdot \vec{a}_j^* = 2\pi\delta_{ij}.$$

L'équation $\gamma(\vec{k}) = 0$ est vérifiées pour deux points inéquivalents de la zone de Brillouin. Ceux-ci sont notés K et K' (Cf. FIGURE (2.2.b)) et leur position est donnée par

$$\vec{K} = \frac{4\pi}{3\sqrt{3}a} \vec{e}_x \quad (2.6)$$

$$\vec{K}' = -\frac{4\pi}{3\sqrt{3}a} \vec{e}_x. \quad (2.7)$$

Ces deux solutions de $\gamma(\vec{k}) = 0$ définissent donc deux points inéquivalents appelés points de Dirac. Autour de ces points le spectre E_k peut être approximé par une dispersion linéaire formant ainsi des cônes de Dirac aux coins de la première zone de Brillouin. Pour linéariser ce spectre, posons le vecteur $\vec{k} = \vec{K} + \vec{q}$ où \vec{K} est le vecteur joignant le centre de la zone de Brillouin à l'un des points de Dirac et où \vec{q} est donc un vecteur que l'on fera varier autour de $\vec{q} = \vec{0}$. L'énergie s'écrit alors de la manière suivante autour des points de Dirac

$$E_{\pm}(\vec{k}) = \pm v_F q + \mathcal{O}\left(\left|\frac{q}{K}\right|^2\right). \quad (2.8)$$

v_F est la vitesse de Fermi définie comme la norme de la dérivée par rapport à k de $\gamma(k)$ aux points de Dirac

$$v_F = \frac{1}{\hbar} \left| \frac{\partial \gamma(\vec{k})}{\partial k} \right|_K \simeq \frac{3at}{2\hbar}. \quad (2.9)$$

L'ordre de grandeur de cette vitesse est de $10^6 m.s^{-1}$ et correspond donc à 1/300 de la vitesse de la lumière.

Si l'on avait retenu les termes de saut entre second voisins, le spectre de basse énergie s'écrit,

$$E_{\pm}(\vec{k}) = 3t' \pm v_F q - \left(\frac{9t'^2 a^2}{4} \pm \frac{3t^2 a^2}{8} \sin(3\theta_q) \right) + \mathcal{O}\left(\left|\frac{q}{K}\right|^3\right), \quad (2.10)$$

où $\theta_q = \arctan(q_x/q_y)$. Si l'on se restreint aux termes linéaires en q , on voit que le seul effet du terme de second voisins est de briser la symétrie particule-trou. Néanmoins, la constante $3t'$ ne change pas l'allure du spectre de basse énergie et pourrait être absorbée par une redéfinition du potentiel chimique. Notons néanmoins qu'à plus haute énergie, la présence du terme en $\sin(3\theta_q)$ a pour conséquence une symétrie de rotation d'angle $2\pi/3$ supplémentaire. Ceci explique la déformation des cônes circulaires en cônes "triangulaires" à plus haute énergie.

2.2 Théorie de basse énergie

La théorie de basse énergie se situe donc au voisinage du niveau de Fermi, soit dans l'espace réciproque autour de l'un des deux points inéquivalents K ou K' . Nous nous situons donc cet espace grâce au vecteur $\vec{k} = \pm \vec{K} + \vec{q}$. On peut réécrire ce vecteur de manière plus générique en posant $\xi = \pm 1$,

$$\vec{k} = \xi \vec{K} + \vec{q}, \quad (2.11)$$

les valeurs $\xi = 1$ correspondront donc au point K et $\xi = -1$ au point K' .

La linéarisation de $\gamma(\vec{k})$ autour de \vec{K} nous donne alors

$$\gamma(\vec{k}) = -\frac{3}{2} at (\pm q_x + i q_y),$$

ce qui nous donne pour le Hamiltonien de basse énergie (noté $\hat{H}_0^{(\xi K)}$)

$$\begin{aligned} \hat{H}_0^{\xi K} &= \hbar v_F \sum_k \begin{pmatrix} \hat{c}_{A,\xi K}^\dagger & \hat{c}_{B,\xi K}^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & \xi q_x - i q_y \\ \xi q_x + i q_y & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{c}_{A,\xi K}(\vec{k}) \\ \hat{c}_{B,\xi K}(\vec{k}) \end{pmatrix} \\ &= \hbar v_F \xi \sum_k \begin{pmatrix} \hat{c}_{A,\xi K}^\dagger & \hat{c}_{B,\xi K}^\dagger \end{pmatrix} (q_x \sigma_x + \xi q_y \sigma_y) \begin{pmatrix} \hat{c}_{A,\xi K}(\vec{k}) \\ \hat{c}_{B,\xi K}(\vec{k}) \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Le fait d'avoir deux points de Dirac inéquivalents conduit à introduire la notation suivante

$$\hat{c}^\dagger(\vec{q}) = (\hat{c}_{A,\vec{K}}^\dagger \quad \hat{c}_{B,\vec{K}}^\dagger \quad \hat{c}_{A,-\vec{K}}^\dagger \quad \hat{c}_{B,-\vec{K}}^\dagger), \quad (2.12)$$

permettant d'écrire le Hamiltonien de basse énergie sous la forme

$$\hat{H}_0 = \sum_{\vec{q}} \sum_{a=1}^4 \hat{c}_a^\dagger(\vec{q}) \hat{\mathcal{H}}_0(\vec{q}) \hat{c}_a(\vec{q}), \quad (2.13)$$

où le Hamiltonien $\hat{\mathcal{H}}_0(\vec{q})$ s'écrit

$$\hat{\mathcal{H}}_0(\vec{q}) = v_F(q_x \sigma_x \tau_z + q_y \sigma_y).$$

On retrouve alors le Hamiltonien de Dirac bi-dimensionnel pour une masse nulle. Dans l'expression de celui-ci la matrice 2×2 , τ_z correspond à l'indice de vallée, ici $\pm K$. Il joue le rôle d'un pseudo-spin.

Notre Hamiltonien est donc une matrice 4×4 . Il ne faut pas confondre ou mélanger les indices de sous réseaux (A et B) associés aux matrices de Pauli $\vec{\sigma}$ avec l'indice de vallée associé aux matrices de Pauli $\vec{\tau}$.

Une autre représentation est possible en posant cette fois

$$\tilde{c}^\dagger(\vec{q}) = (\tilde{c}_{A,K}^\dagger \quad \tilde{c}_{B,K}^\dagger \quad \tilde{c}_{A,-K}^\dagger \quad \tilde{c}_{B,-K}^\dagger),$$

permettant dans ce cas l'écriture du Hamiltonien H_0 sous une forme identique à (2.13) en remplaçant \hat{c} par \tilde{c} et $\hat{\mathcal{H}}_0$ par

$$\hat{\mathcal{H}}_0(\vec{q}) = \hbar v_F \tau_z \otimes \vec{q} \cdot \vec{\sigma}.$$

Le hamiltonien $\hat{\mathcal{H}}_0$ a donc à basse énergie la structure d'un Hamiltonien de Dirac. Néanmoins, il est important de souligner que cette structure découle naturellement du développement de la relation de dispersion autour de points spéciaux de la première zone de Brillouin et non, contrairement à l'équation de Dirac, de symétries fondamentales comme l'invariance de Lorentz ou de principes fondamentaux. De plus nous n'avons pas de soucis avec les états d'énergies négatives qui correspondent aux états de valence.

Combien de cônes de Dirac inéquivalents possède le graphène ? Dans le Hamiltonien de liaison forte, nous avons complètement omis le spin des électrons qui ne joue aucun rôle (il faudrait des champs magnétiques gigantesques pour lever la dégénérescence de spin). Le spectre est donc dégénéré en spin. Ce ne sont plus 2 cônes de Dirac, mais 4 qui apparaissent, ceux-ci étant dégénérés en raison de la non dépendance de \hat{H}_0 dans le spin des électrons. Si l'on voulait restaurer le spin dans le Hamiltonien, il faudrait alors introduire des vecteurs à 8 composantes. Mais comme le spin ne joue aucun rôle, cela s'avère inutile et ne ferait qu'alourdir les notations.

2.3 Symétries microscopiques à basse énergie

2.3.1 Symétrie par renversement du temps

Si nous décomposons la fonction d'onde associée au sous-réseau A sous la forme d'onde plane

$$\psi(\vec{r}_A) \simeq \varphi_{A,+K} e^{i\vec{K} \cdot \vec{r}_A} + \varphi_{A,-K} e^{-i\vec{K} \cdot \vec{r}_A},$$

l'opération de renversement du temps appliquée sur cette décomposition nous donne l'expression complexe conjuguée

$$\psi(\vec{r}_A)^* \simeq \varphi_{A,+K}^* e^{-i\vec{K} \cdot \vec{r}_A} + \varphi_{A,-K}^* e^{i\vec{K} \cdot \vec{r}_A}.$$

Décomposons à présent les fonctions $\varphi_{A,\pm K}$ en modes de Fourier

$$\varphi_{A,\pm K}(\vec{r}) = \sum_{\vec{q}} u_{A,\pm K}(\vec{q}) e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}},$$

l'opération de renversement agit en conjuguant $u_{A,\pm K}$ et en prenant les points non équivalents dans la zone de Brillouin, tandis que \vec{q} deviendra son opposé, c'est-à-dire

$$\begin{array}{ccc} u_{A,\pm K} & \xrightarrow{R.T.} & u_{A,\mp K}^* \\ \vec{q} & \rightarrow & -\vec{q}. \end{array}$$

Finalement l'opération de renversement du temps effectue les opérations suivantes

- K devient $K' = -K$
- \vec{q} devient $-\vec{q}$
- Les quantités complexes doivent être prises conjuguées.

Si nous nous plaçons dans la représentation $(\hat{c}_{A,+K}^\dagger \quad \hat{c}_{B,+K}^\dagger \quad \hat{c}_{B,-K}^\dagger \quad \hat{c}_{A,-K}^\dagger)$, nous définissons l'opérateur de renversement du temps $\hat{\mathcal{T}}$ comme

$$\hat{\mathcal{T}} = \tau_x \hat{K}_c, \quad (2.14)$$

où \hat{K}_c est un opérateur de conjugaison complexe, conjuguant les amplitudes du spineur. Rappelons que τ_x est la première matrice de Pauli agissant dans l'espace des indices de vallée. Une propriété de cet opérateur est que (pour des fermions sans spin)

$$\hat{\mathcal{T}}^2 = 1.$$

On peut vérifier qu'agissant sur le Hamiltonien de Dirac $\hat{\mathcal{H}}_0(\vec{q})$, cet opérateur nous donne $\hat{\mathcal{H}}_0(-\vec{q})$.¹ Nous avons en effet $\hat{\mathcal{H}}_0(\vec{q}) = v_F(q_x \sigma_x \tau_z + q_y \sigma_y)$, et donc

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{T}} \hat{\mathcal{H}}_0(\vec{q}) \hat{\mathcal{T}}^{-1} &= \hat{\mathcal{T}} \hat{\mathcal{H}}_0(\vec{q}) \hat{\mathcal{T}} \\ &= \tau_x K_c v_F (q_x \sigma_x \tau_z + q_y \sigma_y) \tau_x K_c \\ &= v_F (q_x \sigma_x \tau_x \tau_z \tau_x - q_y \sigma_y) \end{aligned}$$

où nous avons utilisé que $K_c \tau_y K_c = -\tau_y$. Une des propriétés des matrices de Pauli est que $\tau_z \tau_x = i\tau_y$ et que $\tau_x \tau_y = i\tau_z$, ainsi

$$\hat{\mathcal{T}} \hat{\mathcal{H}}_0(\vec{q}) \hat{\mathcal{T}}^{-1} = v_F (-q_x \sigma_x \tau_z - q_y \sigma_y),$$

et nous obtenons donc bien que $\hat{\mathcal{H}}_0(\vec{q}) \xrightarrow{\hat{\mathcal{T}}} \hat{\mathcal{H}}_0(-\vec{q})$.

2.3.2 Symétrie d'inversion

Dans une symétrie d'inversion les sites A sont transformés dans les sites B tandis que \vec{k} devient $-\vec{k}$, ayant pour conséquence de transformer \vec{K} en $-\vec{K}$. Le mode $e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}}$ de la fonction d'onde dans la vallée ξK est alors changé en $e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}}$ dans la vallée $-\xi K$. On définit un opérateur $\hat{\mathcal{P}}$ comme

$$\hat{\mathcal{P}} = \sigma_x \tau_x \text{ (et } \vec{q} \rightarrow -\vec{q}\text{)}. \quad (2.15)$$

Comme précédemment, on peut vérifier que $\hat{\mathcal{P}} \hat{\mathcal{H}}_0 \hat{\mathcal{P}}^{-1} = \hat{\mathcal{H}}_0(-\vec{q})$. Pour ce faire, il suffit de remarquer que $\tau_x \tau_z \tau_x = -\tau_z$, que $\sigma_x \sigma_y \sigma_x = -\sigma_y$ et que $\sigma_x^3 = \sigma_x$. Ainsi un signe $-$ apparaît dans chacun des deux termes du Hamiltonien de Dirac, et on retrouve le résultat recherché. Comme précédemment, on aurait pu définir un autre opérateur $\hat{\mathcal{P}}' = \sigma_x \tau_x \mathcal{Q}$ où \mathcal{Q} change \vec{q} en $-\vec{q}$, auquel cas $\hat{\mathcal{H}}_0$ serait totalement invariant sous cette transformation.

2.3.3 Remarques sur la chiralité

En physique des hautes énergies, la chiralité d'une particule est définie par la direction du spin $\hat{\sigma}_s$ par rapport à la direction de propagation de la particule $\hat{q}/|q|$

$$\hat{\eta}_q = \frac{\hat{q} \cdot \hat{\sigma}_s}{|q|}. \quad (2.16)$$

Lorsque la masse de la particule est nulle, $\hat{\eta}_q$ commute avec le Hamiltonien, la chiralité est alors un bon nombre quantique et doit être conservée. Dans la nature cette notion de chiralité s'applique aux neutrinos : tous les neutrinos ont ainsi une hélicité gauche tandis que tous les anti-neutrinos ont une hélicité droite.

Dans le cas du graphène, nous avons vu que moyennant un changement de base, nous pouvions écrire

$$\hat{\mathcal{H}}_0 = v_F (\tau_z \otimes \hat{q} \cdot \vec{\sigma}),$$

Transposons les idées ci-dessus au graphène. Nous introduisons donc un opérateur d'hélicité $\hat{\eta}_q = \frac{\hat{q} \cdot \hat{\sigma}}{|q|}$ où le vrai spin est remplacé par le pseudospin σ qui représente l'indice de sous-réseau. La chiralité nous permet alors de définir le Hamiltonien comme

$$\hat{\mathcal{H}}_0 = v_F |q| (\tau^z \otimes \hat{\eta}_q).$$

1. On aurait pu définir un opérateur K_c qui effectue la conjugaison complexe et en plus change \vec{q} en $-\vec{q}$, auquel cas $\hat{\mathcal{H}}_0(\vec{q})$ serait totalement inchangé sous l'action de ce nouvel opérateur $\hat{\mathcal{T}}$.

En notant $\xi (\pm 1)$ les valeurs propres de τ_z , nous obtenons alors un Hamiltonien restreint à l'indice de vallée ξK de la forme

$$\hat{\mathcal{H}}_0^{\xi K} = \xi v_F |q| \hat{\eta}_q.$$

Si l'on définit l'indice de bande $\lambda = \pm 1$ ($\lambda = +1$ pour la bande de conduction et -1 pour la bande de valence) et $\eta = \pm 1$ les valeurs propres de l'opérateur $\hat{\eta}$, nous obtenons ainsi la relation

$$\lambda = \xi \eta. \quad (2.17)$$

Il s'agit donc d'une contrainte entre l'indice de vallée, l'indice de bande et la chiralité. Conséquence importante : nous avons absence de rétro-diffusion sur des impuretés ne mélangeant pas les indices de vallée. En effet, la rétro-diffusion change \vec{q} en $-\vec{q}$ donc η_q en $-\eta_q$. Pour que cela soit possible, la rétro-diffusion nécessiterait le passage de K en $K' = -K$ ce qui est interdit si l'impureté ne mélange pas l'indice de vallée.

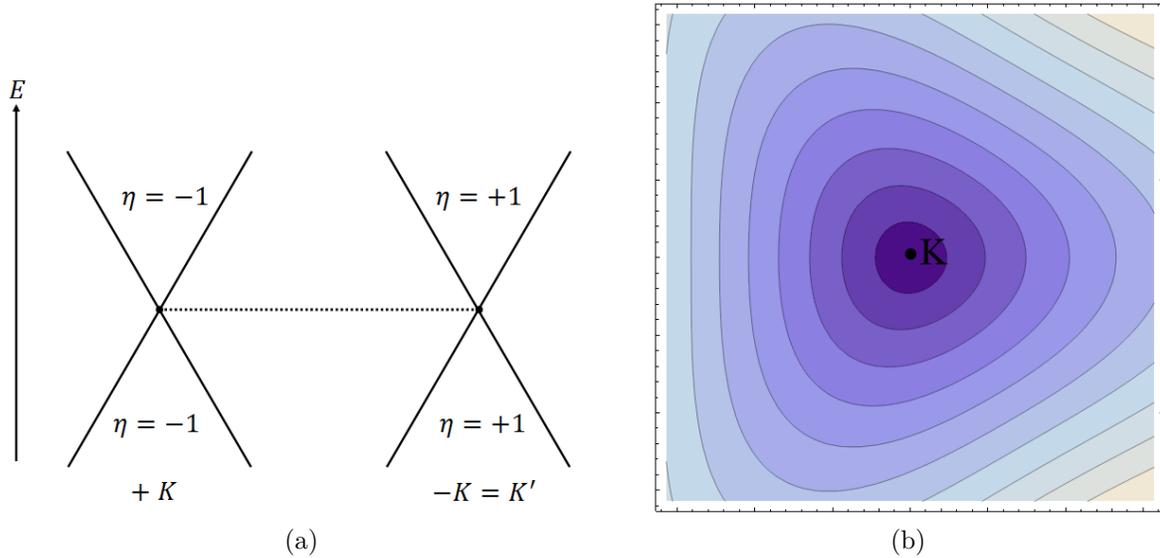


FIGURE 2.3 – (a) Chiralité et indices de vallée pour deux cônes de Dirac inéquivalents. (b) Lignes de niveaux autour d'un des points de Dirac dans le cas où les contributions d'ordre q^3 ont été prises en compte ainsi que les corrections des seconds voisins.

2.4 Au delà de l'équation de Dirac

Nous nous sommes restreints jusqu'ici aux premiers voisins et aux termes linéaires en \vec{q} dans la relation de dispersion du graphène. Si nous prenons à présent en compte un coefficient de saut $t' = t_{nmn}$ est l'amplitude de saut aux seconds voisins, nous avons pour γ_q (Cf. eq.(2.3)) pour les contributions liées uniquement aux premiers voisins aux ordres supérieurs en q

$$\gamma_q^\xi = \xi \hbar v_F \left[(q_x + i\xi q_y) - \xi \frac{a}{4} (q_x - i\xi q_y)^2 - \frac{a^2}{8} |q|^2 (q_x + i\xi q_y) \right],$$

Si l'on prend en compte les termes de saut de premiers et second voisins et en se limitant aux corrections d'ordre $O(q^2)$ autour des points de Dirac, la relation de dispersion devient

$$\varepsilon_\lambda^\xi(q) = \frac{9}{4} a^2 (t')^2 |q|^2 + \lambda \hbar v_F |q| \left[1 - \xi \frac{|q|a}{4} \cos(3\varphi_q) \right],$$

où φ_q est l'angle que fait \vec{q} par rapport à la direction \vec{u}_x , c'est-à-dire

$$\begin{aligned} q_x &= |q| \cos \varphi_q \\ q_y &= |q| \sin \varphi_q. \end{aligned}$$

L'introduction de $t' = t_{nnn}$ brise donc la symétrie particule-trou pour un cône de Dirac. Sur la figure (2.3.b) sont représentées les lignes de niveaux autour d'un des points de Dirac lorsque les corrections précédentes sont prises en compte.

2.5 Paradoxe de Klein dans le graphène

Je renvoie sur la présentation ppt pour cette partie (en ligne sur le site web du cours)et surtout sur l'article de P.E. Allain et J.-N Fuchs, Eur. Phys J. 83, 301-317 (2011) (également en ligne sur le site web).

2.6 Graphène sous champ magnétique

Nous nous replaçons dans le cas où la relation de dispersion pour le graphène est linéaire, c'est-à-dire

$$E_{\pm}(q) = \pm v_F q + \mathcal{O}(q^2).$$

Pour décrire les électrons en présence de champ nous devons remplacer l'impulsion \vec{p} par $\vec{\pi} = \vec{p} + e\vec{A}$. Le Hamiltonien de Dirac se met alors sous la forme suivante (en négligeant tout effet Zeeman)

$$\hat{\mathcal{H}}_{0,B}^{\xi} \simeq \xi v_F (\hat{\pi}_x \sigma_x + \hat{\pi}_y \sigma_y).$$

Nous choisissons la jauge suivante qui est la jauge de Landau

$$\begin{aligned} A_x &= -By, \\ A_y &= 0. \end{aligned}$$

Calculons alors la relation de commutation entre $\hat{\pi}_x$ et $\hat{\pi}_y$

$$\begin{aligned} [\hat{\pi}_x, \hat{\pi}_y] &= [\hat{p}_x + eA_x, \hat{p}_y + eA_y] \\ &= -ie\hbar B \\ &= -\frac{\hbar^2}{l_B^2}, \end{aligned}$$

où nous avons introduit la longueur magnétique $l_B = \sqrt{\frac{\hbar}{eB}}$.² De l'expression de la longueur magnétique on peut estimer l'ordre de grandeur de l'énergie, celle-ci sera de l'ordre de $\frac{\hbar v_F}{l_B}$.

Introduisons à présent les opérateurs d'annihilation et de création \hat{a} et \hat{a}^\dagger définis par

$$\hat{a} = \frac{l_B}{\sqrt{2\hbar}} (\hat{\pi}_x - i\hat{\pi}_y) \quad \hat{a}^\dagger = \frac{l_B}{\sqrt{2\hbar}} (\hat{\pi}_x + i\hat{\pi}_y) \quad (2.18)$$

vérifiant la relation de commutation $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1$. On peut inverser les relations (2.18) ce qui nous donne

$$\hat{\pi}_x = \frac{\hbar}{\sqrt{2}l_B} (\hat{a} + \hat{a}^\dagger) \quad \hat{\pi}_y = \frac{\hbar}{\sqrt{2}l_B} (\hat{a}^\dagger - \hat{a}). \quad (2.19)$$

Le Hamiltonien se met alors sous la forme suivante

$$\hat{\mathcal{H}}_{0,B}^{\xi} = \xi \sqrt{2} \frac{\hbar v_F}{l_B} \begin{pmatrix} 0 & \hat{a} \\ \hat{a}^\dagger & 0 \end{pmatrix}.$$

On définit alors la pulsation cyclotron comme $\omega_B = \sqrt{2}v_F/l_B$. Nous allons donc chercher à diagonaliser ce Hamiltonien. Pour ce faire nous posons $\psi_n = \begin{pmatrix} u_n \\ v_n \end{pmatrix}$, alors l'équation aux valeurs propres

$$\hat{\mathcal{H}}_{0,B}^{\xi} \psi_n = \varepsilon_n \psi_n,$$

² On peut vérifier aisément que cette quantité a bien la dimension d'une longueur, en effet si l'on considère la force de Lorentz $\vec{F} = e\vec{v} \wedge \vec{B}$, la force étant dimensionnellement homogène à une énergie divisée par une longueur, nous obtenons donc qu'une longueur est dimensionnellement donnée par $l^2 = ET/eB$, où T est un temps. La constante de Planck est homogène à ET , et nous retrouvons donc bien $l^2 = \hbar/eB$.

nous donne les deux équations

$$\begin{aligned}\xi\hbar\omega_B\hat{a}v_n &= \varepsilon_n u_n \\ \xi\hbar\omega_B\hat{a}^\dagger u_n &= \varepsilon_n v_n.\end{aligned}$$

A partir de ces deux équations, nous obtenons

$$(\xi\hbar\omega_B)^2\hat{a}^\dagger\hat{a}v_n = (\varepsilon_n)^2v_n,$$

L'opérateur $\hat{a}^\dagger\hat{a}$ est l'opérateur nombre dont les vecteurs propres sont $|n\rangle$ avec les valeurs propres associées n . Ainsi nous en déduisons l'expression de ε_n définissant les **niveaux de Landau** pour le graphène

$$\varepsilon_n = \pm\hbar\omega_B\sqrt{n} = \pm\frac{\hbar v_F}{l_B}\sqrt{2n} = \pm v_F\sqrt{2n\hbar eB}. \quad (2.20)$$

Il est important de contraster ce résultat avec les niveaux de Landau dans un gaz d'électrons bidimensionnel qui sont comme $\varepsilon_n^{2DEG} = (n + \frac{1}{2})\frac{eB}{m}$.

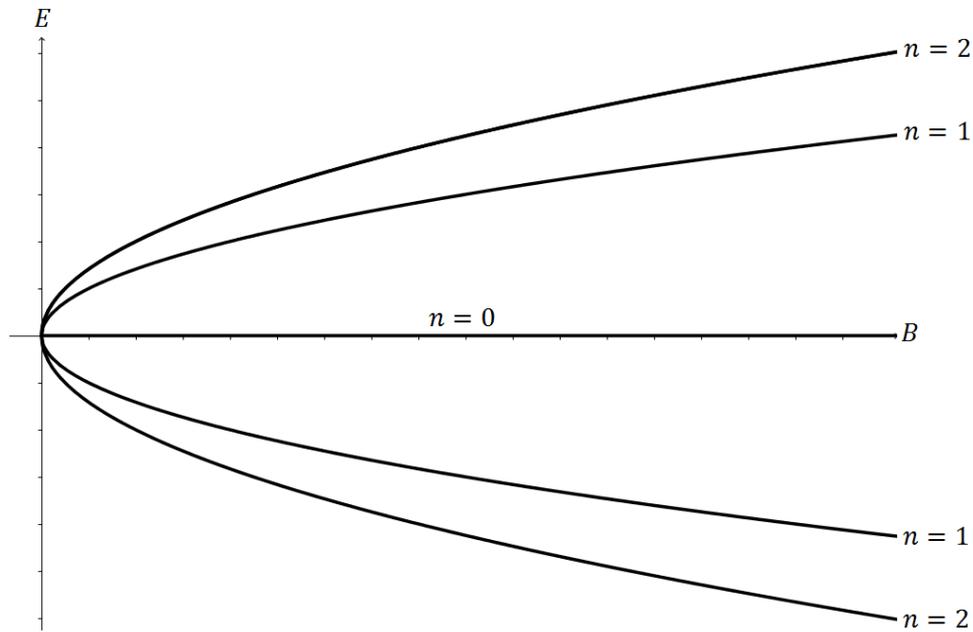


FIGURE 2.4 – Évolution des niveaux de Landau avec le champ magnétique B .

La première composante u_n de ψ_n est donc reliée à v_n par

$$u_n \propto \hat{a}v_n \propto |n-1\rangle,$$

ainsi pour $n \neq 0$, les vecteurs propres de $\hat{\mathcal{H}}_{0,B}^\xi$ sont donnés par

$$\psi_{\lambda,n \neq 0}^\xi = \begin{pmatrix} |n-1\rangle \\ \xi\lambda |n\rangle \end{pmatrix} \quad (2.21)$$

tandis que pour $n = 0$, $|n < 0\rangle$ n'étant pas défini, nous avons

$$\psi_{\lambda,n=0}^\xi = \begin{pmatrix} 0 \\ |n=0\rangle \end{pmatrix} \quad (2.22)$$

L'absence de gap pour $n = 0$ même pour $B \neq 0$ est directement reliée à des aspects topologiques qui seront explorés plus loin dans le cours, tandis que l'aspect spinoriel ressort dans les cas $n \neq 0$.

Ces propriétés ont pu être vérifiées expérimentalement notamment par spectroscopie tunnel dans le graphite par Andrei et al., Nature Physics 3, 623 (2007).

2.7 Fermions de Dirac massifs à 2D

L'idée des fermions de Dirac massifs est de briser les symétries de parité et temporelle sans imposer de champ magnétique comme dans le cas des niveaux de Landau. Nous présentons ci-dessous trois classes d'isolants de Dirac qui représentent les différentes manières de briser ces symétries. Nous verrons que l'isolant de Haldane qui brise la symétrie par renversement du temps à un statut particulier analogue à l'isolant de Hall quantique entier.

2.7.1 Isolant de Semenoff

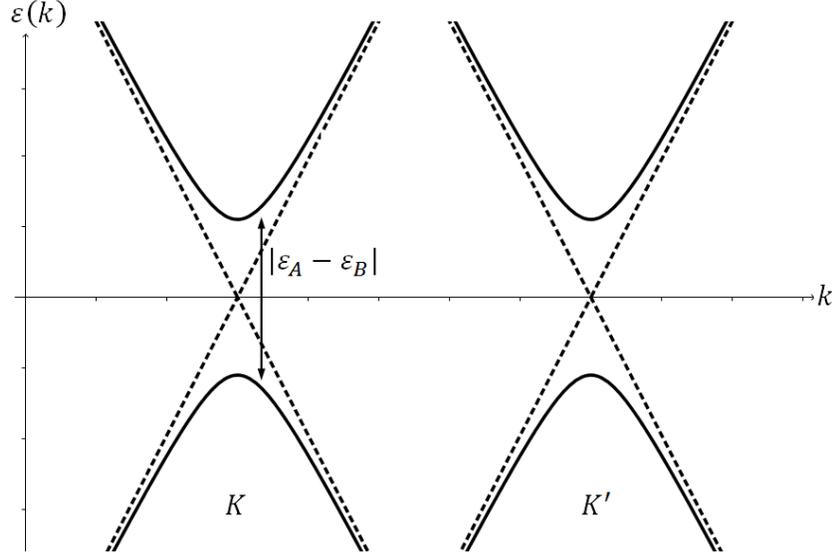


FIGURE 2.5 – Relation de dispersion autour des deux points inéquivalents sous l'effet du Hamiltonien de Semenoff.

En 1984, motivé par une réalisation en matière condensée de l'électrodynamique quantique à 2 + 1 dimensions et par la possibilité de détecter une anomalie chirale dans ce type de système, Semenoff [2] proposa d'ajouter au Hamiltonien de Dirac \hat{H}_0 un Hamiltonien \hat{H}_1 rendant inéquivalents les sites A et B du graphène. Pour ce faire, il écrit le Hamiltonien \hat{H}_1 sous la forme

$$\hat{H}_1 = \sum_{\vec{r}} \left(\varepsilon_A \hat{c}^\dagger(\vec{r}_A) \hat{c}(\vec{r}_A) + \varepsilon_B \hat{c}_B^\dagger(\vec{r}_B) \hat{c}_B(\vec{r}_B) \right). \quad (2.23)$$

En se plaçant dans le cadre de basse énergie notre Hamiltonien \hat{H}_0 prend la forme obtenue précédemment dans le cas du graphène

$$\hat{\mathcal{H}}_0 = v_F (q_x \sigma_x \tau_x + q_y \sigma_y),$$

tandis que $\hat{\mathcal{H}}_1$ se met sous la forme

$$\hat{\mathcal{H}}_1 = \varepsilon_0 \hat{1} + M_1 \sigma_z, \quad (2.24)$$

où $M_1 = \frac{\varepsilon_A - \varepsilon_B}{2}$ et $\varepsilon_0 = \frac{\varepsilon_A + \varepsilon_B}{2}$. Le terme $M_1 \sigma_z$ peut alors être vu comme un champ de type Zeeman pour le pseudo spin A ou B . Nous pouvons nous débarrasser du terme diagonal en posant ε_0 , ce qui sera atteint pratiquement par une redéfinition adéquate du potentiel chimique. Le Hamiltonien que nous devons alors considérer pour obtenir la relation de dispersion du système est donc à présent

$$\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}_0(q) + \hat{\mathcal{H}}_1(q).$$

Pour diagonaliser ce Hamiltonien, l'astuce consiste à l'élever au carré. De cette manière, nous obtenons que

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}}^2 &= \left(\hat{\mathcal{H}}_0(q) + \hat{\mathcal{H}}_1(q) \right)^2 \\ &= v_F^2 q^2 + M_1^2. \end{aligned}$$

La simplicité de cette relation provient des relations d'anticommuation entre les opérateurs σ et entre les opérateurs τ . En effet dans le terme $\hat{\mathcal{H}}_0^2$, seuls les carrés des éléments interviennent nous créant le terme q^2 , tandis que le double produit nous donne un terme du type $\{\sigma_x, \sigma_y\} = 0$. En ce qui concerne les termes croisés de la forme $\{\hat{\mathcal{H}}_0, \hat{\mathcal{H}}_1\}$, ceux-ci font intervenir le même type de relations d'anticommuation et s'annulent donc également. La relation de dispersion s'en déduit donc directement et nous obtenons

$$E(q) = \pm \sqrt{v_F^2 q^2 + M_1^2}. \quad (2.25)$$

Nous avons donc par ce processus de différenciation des énergies des sous-réseaux donné une masse M_1 au spectre de Dirac et ouvert un gap de taille $2|M_1| = |\varepsilon_A - \varepsilon_B|$. Cette relation de dispersion est représentée sur la figure (2.5).

Il est possible de vérifier entre autre qu'en utilisant la forme obtenue précédemment pour l'opérateur de parité (2.17), le Hamiltonien se voit affecter d'un signe $-$ par parité, cette symétrie étant donc brisée.

$$\hat{P}\hat{\mathcal{H}}_1\hat{P}^{-1} = -\hat{\mathcal{H}}_1.$$

Le matériau ainsi obtenu est appelé **isolant de Semenoff**. Le nitrure de Bore en offre une réalisation expérimentale.

2.7.2 Isolant de Haldane

La deuxième manière d'obtenir une équation de Dirac massive est de briser la symétrie de renversement du temps sans appliquer de champ magnétique global. Dans une cellule de notre réseau le flux total $\phi_{tot/cell} = 0$, cependant l'amplitude de saut entre deux seconds plus proches voisins les électrons acquiert une phase (Cf FIGURE (2.6)), l'amplitude de saut s'écrivant alors $t_2 e^{\pm i\varphi}$, le signe \pm dépendant du sous-réseau sur lequel ces sauts ont lieu (A ou B).

Nous considérons à présent le Hamiltonien \hat{H}_2 défini comme

$$\hat{H}_2 = t_2 \sum_{i=1}^3 \left\{ \sum_{\vec{r}_A} \hat{c}_A^\dagger(\vec{r}_A) \hat{c}_A(\vec{r}_A + \vec{b}_i) e^{-i\varphi} + \sum_{\vec{r}_B} \hat{c}_B^\dagger(\vec{r}_B) \hat{c}_B(\vec{r}_B + \vec{b}_i) e^{i\varphi} \right\}, \quad (2.26)$$

où les vecteurs \vec{b}_i sont définis à partir des vecteurs $\vec{\delta}_i$ (vecteurs de base de la cellule du graphène définis sur la figure (2.1)) comme

$$\begin{aligned} \vec{b}_1 &= \vec{\delta}_2 - \vec{\delta}_3, \\ \vec{b}_2 &= \vec{\delta}_3 - \vec{\delta}_1, \\ \vec{b}_3 &= \vec{\delta}_1 - \vec{\delta}_2. \end{aligned}$$

En passant dans l'espace réciproque, notre Hamiltonien se réécrit comme

$$\hat{H}_2(\vec{k}) = 2t_2 \cos \varphi \sum_{i=1}^3 \cos \vec{k} \cdot \vec{b}_i \hat{1} + 2t_2 \sin \varphi \sum_{i=1}^3 \sin \vec{k} \cdot \vec{b}_i \sigma_z.$$

Nous allons alors linéariser ce Hamiltonien au voisinage des points K et K' , et pour ce faire, nous pouvons vérifier que

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^3 \cos(\vec{K} \cdot \vec{b}_i) &= -\frac{3}{2} \\ \sum_{i=1}^3 \sin(\pm \vec{K} \cdot \vec{b}_i) &= \mp \frac{3}{2}. \end{aligned}$$

À basse énergie, notre Hamiltonien s'écrit donc

$$\hat{\mathcal{H}}_2^\xi(\vec{k}) = -3t_2 \cos \varphi \hat{1} - 3\sqrt{3}t_2 \sin \varphi \sigma_z \tau_z, \quad (2.27)$$

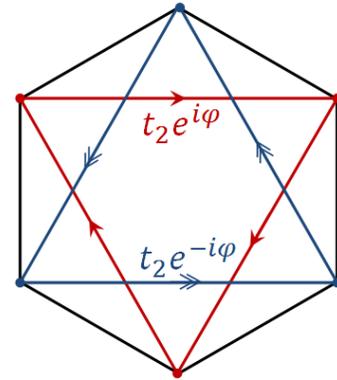


FIGURE 2.6 – Pour un isolant de Haldane l'amplitude de saut comporte un facteur de phase $e^{\pm i\varphi}$ dépendant du sous-réseau considéré.

l'indice de vallée ξ se retrouvant dans la matrice de Pauli τ_z .

Le terme diagonal peut comme précédemment être réabsorbé dans une redéfinition du potentiel chimique, et nous obtenons alors un spectre semblable au cas d'un isolant de Semenoff avec un gap $6\sqrt{3}t_2|\sin\varphi|$, à la différence près qu'ici le signe de la masse dépend de l'indice de vallée. Nous avons donc une inversion de bande (Cf. FIGURE (2.7)). On parle ici **d'isolant de Haldane**. Ainsi, en K' la bande ayant le même indice de bande que la bande de valence de K se retrouve être la bande de conduction, et *vice-versa*.

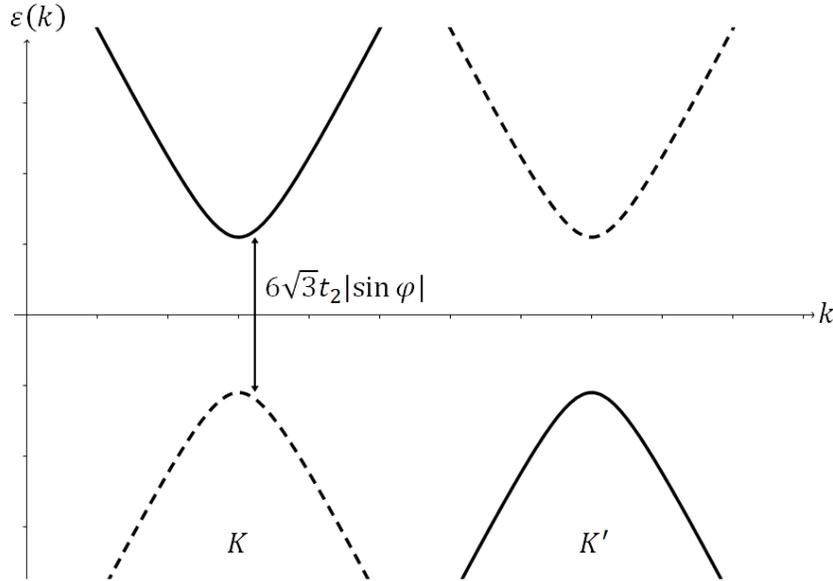


FIGURE 2.7 – Relation de dispersion à basse énergie autour de K et K' . Ici les bandes possédant le même indice de bande sont représentées avec le même type de trait.

On peut montrer qu'avec la forme (2.27) du Hamiltonien, celui-ci est invariant par parité ($\hat{\mathcal{P}}\hat{\mathcal{H}}_2\hat{\mathcal{P}}^{-1} = \hat{\mathcal{H}}_2$) tandis que la symétrie de renversement du temps est brisée ($\hat{\mathcal{T}}\hat{\mathcal{H}}_2\hat{\mathcal{T}}^{-1} = -\hat{\mathcal{H}}_2$), $\hat{\mathcal{H}}_2$ étant impair sous cette transformation.

Le modèle proposé initialement par Haldane [3] s'écrit $\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}_0 + \hat{\mathcal{H}}_1 + \hat{\mathcal{H}}_2$. Le terme en $\hat{\mathcal{H}}_1$ correspond à l'isolant de Semenoff et brise la symétrie de parité tandis que le terme en $\hat{\mathcal{H}}_2$ brise la symétrie par renversement du temps. Lorsque $\hat{\mathcal{H}}_1 = 0$, nous avons vu que $\hat{\mathcal{H}}_2$ donnait naissance à un isolant non-trivial appelé isolant de Chern ou effet Hall quantique anormal. On peut donc se demander ce qu'il en est lorsque $\hat{\mathcal{H}}_1 = 0$, et $\hat{\mathcal{H}}_1 = 0$ sont présents. Haldane a obtenu le diagramme de phase représenté sur la FIGURE (2.8) en fonction de la phase φ et de $M = \varepsilon_A - \varepsilon_B$.

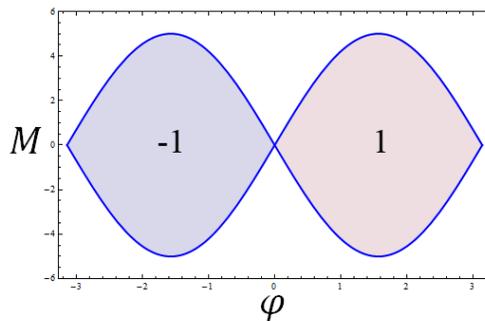


FIGURE 2.8 – Diagramme de phase du modèle de Haldane en fonction de la phase φ et de $M = \varepsilon_A - \varepsilon_B$. L'isolant de Haldane est caractérisé par un nombre de Chern non nul tandis que l'isolant de Semenoff correspond à $C = 0$.

2.7.3 Isolant de Kekulé

Nous avons jusqu'à présent réussi à générer des fermions de Dirac massifs grâce aux termes $\sigma_z \hat{1}$ et $\sigma_z \tau_z$ dans le Hamiltonien de basse énergie. Les deux autres manières de faire consiste à obtenir un Hamiltonien contenant $\sigma_z \tau_x$ ou $\sigma_z \tau_y$. Ce type de termes sont ceux qui entre dans la description d'un isolant de Kekulé. Pour faire émerger ces termes nous posons le Hamiltonien

$$\hat{H}_3 = \sum_{\vec{r}_A} \sum_{\alpha=1}^3 \delta t_\alpha(\vec{r}_A) \hat{c}_B^\dagger(\vec{r}_A + \vec{\delta}_\alpha) \hat{c}_A(\vec{r}_A) + \text{h.c.}, \quad (2.28)$$

où l'amplitude de saut connecte les deux points de Dirac via l'introduction d'un terme de phase $e^{2i\vec{K} \cdot \vec{r}_A}$

$$\delta t_\alpha(\vec{r}_A) = \Delta(\vec{r}_A) e^{i\vec{K} \cdot \vec{\delta}_\alpha} e^{2i\vec{K} \cdot \vec{r}_A}, \quad (2.29)$$

où $\Delta(\vec{r}_A)$ est à valeurs complexes.

Ce Hamiltonien exprime une modulation de l'énergie entre les termes de premier voisins. On peut montrer que l'expression à basse énergie de ce Hamiltonien est la suivante

$$\hat{\mathcal{H}}_3(q) = \Re(\Delta) \tau_x \sigma_z + \Im(\Delta) \tau_y \sigma_z + \text{termes proportionnels à l'unité} \quad (2.30)$$

Les termes proportionnels à l'unité peuvent comme précédemment être oubliés pour les mêmes raisons. L'effet d'un tel Hamiltonien sera, comme dans le cas de Haldane et Semenov, d'ouvrir un gap au niveau des points de Dirac, celui-ci étant dans ce cas de largeur $2|\Delta|$. On parle ici **d'isolant de Kekulé**. On pourra vérifier que $\hat{\mathcal{H}}_3$, tout comme dans le cas de Semenov, respecte l'invariance par renversement du temps.

Le bilan de ces différents Hamiltonien \hat{H}_1 , \hat{H}_2 et \hat{H}_3 est que nous pouvons faire apparaître 4 masses différentes pour des fermions de Dirac. Ceux-ci peuvent être rangés en deux familles, d'une part un triplet respectant la symétrie par renversement du temps (Semenov et les deux cas de Kekulé) et d'autre part un singulet brisant cette symétrie (Haldane).

2.8 Équation de Dirac inhomogène

Nous nous posons à présent la question de savoir ce que devient l'équation de Dirac et ses solutions lorsque la masse m possède une dépendance spatiale $m \rightarrow \phi(\vec{r})$. L'équation de Dirac s'écrit alors

$$(\vec{\alpha} \cdot \vec{p} + \beta \phi(\vec{r})) \psi_E = E \psi_E. \quad (2.31)$$

Dans le cadre de la matière condensée, cette dépendance spatiale de la masse peut être obtenue par des effets de bord, des défauts dans un réseau de Kekulé, la présence de vortex, etc. $\phi(\vec{r})$ représente par exemple un champ de phonon qui peut avoir deux minima stables $+m$ ou $-m$. Cela donne lieu à des parois de domaines ou solitons qui ont été en particulier étudiés théoriquement en 1978 [4] dans le cas d'une chaîne de Polyacétylène $(CH)_x$.

Dans le cas du polyacetylene, en raison des liaisons covalentes entre les atomes de carbone du polymère, les amplitudes de saut t et t' entre les deux atomes adjacents à un atome de carbone seront différentes. En introduisant un défaut dans la chaîne et en recollant une autre chaîne de l'autre côté dans le sens opposé (Cf. FIGURE (2.9.a)), les amplitudes de saut se retrouvent échangées. Pour modéliser cela, la masse m dans l'équation de Dirac sera remplacée par un champ $\phi(\vec{r})$, dont la forme est celle présentée à la figure (2.9.b). Il s'agit d'un soliton où $\phi(\vec{r})$ décrit la transition entre un état de masse $-m$ à $+m$. L'anti-soliton décrit la transition opposée entre $+m$ et $-m$.

Dans un tel système le résultat est pour la chaîne isolée, sans défaut une relation de dispersion semblable à celle obtenue précédemment dans le cas des isolant de Haldane, Semenoff et Kekulé avec un gap $2|t - t'|$, tandis que la présence du défaut induit un état lié d'énergie $E = 0$ au milieu du gap.

Deux questions se posent alors

1. Quel est le statut de ces états liés dans l'interprétation de Dirac en termes de particules et d'antiparticules ?
2. Quelle est la charge de ces états ?

La réponse à ces questions est que ces états liés sont une superposition d'états remplis/vides de charge fractionnaire $e/2$.

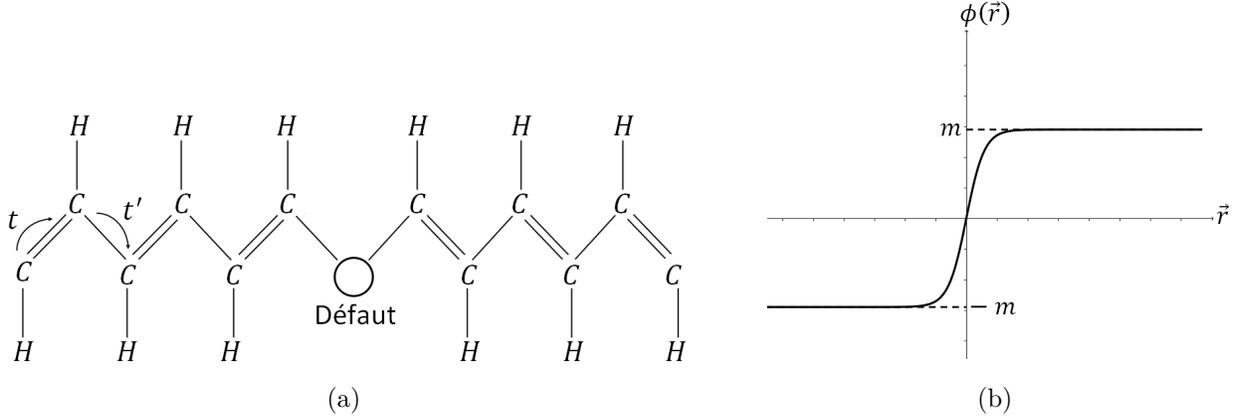


FIGURE 2.9 – (a) Nous considérons le cas d’une chaîne de polyacetylene comportant un défaut ponctuel renversant la chaîne et modifiant la direction selon laquelle l’amplitude de saut est maximale. (b) Champ associé à la masse $\phi(\vec{r})$.

L’argument avancé a été proposé par Jackiw. Si nous résolvons l’équation de Dirac en l’absence de solitons (i.e. pour $m = m_0$), nous avons à résoudre

$$\hat{H}_D \psi_E^0 = E \psi_E^0,$$

tandis qu’en présence de solitons cette équation s’écrit à l’aide des nouvelles fonctions d’onde ψ_E^S

$$\hat{H}_D \psi_E^S = E \psi_E^S.$$

Si l’on considère la densité de particules d’énergie négative au point x en l’absence de solitons

$$\rho^0(x) = \int_{-\infty}^0 (\psi_E^0(x))^* \psi_E^0(x) dE,$$

cette quantité diverge, et il est alors d’avantage pertinent d’étudier l’excès de charge ΔQ , correspondant à la différence de charge du système entre une configuration avec et sans soliton

$$\Delta Q = \int dx \int_{-\infty}^0 dE [\rho_E^S(x) - \rho_E^0(x)].$$

On fait alors l’hypothèse de l’existence d’un opérateur de conjugaison de charge \hat{C} tel que

$$\hat{C} \psi_E = \psi_{-E},$$

transformant les électrons en positrons et *vice-versa*. De cette manière la densité de charge vérifie

$$\rho_E = \psi_E^\dagger \psi_E = \rho_{-E}.$$

Nous avons alors nécessairement des fonctions d’onde orthogonales vérifiant

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \psi_E^{o/s}(x) \psi_E^{o/s}(y) dE = \delta(x - y),$$

et nous avons par conséquent

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dE (\rho_E^S(x) - \rho_E^0(x)) = 0.$$

La conséquence de cela est que les états liés sont d’énergie nulle, et donc

$$\int_{-\infty}^+ dE (2\rho_E^s(x) - 2\rho_E^0(x)) + \psi_0^{s*}(x) \psi_0^s(x) = 0.$$

L’excès de charge s’en déduit alors directement et nous donne

$$\Delta Q = \int dx \int_{-\infty}^0 dE (\rho_E^s(x) - \rho_E^0(x)) = -\frac{1}{2} \int dx \psi_0^{s*} \psi_0^s(x) = -\frac{1}{2}.$$

Les solitons doivent donc bien porter une charge fractionnaire.

Chapitre 3

Quelques applications de la topologie en matière condensée

La topologie joue un rôle important en matière condensée. Ce sont des arguments de topologie qui permettent de différencier et de classer différents états de la matière en allant au-delà du paradigme de Landau. On parlera de **transitions de phase topologiques** que l'on étudiera plus loin dans ce cours. Dans le cas des transitions de phases à la Landau, la transition est caractérisée par la discontinuité du paramètre d'ordre, celui-ci prenant une valeur finie en dessous de la température critique et nul au-dessous de la température transition. Dans le modèle de Haldane dont le diagramme de phase est représenté sur la figure 2.8, un seul Hamiltonien décrit deux phases isolantes distinctes, l'une possède des états de bord, l'autre non. Dans ce cas, il n'y a pas de paramètre d'ordre, mais pourtant deux phases différentes, et pas de brisure spontanée de symétrie. L'effet Hall quantique est un autre exemple de ce type de transition de phase topologique et de nombreux autres exemples peuvent être trouvés. La topologie tient également une place importante en matière molle.

Pour ce chapitre on pourra se référer au livre de Nakahara [5] complet mais difficile, ainsi qu'à la revue de Mermin [6] plus simple à aborder.

3.1 Introduction à quelques notions de topologie

Un des objectifs principaux de la topologie est de classer les espaces. Si on se trouve en présence de deux motifs, la question est de savoir si ils sont égaux ou différents à des transformations continues près. L'exemple classique de cette égalité des motifs est donné par le doughnut et la tasse de café (Cf. FIGURE (3.1)).

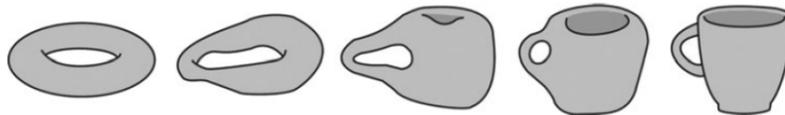


FIGURE 3.1 – Une tasse à café et un doughnut sont topologiquement équivalents, l'un pouvant être obtenu à partir de l'autre via une transformation continue.

Les espaces seront en topologie classifiés en fonction de leurs propriétés topologiques

- Leur dimensionnalité
- L'existence de frontières
- L'orientabilité (on pensera par exemple au ruban de Möbius, surface non orientable)
- La compacité
- La connexité
-

3.1.1 Espaces topologiques et homéomorphismes

Définition 1 (Espace topologique) Soit X un ensemble. Une famille \mathcal{F} de sous ensembles de X définit une topologie sur X si \mathcal{F} possède les trois propriétés suivantes :

- X et l'ensemble vide appartiennent à \mathcal{F}
- N'importe quel union d'ensembles de \mathcal{F} appartient à \mathcal{F} .
- N'importe quel intersection d'ensembles de \mathcal{F} appartient à \mathcal{F} .

Un espace topologique est constitué par une paire (X, \mathcal{F}) , où X est un ensemble et \mathcal{F} une topologie pour X .

Les ensembles de \mathcal{F} sont appelés les ensembles ouverts.

Exemple 1 : Si X est un espace métrique, alors les ensembles ouverts de X forment une topologie pour X qui est appelée métrique topologique pour X . Ici un ensemble ouvert d'un espace métrique est un ensemble contenant un point et son voisinage.

Les espaces métriques sont les espaces le plus utilisés en physique. Notons qu'il y a des exceptions : par exemple l'espace des phases en mécanique classique n'est pas un espace métrique !

Par la suite, nous nous restreignons à des espaces topologiques qui sont soit des espaces métriques, ou au moins dans des espaces qui peuvent plongés dans un espace plus grand munis d'une métrique et d'une topologie.

Définition 2 (Continuité) L'application $f : X \rightarrow Y$ entre deux ensembles topologiques est continue si pour tout ouvert U de Y , $f^{-1}(U)$ appartient à X .

Définition 3 (Homéomorphisme) Soient X_1 et X_2 deux espaces topologiques. On dira que ces deux espaces sont homéomorphes si il existe une transformation $f : X_1 \rightarrow X_2$ continue telle que $f^{-1} : X_2 \rightarrow X_1$ est également continue. f est alors appelé homéomorphisme.

En topologie, un homéomorphisme est donc une application bijective continue entre deux espaces topologiques dont la réciproque est continue. Dans ce cas, les deux espaces topologiques sont dits homéomorphes.

Pour illustrer cette définition, prenons l'exemple de $X_1 =]-\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}[$ et $X_2 = \mathbb{R}$. Nous pouvons alors passer de X_1 à X_2 par la transformation $X_2 \ni y = f(x) = \tan(x)$ où $x \in X_1$.

Les espaces d'intérêt pour la suite de ce cours sont \mathbb{R}^n , \mathbb{C}^n , S^n (sphère de dimension n) et T^n (tore de dimension n). On notera que T^n s'obtient comme un produit des sphères de dimension 1

$$T^n = S^1 \times S^1 \times \dots \times S^1$$

3.1.2 Invariants topologiques

Définition 4 (Invariant topologique) On appelle invariant topologique une quantité invariante sous l'action des homéomorphismes.

Ainsi, si deux espaces X et Y possèdent des invariants topologiques différents, ils ne sont pas homéomorphes l'un à l'autre.

On peut donner quelques exemples :

- Un intervalle ouvert ne sera pas homéomorphe à un intervalle fermé
- Un cercle ne sera pas homéomorphe à \mathbb{R} (l'un étant compact, l'autre non)
- Un cercle n'est ni homéomorphe $[-1, 1]$ (Ils sont tous les deux compacts mais $[-1, 1]$ est simplement connexe au contraire du cercle)
- Deux ensembles de caractéristique d'Euler différents ne sont pas homéomorphes

Une manière de classer des surfaces est la caractéristique d'Euler. Supposons qu'une surface soit homéomorphe à un polyèdre K , on définit alors la caractéristique d'Euler de ce polyèdre $\chi_E(X)$ comme

$$\chi_E(X) = V - E + F, \tag{3.1}$$

où V désigne le nombre de sommets de K , E sont nombre d'arrêtes et F son nombre de faces.

On a alors le théorème suivant

Théorème 1 (Poincaré-Alexander) $\chi(X)$ ne dépend pas de K .

Ce théorème stipule donc que quelle que soit le polyèdre homéomorphe à X choisi, cette caractéristique $\chi_E(X)$ sera toujours identique, fournissant un outil de caractérisation puissant pour les surfaces topologiquement équivalentes.

Par exemple $\chi(S^2) = 2 = 2(1 - g)$ où $g = 0$ est le genre (le nombre de trous) de la sphère S^2 . Pour le tore, $\chi(T^2) = 0 = 2(1 - g)$ où $g = 1$ est le genre (le nombre de trous) du tore T^2 . On peut s'amuser à prendre une surface quelconque, à la transformer en un polyèdre de son gout et à calculer la caractéristique d'Euler.

3.1.3 Homotopie

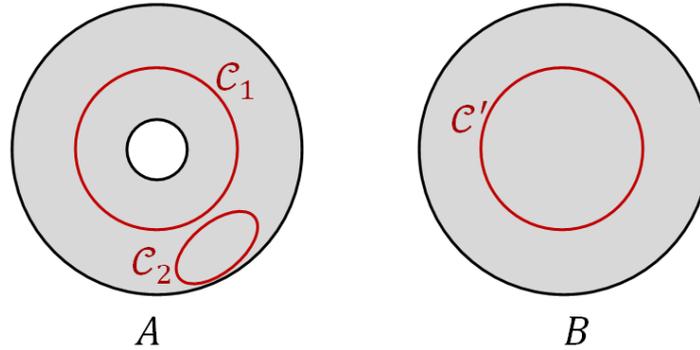


FIGURE 3.2 – Sur B l'ensemble des lacets sont homotopiques, tandis que sur A la présence du trou génère des classes d'équivalence.

Considérons deux espaces topologiques représentés sur la FIGURE (3.2). Sur B n'importe quel lacet peut être réduit à un point par une déformation continue, tandis que cela n'est pas le cas sur A , cela dépendant du type de lacet. En effet C_2 peut être réduit à un point par une déformation continue, tandis que C_1 ne le peut pas.

On dira qu'un lacet fermé α est **homotopique** à un lacet fermé β si α peut être déformée continuellement en β . À partir de cette définition s'exprime le théorème suivant

Théorème 2 *La relation "homotopique" est une relation d'équivalence. Cette relation d'équivalence est caractérisée par des classes d'équivalence.*

Pour illustrer ce théorème, prenons l'exemple de l'espace A représenté sur la FIGURE (3.2). Le groupe d'homotopie sera caractérisé dans ce cas par le nombre de tours que les lacets fermés effectuent autour du trou, et donc par un entier $n \in \mathbb{Z}$ (si l'on oriente les lacets). Ainsi le contour C_2 n'effectuant pas de tour sera caractérisé par $n = 0$, tandis que C_1 sera caractérisé par $n = 1$. Un lacet faisant deux tours avant de se refermer sera quant à lui caractérisé par $n = 2$ et ainsi de suite.

Mathématiquement cette équivalence s'exprime de la manière suivante. Soient $\alpha, \beta : I \rightarrow X$ où I est un intervalle et X un espace topologique. α et β seront équivalents s'il existe F transformation continue de $I \times I$ dans X telle que

$$\begin{aligned} F(s, 0) &= \alpha(s), \\ F(s, 1) &= \beta(s). \end{aligned}$$

F sera l'homotopie entre α et β .

Groupe fondamental

Soit X un espace topologique et $x_0 \in X$.

Définition 5 (Groupe fondamental) *L'ensemble des classes d'homotopies associées aux lacets en x_0 est appelé groupe fondamental de X en x_0 . Celui-ci sera noté Π_1 .*

Ainsi pour S^1 , la sphère de dimension 1 (le cercle), nous avons vu que les différents lacets fermés et donc le groupe d'homotopie était caractérisé par un entier $n \in \mathbb{Z}$, et ainsi

$$\Pi_1(S^1) = \mathbb{Z}.$$

L'indice 1 de Π exprime le fait que nous considérons un lacet fermé et donc un objet de dimension 1.

Si nous considérons à présent le groupe fondamental de la sphère S^2 , comme tous les lacets pouvant être tracés à la surface d'une sphère sont équivalents les uns aux autres, le groupe fondamental est trivial

$$\Pi_1(S^2) = \emptyset$$

Nous avons également le même résultat pour \mathbb{R}^n , \mathbb{C}^n et D^n (l'ensemble des disques de dimension n)

$$\Pi_1(\mathbb{R}^n) = \Pi_1(\mathbb{C}^n) = \Pi_1(D^n) = \emptyset.$$

Cependant retirer un point à une surface revient au cas de notre espace A de la FIGURE (3.2), et donc

$$\Pi_1(\mathbb{R}^2/\bullet) = \mathbb{Z}.$$

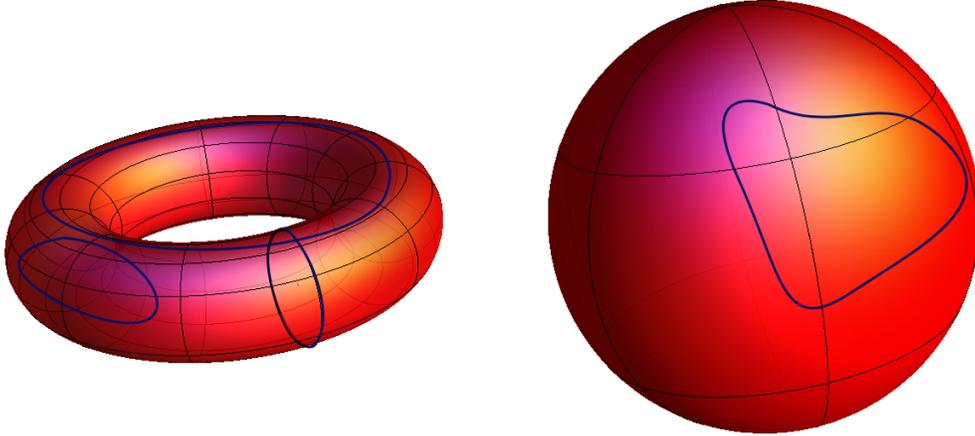


FIGURE 3.3 – Chemins topologiquement inéquivalents à la surface d'un tore, et unique type de chemin sur la sphère.

Théorème 3 Soient X et Y , deux ensembles topologiques connexes par arc (c'est-à-dire que deux points de ces ensembles peuvent toujours être reliés par un arc). $\Pi_1(X \otimes Y)$ sera alors isomorphe à $\Pi_1(X) \oplus \Pi_1(Y)$.

Ainsi par application de ce théorème, nous aurons pour un tore à deux dimensions

$$\Pi_1(T^2) = \Pi_1(S^1 \otimes S^1) = \Pi_1(S^1) \oplus \Pi_1(S^1) = \mathbb{Z} \oplus \mathbb{Z},$$

et dans le cas général d'un tore de dimension n

$$\Pi_1(T^n) = \underbrace{\mathbb{Z} \oplus \mathbb{Z} \oplus \dots \oplus \mathbb{Z}}_n$$

Groupes d'homotopie d'ordre supérieur

Il peut également être utile de définir $\Pi_n(X, x_0)$ le groupe d'homotopie d'ordre n . L'interprétation de ce groupe consiste à classifier la manière dont il est possible "d'emballer" un "lacet fermé" de dimension n l'espace X . Dans le cas de la sphère S^n

$$\Pi_n(S^n, x_0) = \mathbb{Z}.$$

Dans le cas de la sphère S^2 , on peut exprimer le nombre d'eurolement en fonction de l'intégrale suivante

$$k = \int_{S^2} d^2\vec{r} \frac{1}{8\pi} \epsilon^{\mu\nu} \vec{n} \cdot (\partial_\mu \vec{n} \times \partial_\nu \vec{n}) \quad (3.2)$$

où $\vec{n}(\vec{r})$ est un vecteur de la sphère S^2 .

Ce résultat semble assez intuitif. Cela est loin d'être toujours le cas si l'on considère des groupes ou des variétés plus complexes. Déjà au niveau de la sphère S^n , il existe un résultat non intuitif dû à Hopf comme quoi

$$\Pi_3(S^2, x_0) = \mathbb{Z}.$$

3.2 Applications en matière condensée

3.2.1 Défauts topologiques

Brisure de symétrie et paramètre d'ordre

Supposons que l'on ait une théorie des champs (classique ou quantique) avec un groupe de symétrie G (G est en général un groupe continu). Cela signifie que le Hamiltonien, le Lagrangien reste invariant sous les transformations de G . Supposons lorsque l'on varie un des paramètres qu'un des champs acquiert une valeur moyenne qui n'est pas invariante sous les symétries du groupe G . On parle de symétries brisées.

Ce champ est appelé paramètre d'ordre que l'on note en général $\mathbf{m}(x)$. Ce paramètre d'ordre peut être un scalaire comme la phase du supraconducteur ou un paramètre vectoriel comme le vecteur d'aimantation d'un ferromagnétique ou peut prendre une forme tensorielle plus ou moins complexe. La théorie de Landau des transitions de phases se base sur la notion de paramètre d'ordre qui est nul dans la phase désordonnée et non nul dans la phase ordonnée pour décrire la transition de phase de manière phénoménologique à partir d'une énergie libre fonction de ce paramètre d'ordre. Il se peut que ce paramètre d'ordre possède une symétrie résiduelle H sous groupe de G . Dans ce cas, $M = G/H$ définit l'espace du paramètre d'ordre.

Ainsi, pour un système à d dimensions, le paramètre d'ordre définit une application de \mathbb{R}^d dans M .

Prenons l'exemple de la supraconductivité BCS, ce paramètre d'ordre est défini par

$$\psi(x) = \Delta(x)e^{i\varphi(x)},$$

$\varphi(x)$ décrivant donc la phase du supraconducteur telle que $\varphi \in S^1$. En général on peut supposer que le gap du supraconducteur est homogène $\Delta(x) \approx \Delta$. Dans le cas d'un supraconducteur bidimensionnel, le paramètre d'ordre définit une application de \mathbb{R}^2 dans S^1 .

De la même manière dans le cas du magnétisme, le paramètre d'ordre est l'aimantation \vec{M} cette quantité vivant sur la sphère S^2 .

Lorsque le paramètre d'ordre \mathbf{m} est une fonction lisse complètement homogène, l'application se réduit à un seul point \mathbf{m}_0 de M .

Defauts topologiques et groupes d'homotopie

Par contre il existe des situations est une fonction lisse sauf en quelques points (ou lignes ou surfaces) où elle est singulière. La configuration $\mathbf{m}(x)$ définit alors une configuration avec des défauts. Les configurations avec des défauts sont en général de plus haute énergie. On pourrait penser que les fluctuations vont réguler ces défauts par des transformations continues du champ.

Néanmoins, il existe une classe de défauts qui, lorsque'ils sont présents, ne peuvent être enlevés par des transformations continues du champ à cause de la topologie non-triviale de l'espace M du paramètre d'ordre. Ce type de défaut est appelé défaut topologique.

Pour illustrer ce phénomène, considérons un vortex dans un supraconducteur. La phase $\varphi(x)$ dépend maintenant de la position. Soit un cercle C entourant le vortex. Pour tout point $x \in C = S^1$, $\varphi(x)$ définit un homéomorphisme de $S^1 \mapsto S^1$. Nous avons vu précédemment que $\Pi_1(S^1) = \mathbb{Z}$, et donc l'évolution de la phase $\varphi(x)$ sera classifiée selon un entier $k \in \mathbb{Z}$ que l'on appelle la vorticité du vortex. Lorsque $k \neq 0$, le vortex ne peut être défait par des transformations continues du champ $\varphi(x)$. Le même argument s'applique pour un superfluide (un supraconducteur non chargé). La structure du groupe d'homotopie (\mathbb{Z} dans le cas présent) nous informe que si l'on merge deux vortex de vorticité k_1 et k_2 , on obtiendra un vortex de vorticité $k_1 + k_2$.

Abordons à présent le modèle XY. Dans ce modèle nous décrivons un système de spins classiques sur un réseau carré bidimensionnel. Le Hamiltonien s'écrit

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j,$$

avec la contrainte que $\vec{S}_i^2 = 1$. Moyennant cette contrainte, le Hamiltonien peut alors se réécrire uniquement en fonction de la différence d'orientation des spins voisins comme

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \cos(\theta_i - \theta_j).$$

Dans ce modèle, le paramètre d'ordre, l'aimantation, prend différentes valeurs déterminées par l'orientation dans le plan du vecteur \vec{M} , et ainsi le paramètre d'ordre $\in S^1$. Comme précédemment, on peut considérer un cercle

entourant un défaut. Sachant que $\Pi_1(S^1) = \mathbb{Z}$, la nature de ce système implique l'existence de défauts protégés topologiquement. Ces défauts sont appelés également **vortex**. La présence de défauts topologiques peut avoir dans certains cas une influence curciale sur la thermodynamique du système. Aisni dans le cas du modèle XY, la prolifération de défauts topologiques lorsque l'on augmente la température induit une transition de phase d'un nouveau genre entre un quasi-ordre et un état désordonné.

Ce type de transition a été décrite par Kosterlitz et Thouless et joue un grand rôle en matière condensée (on pourra se référer pour plus de détails à [6]).

Nous avons également vu que $\Pi_2(S^2) = \mathbb{Z}$. Considérons le modèle de Heisenberg classique à 3D. Le paramètre d'ordre, ici l'aimantation, vit sur une sphère. Le modèle de Heisenberg tri-dimensionnel dont le Hamiltonien s'écrit

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j,$$

comme dans le cas du modèle XY, à la différence que \vec{S}_i sera ici un vecteur à trois composantes (également de norme unité). Le groupe d'homotopie d'ordre 2 implique l'existence de défauts. Ces défauts sont ici appelés **skyrmions**, et engendrent une transition de phase est une transition de phase quantique.

Notons que l'existence de ces défauts topologiques n'impliquent pas nécessairement l'existence de transitions de phases, celles-ci devant être déterminées par un calcul de complet. Cependant ces défauts donne un indice sur l'existence de telles transitions ainsi que leur origine.

3.2.2 Particule sur anneau

Particule classique

L'action est définie comme

$$S[\phi] = \int dt \mathcal{L}(\phi, \dot{\phi}).$$

Nous allons considérer dans cette partie une particule libre sur un cercle dont la position sera repérée par l'angle ϕ par rapport à une orientation arbitraire du cercle parcouru (Cf. FIGURE (3.4)). Nous allons utiliser le Lagrangien suivant

$$\mathcal{L}(\phi, \dot{\phi}) = \frac{1}{2} m \dot{\phi}^2 + a \dot{\phi}, \quad (3.3)$$

où a est une constante.

L'équation d'Euler-Lagrange devant être vérifiées par ce Lagrangien s'écrit

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\phi}} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \phi} = 0,$$

nous donnant comme équation du mouvement

$$m \ddot{\phi} = 0,$$

soit $\dot{\phi} = \text{cst} = \phi_0$. De cette équation nous observons que le deuxième terme en $a \dot{\phi}$ présent dans le Lagrangien ne contribue pas aux équations du mouvement car il s'agit d'une dérivée totale. Si on se donne les conditions initiales $\phi(t_i) = \phi_1$ et finales $\phi(t_f) = \phi_2$, il existe alors une infinité de trajectoires possibles, conséquence de la topologie du système pour lequel la position d'une particule est définie à 2π près, et $\Pi_1(S^1) = \mathbb{Z}$. Cependant si au lieu de ces conditions initiales et finales nous imposons $\phi(t_i)$ ainsi que $\dot{\phi}(t_i)$, la trajectoire est unique.

Définissant le moment p conjugué à ϕ

$$p = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\phi}} = m \dot{\phi} + a,$$

nous en déduisons le Hamiltonien sous la forme

$$H = p \dot{\phi} - \mathcal{L} = \frac{1}{2} m (p - a)^2.$$

La résolutions des équations de Hamilton nous donne alors $\dot{p} = 0$, et donc au niveau classique, a entre dans le Hamiltonien mais ne participe pas aux équations du mouvement. Il peut être absorbé par la transformation $p \rightarrow p' = p + a$ traduisant l'invariance par translation du système. On ne change donc pas les trajectoires classiques avec le Hamiltonien

$$H = \frac{1}{2m} p'^2.$$

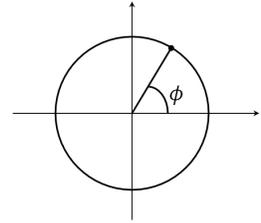


FIGURE 3.4 – Particule sur un cercle.

Particule quantique

Gardons le même Lagrangien (3.3) et effectuons la passage classique \rightarrow quantique en remplaçant les croches de Poisson $\{p, \phi\} = 1$ par la relation de commutation $[\hat{p}, \hat{\phi}] = i\hbar$. L'opérateur \hat{p} (moment conjugué à la position $\hat{\phi}$) s'écrit alors en représentation "position"

$$\hat{p} = -i\partial_\phi,$$

et le Hamiltonien quantique se met sous la forme

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}(\hat{p} - a)^2.$$

Imposons tout d'abord des conditions aux limites périodiques à notre système

$$\psi[\phi + 2\pi n] = \psi[\phi],$$

nous permettant de résoudre notre problème aisément en déterminant l'expression des fonctions propres

$$\psi_n[\phi] = e^{in\phi}$$

(avec $n \in \mathbb{Z}$) et des énergies propres

$$E_n = \frac{1}{2m}(n - a)^2.$$

Nous constatons alors que le spectre de notre système dépend de a . Considérons alors la transformation

$$\hat{p}' = \hat{p} - a,$$

permettant d'écrire le Hamiltonien sous la forme libre

$$\hat{H} = \frac{1}{2m}\hat{p}'^2.$$

Cette transformation est possible via une transformation unitaire (transformation de jauge) à condition de modifier \hat{H} par l'opérateur unitaire $\hat{U} = e^{ia\hat{\phi}}$. Cette transformation agit également sur les fonctions d'onde via $\psi \rightarrow e^{ia\phi}\psi$.

La condition de périodicité se réécrit alors en introduisant une phase supplémentaire lorsque la particule effectue un tour du cercle

$$\psi'[\phi + 2\pi] = e^{2i\pi a}\psi'(\phi).$$

La quantité a s'identifie au potentiel vecteur $Ae/\hbar c$ appliqué le long de l'anneau.

Revenons à l'aspect classique, l'action "topologique" (dans la mesure où elle ne dépend pas des valeurs finales et initiales) s'écrit

$$S_{topo} = S_2 = \int_{t_1}^{t_2} dt a \dot{\phi} = \theta \frac{\Delta\phi}{2\pi},$$

où $\theta = 2\pi a$. Cette notation est standard et ce terme s'appelle le terme topologique en θ . On identifie alors $\Delta\phi/2\pi$ à un flux magnétique au travers de l'anneau.

On peut remarquer que pour θ multiple de π , le spectre $E_n = \frac{1}{2m}(n - a)^2$ est doublement dégénéré. Cette dégénérescence est lié à l'existence d'une symétrie supplémentaire pour $\theta = \pi$ (la parité).

Si nous écrivons à présent la fonction de partition de notre système à l'aide d'une intégrale fonctionnelle, nous avons

$$Z = \int \mathcal{D}\phi \exp[-S[\phi]],$$

où l'action $S[\phi]$ est une fonctionnelle de ϕ

$$S[\phi] = \int_0^{\beta\hbar} d\tau \left[\frac{m\dot{\phi}^2}{2} - a\dot{\phi} \right],$$

définition à laquelle nous devons ajouter la condition aux limites $\phi(0) = \phi(\beta\hbar)$ (où $\beta = 1/k_B T$). De cette manière, la fonction de partition se réécrit comme une somme sur le nombre de tours effectués par la particule sur l'anneau

$$Z = \sum_{Q=-\infty}^{+\infty} e^{i\theta Q} \int_{\phi(\beta\hbar) - \phi(0) = 2\pi Q} \mathcal{D}\phi e^{-\int_0^{\beta\hbar} \frac{m\dot{\phi}^2}{2}}.$$

Cette fonction de partition se réécrit donc comme une décomposition sur les secteurs topologiques différents, chaque secteur étant affecté d'un poids différent $e^{i\theta Q}$. Nous allons donc avoir des interférences entre secteurs topologiques distincts !

L'entier Q désigne ici le nombre d'enroulement et vient du fait que $\phi(\tau)$ est un homéomorphisme de $\tau \in [0, \beta\hbar]$ vers le cercle S^1 . Comme $\Pi_1(S^1) = \mathbb{Z}$, Q est un entier relatif. Notons que Q s'exprime simplement comme

$$Q = \int_0^{\beta\hbar} \frac{d\tau}{2\pi} \dot{\phi}. \quad (3.4)$$

Lors du calcul d'une intégrale fonctionnelle pour un problème donné, il est donc important de connaître $\Pi_1(G)$ où G est l'espace dans lequel vit notre variable (ici un cercle).

Voici un résumé de quelques caractéristiques des termes topologiques :

- Textures dans l'intégrale fonctionnelle liée à la charge topologique Q
- Dans l'intégrale fonctionnelle, on doit sommer sur les représentations irréductibles à $1D$ de $\Pi_d(G)$ où d est la dimension d'espace temps et G l'espace d'arrivée dans laquelle vit notre variable. (Pour le problème considéré ici $d = 1$)
- Interférences quantiques entre les secteurs topologiques
- Le terme topologique n'affecte pas les équations du mouvement
- Néanmoins, il affecte le spectre en changeant les conditions de périodicité de la fonction d'onde.
- θ peut être vu comme une constante de couplage périodique.
- $\theta = 0, \pi$ existence d'une symétrie additionnelle : parité
- $\theta = \pi$: dégénérescence du spectre (possibilité d'excitations sans gap dans des systèmes plus complexes).
- θ est un nouveau paramètre non quantifié qui apparaît dans la théorie et provient de l'ambiguïté de quantifier un problème classique dans un espace de configurations multiplement connexes.

3.3 Phase de Berry

Des compléments à ce chapitre pourront être trouvés dans les revues [7, 8]

3.3.1 Généralités

Soit $\hat{H}(\vec{\xi})$ un Hamiltonien quelconque dépendant du paramètre $\vec{\xi}$ pouvant décrire l'espace réel, l'espace réciproque etc. Les vecteurs $|\psi(\vec{\xi})\rangle$ vivent dans le même espace de Hilbert et sont propres de $\hat{H}(\vec{\xi})$

$$\hat{H}(\vec{\xi}) |\psi(\vec{\xi})\rangle = E(\vec{\xi}) |\psi(\vec{\xi})\rangle.$$

Soit $|\psi_0(\vec{\xi})\rangle$ l'état fondamental non dégénéré de notre système. Lors de l'évolution de $\vec{\xi}_1$ en $\vec{\xi}_2$, cette fonction d'onde va accumuler une phase $\Delta\varphi_{1,2}$ telle que

$$e^{-i\Delta\varphi_{1,2}} = \frac{\langle\psi_0(\vec{\xi}_2)|\psi_0(\vec{\xi}_1)\rangle}{|\langle\psi_0(\vec{x}_2)|\psi_0(\vec{\xi}_1)\rangle|}, \quad (3.5)$$

et ainsi

$$\Delta\varphi_{12} = -\Im(\ln \langle\psi_0(\vec{\xi}_1)|\psi_0(\vec{\xi}_2)\rangle). \quad (3.6)$$

Cette phase est définie à 2π près et est arbitraire dans la mesure où l'état $|\psi_0(\vec{\xi}_1)\rangle$ est lui-même défini à une phase près.

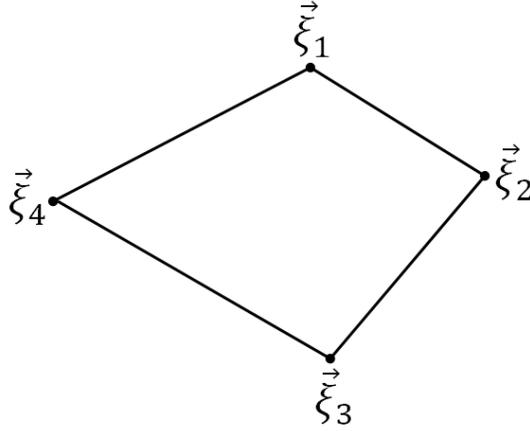


FIGURE 3.5 – Chemin fermé

Habituellement, cette phase ne nous intéresse pas car on s'intéresse à des grandeurs physiques faisant intervenir le carré du module de ces fonctions d'onde.

Considérons un chemin fermé (Cf. FIGURE (3.5)) sur lequel nous faisons évoluer notre fonction d'onde

$$\vec{\xi}_1 \rightarrow \vec{\xi}_2 \rightarrow \vec{\xi}_3 \rightarrow \vec{\xi}_4 \rightarrow \vec{\xi}_1.$$

La phase γ acquise sur ce chemin est la somme des phases acquises à chaque étape

$$\gamma = \Delta\varphi_{12} + \Delta\varphi_{23} + \Delta\varphi_{34} + \Delta\varphi_{41}.$$

En fixant la phase de chaque état $|\psi_0(\vec{\xi}_i)\rangle$ de manière arbitraire, on fixe la jauge. γ ne dépend pas de cette phase arbitraire et est donc un invariant de jauge. La question est alors de savoir si celle-ci est observable.

Nous notons alors les points suivants

- La phase γ semble *a priori* dépendre du chemin.
- Cette phase, appelée **phase de Berry** ne peut être représentée en termes de valeurs propres d'opérateurs. On parle de **phase géométrique**.
- ξ est un paramètre reliant \hat{H} au "monde extérieur". La démarche adoptée est intrinsèquement semi-classique. Par conséquent, la phase de Berry ne peut être observée dans un système isolé.

Considérons à présent la limite continue où

$$e^{-i\Delta\varphi} = \frac{\langle \psi_0(\vec{\xi}) | \psi_0(\vec{\xi} + \Delta\vec{\xi}) \rangle}{|\langle \psi_0(\vec{\xi}) | \psi_0(\vec{\xi} + \Delta\vec{\xi}) \rangle|},$$

nous donnant au premier ordre pour la phase

$$-i\Delta\varphi = \langle \psi_0(\vec{\xi}) | \vec{\nabla}_{\vec{\xi}} \psi_0(\vec{\xi}) \rangle \cdot d\vec{\xi}.$$

À la limite continue $\Delta\varphi$ est remplacé par $d\varphi$ et $\Delta\vec{\xi}$ par $d\vec{\xi}$. On écrit alors

$$\begin{aligned} d\varphi &= i \langle \psi_0(\vec{\xi}) | \vec{\nabla}_{\vec{\xi}} \psi_0(\vec{\xi}) \rangle \cdot d\vec{\xi} \\ &= \vec{A}(\vec{\xi}) \cdot d\vec{\xi}, \end{aligned}$$

où $\vec{A}(\vec{\xi})$ est appelée **connexion de Berry** et définie comme

$$\vec{A}(\vec{\xi}) = i \langle \psi_0(\vec{\xi}) | \vec{\nabla}_{\vec{\xi}} \psi_0(\vec{\xi}) \rangle. \quad (3.7)$$

La phase φ étant une quantité réelle, nous pouvons alors réécrire la connexion de Berry comme

$$\vec{A}(\vec{\xi}) = -\Im(\langle \psi_0(\vec{\xi}) | \vec{\nabla}_{\vec{\xi}} \psi_0(\vec{\xi}) \rangle).$$

L'accumulation de phase sur un chemin fermé s'exprime alors comme

$$\gamma = \oint d\varphi = \oint \vec{A}(\vec{\xi}) \cdot \vec{\xi}.$$

Même si $\vec{A}(\vec{\xi})$ n'est pas invariant de jauge, γ l'est. Cette phase dépend du chemin mais pas de la manière dont on le parcourt (phase géométrique).

Par analogie avec l'électromagnétisme (éclairant la notion employée pour la connexion de Berry), on peut définir la **courbure de Berry** (ou **phase de Berry**) de la manière suivante

$$\Omega_{\alpha\beta}(\vec{\xi}) = \frac{\partial}{\partial \xi^\alpha} A_\beta(\vec{\xi}) - \frac{\partial}{\partial \xi^\beta} A_\alpha(\vec{\xi}). \quad (3.8)$$

À partir du théorème de Stokes, nous pouvons alors réécrire γ sous la forme suivante

$$\gamma = \int_S \frac{1}{2} (d\xi^\alpha \wedge d\xi^\beta) \Omega_{\alpha\beta},$$

où S est une surface s'appuyant sur le chemin d'intégration considéré.

Quelques remarques sur les considérations précédentes

- Nous avons supposés que l'état $|\psi_0(\vec{\xi})\rangle$ était non dégénéré. En l'absence de cette hypothèse la phase obtenue aurait été non-Abélienne.
- Le calcul numérique de la phase γ est difficile en raison de la présence du gradient $|\vec{\nabla}_{\vec{\xi}} \psi_0(\vec{\xi})\rangle$ pouvant entraîner une évolution aléatoire du résultat pour plusieurs réalisation du même calcul numérique.

3.3.2 Nombre de Chern

Nous avons donc vu que le flux de la phase de Berry s'exprimait comme

$$\gamma = \iint \vec{\Omega}(\vec{\xi}) \cdot d\vec{S}.$$

Cette relation reste valide même si S est une surface fermée.

Théorème 4 (Gauss-Bonnet)

$$\frac{1}{2\pi} \int_{S^2} \vec{\Omega}(\vec{\xi}) d\vec{S} = C_1 \in \mathbb{Z}.$$

Cet entier est appelé **premier nombre de Chern**, ou **nombre de Chern de première classe**.

Pour démontrer ce théorème décomposons l'intégrale en deux parties

$$\iint \vec{\Omega}(\vec{\xi}) d^2S = \iint_{S^+} \dots + \iint_{S^-} \dots.$$

Les intégrales doubles sur chacune de ces demi-sphère orientée sont, en raison de cette orientation, telles que

$$\iint_{S^\pm} \vec{\Omega}(\vec{\xi}) \cdot d^2\vec{S} = \pm \otimes_C \vec{A}_\pm(\vec{\xi}) \cdot d\vec{\xi},$$

et ainsi

$$\iint \vec{\Omega}(\vec{\xi}) \cdot d^2\vec{S} = \oint_C \vec{A}_+(\vec{\xi}) d\vec{\xi} - \oint_C \vec{A}_-(\vec{\xi}) d\vec{\xi} = 2\pi n \quad n \in \mathbb{Z},$$

la phase étant définie à 2π près.

3.3.3 Expression en termes d'éléments de matrice

Nous avons donc

$$\vec{A}(\vec{\xi}) = i \langle \psi_0(\vec{\xi}) | \vec{\nabla}_{\vec{\xi}} \psi_0(\vec{\xi}) \rangle.$$

Il est possible de calculer $|\psi_0(\vec{\xi} + \Delta\vec{\xi})\rangle$ de manière perturbative. On trouve alors au premier ordre pour un état fondamental non dégénéré (n désigne la somme sur l'ensemble des états propres du Hamiltonien)

$$|\vec{\nabla}_{\vec{\xi}}\psi_0(\vec{\xi})\rangle = \sum_{n \neq 0} \frac{\langle \psi_n(\vec{\xi}) | \vec{\nabla}_{\vec{\xi}} \hat{H}(\vec{\xi}) | \psi_0(\vec{\xi}) \rangle}{E_0(\vec{\xi}) - E_n(\vec{\xi})} |\psi_n(\vec{\xi})\rangle,$$

et ainsi on obtient pour la phase de Berry

$$\Omega_{\alpha\beta}^{(0)} = 2\Im \sum_{n \neq 0} \left(\frac{\langle \psi_0(\vec{\xi}) | \frac{\partial H}{\partial \xi^\alpha} | \psi_n(\vec{\xi}) \rangle \langle \psi_n(\vec{\xi}) | \frac{\partial \hat{H}}{\partial \xi^\beta} | \psi_0(\vec{\xi}) \rangle}{|E_0(\vec{\xi}) - E_n(\vec{\xi})|^2} \right).$$

Le (0) en indice de Ω indique que l'on prend la phase de Berry sur l'état fondamental. Il est possible de définir une phase/courbure de Berry sur n'importe quel état n non dégénéré.

On a pour des états non dégénérés la règle de conservation suivante

$$\sum_n \Omega_{\alpha\beta}^n(\vec{\xi}) = 0. \quad (3.9)$$

3.4 Effet Aharonov-Bohm revisité

Considérons un électron dans une boîte décrit par le Hamiltonien

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{r}).$$

L'état fondamental de ce Hamiltonien est noté $\varphi_0(\vec{r})$ admettant pour valeur propre l'énergie E_0 . Si l'on déplace le centre de la boîte de $\vec{0}$ en \vec{R} , le Hamiltonien se réécrit

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{r} - \vec{R}).$$

Nous identifions le paramètre extérieur discuté aux sections précédentes à ce déplacement \vec{R} et nous notons les fonctions d'ondes correspondantes $|\psi(\vec{R})\rangle$, dont la projection s'écrit

$$\langle r | \psi(\vec{R}) \rangle = \varphi(\vec{r} - \vec{R}).$$

Si nous imposons à présent un champ extérieur agissant dans le Hamiltonien au travers du potentiel vecteur \vec{A}

$$\hat{H}(\vec{R}) = \frac{1}{2m} \left[\hat{p} - \frac{e\vec{A}}{c} \right]^2 + V(\hat{r} - \vec{R}).$$

Le déplacement de l'électron autour d'un solénoïde infini, engendrant ce champ, induit un facteur de phase dans la fonction d'onde de la forme

$$\langle r | \psi(\vec{R}) \rangle = \exp\left(\frac{ie}{\hbar c} \int_R^r \vec{A}(\vec{r}') d\vec{r}'\right) \varphi(\vec{r} - \vec{R}).$$

En particulier nous pouvons déplacer la boîte très loin de notre solénoïde. Calculons alors la connexion de Berry en utilisant \vec{R} comme paramètre extérieur. Nous avons

$$\begin{aligned} \chi(\vec{R}) &= i \langle \psi(\vec{R}) | \vec{\nabla}_{\vec{R}} \psi(\vec{R}) \rangle \\ &= \frac{e}{\hbar c} A(\vec{R}) + i \int d\vec{r} \varphi(r - R) \vec{\nabla}_R \varphi(\vec{r} - \vec{R}). \end{aligned}$$

Notre fonction d'onde $\varphi(\vec{r})$ est normalisée à 1, d'où $\int d\vec{r} \varphi(r - R) \vec{\nabla}_R \varphi(\vec{r} - \vec{R}) = 0$, car correspondant à la dérivée de la norme. Nous obtenons donc la connexion de Berry comme seule fonction du potentiel vecteur

$$\chi(\vec{R}) = \frac{e}{\hbar c} A(\vec{R}), \quad (3.10)$$

permettant ainsi d'identifier directement la connexion de Berry $\vec{\chi}$ au potentiel vecteur \vec{A} . Une choix de jauge particulier dans la définition de la connexion de Berry correspond ici à un choix de jauge particulier de jauge en électromagnétisme. Cela permet également de réinterpréter l'effet Aharonov-Bohm comme un effet purement géométrique.

3.5 Un modèle à deux niveaux

Nous allons considérer à présent le système à deux niveaux décrit par le Hamiltonien suivant

$$\hat{H}(\xi) = \vec{\xi} \cdot \hat{\sigma} = \xi(\sin \theta \cos \varphi \sigma_x + \sin \theta \sin \varphi \sigma_y + \cos \theta \sigma_z). \quad (3.11)$$

Les deux valeurs propres de ce Hamiltonien sont $E_{\pm} = \pm \xi$, et l'état fondamental correspondant (défini à une phase près)

$$|\psi_0(\theta, \varphi)\rangle = \begin{pmatrix} \sin \frac{\theta}{2} e^{-i\varphi} \\ -\cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}.$$

On obtient alors les deux connexions de Berry suivantes

$$\chi_{\theta} = i \langle \psi_0 | \partial_{\theta} \psi_0 \rangle = 0 \quad (3.12)$$

$$\chi_{\varphi} = i \langle \psi_0 | \partial_{\varphi} \psi_0 \rangle = \sin^2 \frac{\theta}{2} = \frac{1 - \cos \theta}{2} \quad (3.13)$$

Nous en déduisons donc la courbure de Berry

$$\Omega = \partial_{\theta} \chi_{\varphi} - \partial_{\varphi} \chi_{\theta} = \frac{\sin \theta}{2}. \quad (3.14)$$

La courbure de Berry est invariante de jauge pas la connexion. La courbure s'annule aux deux points $\theta = 0$ et $\theta = \pi$. On parle de singularités ou d'obstructions. Notons que nous pouvons déplacer ces singularités en d'autres points par une transformation de jauge mais pas les enlever.

Le domaine de variation des paramètres θ, φ est un rectangle qui a la même topologie que le tore. Le nombre de Chern associé à l'état fondamental $|\psi_0\rangle$ est donc obtenu par intégration sur ce rectangle à un facteur $1/(2\pi)$ près :

$$\frac{1}{2\pi} \int d\theta d\varphi \frac{1}{2} \sin \theta = 1 = C_1^{\psi_0}.$$

Le nombre de Chern ne peut prendre que des valeurs entières car il correspond au nombre d'enroulement d'un rectangle d'un tore T^2 vers une sphère S^2 (or $\Pi_2(S^2) = \mathbb{Z}$). Cela implique que l'état fondamental de ce Hamiltonien est très robuste par rapport aux déformations continues du Hamiltonien ou de la surface car il est protégé topologiquement !

Le même travail peut être effectué pour l'état excité $|\psi_1\rangle$ de valeur propre $+\xi$, et nous obtenons alors $C_1^{\psi_1} = -1$, vérifiant ainsi la propriété des nombres de Chern $\sum_n C_1^{(n)} = 0$.

3.6 Monopôles de Dirac

Nous étudions à présent un monopôle magnétique donnant naissance à un champ magnétique \vec{B} radial

$$\vec{B} = g \frac{\vec{r}}{r^3},$$

où g sera appelé **charge** du monopôle par analogie à la charge électrique usuelle. Le potentiel vecteur donnant naissance à ce champ par la relation usuelle $\vec{B} = \vec{\nabla} \times \vec{A}$ peut s'écrire (il s'agit d'un choix de jauge particulier)

$$\vec{A} = \frac{g}{r} \frac{1 - \cos \theta}{\sin \theta} \vec{e}_{\varphi}.$$

Nous constatons donc qu'avec ce choix de jauge, le potentiel vecteur est singulier en $\theta = \pi^1$.

Considérons la transformation de jauge

$$\vec{A}' = \vec{A} - \vec{\nabla} \chi,$$

avec $\chi = 2g\varphi$. Une telle transformation va déplacer la singularité, et le nouveau potentiel vecteur s'écrira

$$\vec{A}' = \frac{g}{r} \frac{-1 - \cos \theta}{\sin \theta} \vec{e}_{\varphi}.$$

1. En $\theta = 0$, la divergence est compensée par le terme au numérateur tendant vers 0 de la même manière que $\sin \theta$.

La singularité se retrouve donc à présent en $\theta = 0$.

Dans cette transformation de jauge, la fonction d'onde acquiert une phase

$$\psi(x) \rightarrow \psi'(x) = e^{\frac{ie\chi}{\hbar c} \varphi(x)} = \exp\left(\frac{2ie g \varphi}{\hbar c}\right) \psi(x).$$

Cette phase sera invariante lorsque $\varphi \rightarrow \varphi + 2\pi$, et donc cela impose la condition de quantification suivante

$$\frac{2ge}{\hbar c} \in \mathbb{Z},$$

ce qui traduit la quantification de la charge magnétique en raison de la quantification de la charge électrique. Ainsi en conclusion, si un monopôle magnétique existe, sa charge est quantifiée. Cette démonstration est due à Dirac [9].

3.7 Spin classique et quantique

3.7.1 Cas d'un spin sous champ magnétique

Considérons un spin quantique vérifiant les relations de commutation ($\hbar = 1$)

$$[\hat{S}^a, \hat{S}^b] = i\epsilon^{abc} \hat{S}^c.$$

Lorsqu'un spin est soumis à un champ magnétique \vec{h} , le Hamiltonien d'interaction s'écrit

$$\hat{H} = -\vec{h} \cdot \hat{\vec{S}},$$

et les équations du mouvement associées à ce spin s'écrivent

$$\partial_t \hat{\vec{S}} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{\vec{S}}] = \hat{\vec{S}} \times \vec{h}.$$

Limite classique

Nous nous plaçons tout d'abord dans la limite classique où $S \rightarrow \infty$, et nous introduisons le vecteur unitaire \vec{n} défini par $\vec{S} = S\vec{n}$. L'équation du mouvement sur \vec{S} se réécrit donc comme une équation sur \vec{n} sous la forme

$$\partial_t \vec{n} = \vec{n} \times \vec{h},$$

décrivant ainsi la précession du vecteur \vec{n} autour de l'axe dirigeant le champ magnétique.

Bien sûr, nous aurions pu démontrer ce résultat sans passer par les relations de commutation de spins quantiques mais directement à partir de la dynamique de spins classiques.²

En développant \vec{n} en fonction des angles θ et φ

$$\vec{n} = \begin{pmatrix} \sin \theta \cos \varphi \\ \sin \theta \sin \varphi \\ \cos \theta \end{pmatrix},$$

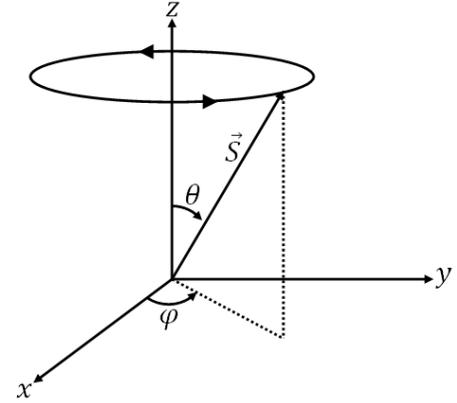


FIGURE 3.6 – Chemin fermé (3.15)

2. En effet, un spin classique réagit comme un gyroscope à un champ extérieur. L'évolution du spin classique est alors engendrée par la donnée de crochets de Poisson. Une fonction $A(\vec{S})$ évolue classiquement dans le temps sous l'action d'un Hamiltonien $H(\vec{S})$ comme

$$\frac{dA}{dt} = \{A; H\}.$$

Les crochets de Poisson sont définis par $\{f, g\} = \epsilon^{abc} \frac{\partial f}{\partial S^a} \frac{\partial g}{\partial S^b} S^c$, ce qui correspond à $\{S^a, S^b\} = \epsilon^{abc} S^c$. Les équations de mouvement d'un spin classique \vec{S} sous l'action d'un Hamiltonien H quelconque prennent alors la forme

$$\frac{dS^a}{dt} = \epsilon^{abc} \frac{\partial H}{\partial S^b} S^c,$$

ou de manière équivalente

$$\frac{d\vec{S}}{dt} = \vec{\nabla} H \times \vec{S}.$$

et en choisissant \vec{h} orienté selon \vec{u}_z , nous sommes alors en mesure de résoudre les équations du mouvement, et nous obtenons

$$\dot{\theta} = 0, \quad \dot{\varphi} = -h.$$

La question se pose de savoir quelle serait l'action classique donnant naissance à ces équations du mouvement. Écrivons l'action sous la forme suivante

$$\mathcal{S} = \int dt \left[p_\varphi \dot{\varphi} + \vec{h} \cdot \vec{S} \right],$$

où p_φ est le moment conjugué à φ dont nous ne connaissons pas l'expression *a priori*. On peut vérifier que les équations du mouvement recherchée peuvent être obtenues en prenant la forme suivante pour le moment conjugué

$$p_\varphi = -S(1 - \cos \theta). \quad (3.16)$$

Munis de cette expression intéressons nous au premier terme de l'action

$$\begin{aligned} \int dt p_\varphi \dot{\varphi} &= -S \int dt (1 - \cos \theta) \dot{\varphi} \\ &= -S \int d\varphi (1 - \cos \theta) \\ &= -S\Omega, \end{aligned}$$

où Ω est l'angle solide engendré par $\vec{n}(t)$ sur une période du mouvement. Nous pouvons récrire ce terme en introduisant

$$W_0 = \frac{\Omega}{4\pi} = \frac{1}{4\pi} \int d\phi (1 - \cos \theta),$$

et nous obtenons donc

$$\int dt p_\varphi \dot{\varphi} = -4\pi S W_0. \quad (3.17)$$

Ce premier terme de l'action a donc une interprétation purement géométrique.

Nous avons pour l'instant obtenu les équations du mouvement dans un système de coordonnées particulier. Peut-on écrire W_0 en fonction de \vec{n} ? Nous avons

$$\dot{n} = \dot{\theta} \vec{e}_\theta + \dot{\varphi} \sin \theta \vec{e}_\varphi,$$

d'où l'action (topologique) \mathcal{S}_{top} s'écrit

$$\mathcal{S}_{top} = -S \int dt (1 - \cos \theta) \dot{\varphi} = -S \int dt \vec{A} \cdot \dot{\vec{n}},$$

où nous avons introduit $\vec{A} = \frac{1 - \cos \theta}{\sin \theta} \vec{e}_\varphi$, potentiel vecteur associé à un monopole, donnant pour le champ magnétique $\vec{B} = \vec{\nabla} \cdot \vec{A} = \vec{e}_r$.

Tout se passe donc comme si nous avons un monopôle magnétique de charge unité au centre de la sphère. Nous pouvons encore écrire l'action topologique comme

$$\mathcal{S}_{top} = -S \int dt \frac{d\vec{n}}{dt} \cdot \vec{A} = -S \int d\vec{n} \cdot \vec{A}.$$

En particulier lorsque l'intégrale est prise sur un contour fermé γ , nous obtenons l'intégration de la connexion de Berry et en utilisant le théorème de Stokes, nous pouvons écrire

$$\begin{aligned} \mathcal{S}_{top} &= -S \oint_\gamma d\vec{n} \cdot \vec{A} \\ &= -S \iint_\Sigma \vec{B} \cdot d^2\vec{S} \\ &= -S\Omega, \end{aligned}$$

où Σ est une surface s'appuyant sur le contour γ . Bien sûr, on retrouve le même résultat mais cela donne une image plus géométrique indépendante du système de coordonnées.

3.7.2 Equations du mouvement du spin

Dans le paragraphe précédent, nous avons obtenu les équations du mouvement d'un spin classique sous l'action d'un champ magnétique en passant par une approche Lagrangienne. Cela nous a obligé à introduire un terme géométrique.

Considérons un spin classique \vec{S} dont la dynamique est gouvernée par un Hamiltonien quelconque $H(\vec{S})$. Les équations du mouvement classiques s'écrivent dans ce cas

$$\frac{d\vec{S}}{dt} = \vec{\nabla}H \times \vec{S}. \quad (3.18)$$

Nous voulons suivre le même raisonnement que précédemment et essayer de retrouver ces équations par un principe variationnel et retrouver de manière plus générale le terme géométrique.

Nous cherchons une action classique de la forme

$$\mathcal{S} = \int dt \left[\vec{\alpha}(\vec{S}) \cdot \frac{d\vec{S}}{dt} - H(\vec{S}) \right],$$

où $|\vec{S}(t)| = 1 \forall t$. On cherche à déterminer $\vec{\alpha}$ par un principe variationnel.

$$\delta\mathcal{S} = \int dt [(\partial_i\alpha_j - \partial_j\alpha_i)\dot{S}_j - \partial_i H] \delta S_i,$$

où les sommes sur les indices répétés sont implicites et nous avons utilisé la notation compacte $\partial_i\alpha_j = \frac{\partial\alpha_j}{\partial S_i}$. Nous cherchons $\delta\mathcal{S} = 0$ pour tout $\delta\vec{S}$ tel que $\vec{S}(t) \cdot \delta\vec{S}(t) = 0$.

Cela signifie que $[(\partial_i\alpha_j - \partial_j\alpha_i)\dot{S}_j - \partial_i H]$ est proportionnel à $S_i(t)$. Ceci s'écrit vectoriellement :

$$\left[(\vec{\nabla} \times \vec{\alpha}) \times \frac{d\vec{S}}{dt} + \vec{\nabla}H \right] // \vec{S}, \forall H.$$

Cela implique

$$[1 + \vec{S} \cdot (\vec{\nabla} \times \vec{\alpha})] \vec{\nabla}H - (\vec{\nabla} \times \vec{\alpha}) \cdot \vec{\nabla}H \vec{S} // \vec{S}, \forall H.$$

On en déduit donc que

$$\vec{S} \cdot (\vec{\nabla} \times \vec{\alpha}) = -1. \quad (3.19)$$

Un choix consiste à prendre :

$$(\vec{\nabla} \times \vec{\alpha}) = -\frac{\vec{S}}{\|\vec{S}\|^2}. \quad (3.20)$$

Si $\vec{S} = S\vec{n}$ et soit γ un lacet sur la sphère unité S^2 . Ce lacet délimite un angle solide Ω . On en déduit donc

$$\int dt \vec{\alpha}(\vec{n}) \cdot \frac{d\vec{S}}{dt} = S \int_{\gamma} \vec{\alpha}(\vec{n}) \cdot d\vec{n} = -S\Omega$$

où l'on a utilisé le théorème de Stokes. On retrouve ainsi le résultat obtenu dans le paragraphe précédent à savoir que $\vec{\alpha}$ peut être identifié à \vec{A} et représente le potentiel vecteur associé à un monopole magnétique. Ce résultat est obtenu pour un Hamiltonien \hat{H} quelconque.

3.7.3 Traitement quantique du spin par l'intégrale fonctionnelle

Quel est le rôle du terme géométrique dans le cas l'on cherche à traiter un problème de spins quantiques par l'intégrale de chemin ?

Dans ce cas, l'action s'écrit

$$\mathcal{S} = \int_{t_i}^{t_f} \left[\vec{A}(t) \cdot \frac{d\hat{S}}{dt} - H(\hat{S}) \right],$$

où $H(\vec{S})$ est quelconque. Soit $\mathcal{A}(\hat{S}_i, t_i; \hat{S}_f, t_f)$, l'amplitude de probabilité pour qu'un spin dans un état \vec{S}_i au temps t_i soit dans l'état \vec{S}_f au temps t_f . Cette amplitude s'exprime par un formalisme d'intégrale de chemin comme

$$\mathcal{A}(\hat{S}_i, t_i; \hat{S}_f, t_f) \propto \int_{S(t_i)=S_i}^{S(t_f)=S_f} \mathcal{D}S \exp \{i\mathcal{S}\},$$

où $\mathcal{D}S$ correspond à la mesure fonctionnelle dans l'espace des spins. Il s'agit d'un objet que nous ne chercherons pas à définir à ce stade. La composante topologique à l'action s'écrit

$$i\mathcal{S}_{top} = iS\Sigma(\vec{n}),$$

où $\Sigma(\vec{n})$ est la surface reposant sur le lacet γ , trajectoire décrite par le spin \vec{S} .

Notons que la jauge que nous avons choisie conduit la singularité à se trouver au pôle sud. Dans le cas où la singularité se trouve au pôle nord, nous aurions

$$i\mathcal{S}_{top} = iS(4\pi - \Sigma'),$$

et le terme $iS4\pi$ supplémentaire n'affectera pas l'intégrale fonctionnelle étant donné que $e^{4i\pi S} = 1$. Notre résultat est donc indépendant de la jauge.

Si nous écrivons à présent la fonction de partition, nous obtenons (τ est le temps imaginaire $\tau = it$)

$$Z = \int \mathcal{D}S \exp \left\{ \int_0^{\beta\hbar} d\tau \, iS \frac{d\vec{n}}{d\tau} \cdot \vec{A} - \int_0^{\beta\hbar} H(\vec{n}(\tau)) d\tau \right\}.$$

Le premier de ces terme est toujours imaginaire pur. Il s'agit d'un terme purement géométrique et invariant sous les changements de paramétrisation $\tau \rightarrow f(\tau) = \tau'$.

3.7.4 Effet tunnel du spin d'une molécule magnétique

Les molécules aimants ou molécules magnétiques sont des molécules qui présentent un magnétisme. Contrairement aux aimants dans lesquels l'aimantation résulte d'un effet coopératif entre les atomes du matériau, dans la molécule aimant, l'aimantation résulte des couplages entre atomes au sein de la molécule.

Les chimistes ont réussi à synthétiser des aimants moléculaires isolés dont il a été possible d'étudier les propriétés magnétiques. Il s'agit en quelque sorte de systèmes modèle puisqu'elles contiennent un petit nombre de spins en interaction. Néanmoins leurs propriétés pourraient s'avérer utile pour l'électronique de spin moléculaire.

Parmi les aimants moléculaires les plus étudiés, l'acétate de Magnésium, que l'on note de manière courte *Mn12* a un spin total $S = 10$. Ce type de molécules donne lieu à des Hamiltoniens à n spins. L'idée est ici d'écrire un Hamiltonien effectif $\hat{H}_{eff}(S)$ correspondant à un seul spin global de notre système.

Écrivons le Hamiltonien effectif suivant

$$\hat{H}_{eff}(S) = K_z(S^z)^2 + K_y(S^y)^2 + K_x(S^x)^2, \quad (3.21)$$

et plaçons nous dans la limite $K_x = 0$ et $K_x \ll K_y \ll K_z$ induisant une anisotropie dans la rigidité des composantes du spin. Ce Hamiltonien peut alors se réécrire

$$\hat{H}_{eff} = K_z S^2 \cos^2 \theta + K_y S^2 \sin^2 \theta \sin^2 \varphi,$$

et l'énergie de notre système obéira donc à la relation de dispersion suivante

$$E = K_z S^2 \cos^2 \theta + K_y S^2 \sin^2 \theta \sin^2 \varphi. \quad (3.22)$$

L'énergie de ce système possède ainsi deux minima en $\theta = \frac{\pi}{2}$, $\varphi = 0$ et en $\theta = \frac{\pi}{2}$, $\varphi = \pi$ (Cf FIGURE 3.7).

Supposons que nous préparions la molécule dans un état $|\varphi = 0\rangle$, quelle est la probabilité que celle-ci se trouve dans l'état $|\varphi = \pi\rangle$? Cette probabilité de transition s'écrit

$$\langle \varphi = \pi | e^{-\beta \hat{H}} | \varphi = 0 \rangle = e^{-\beta E_0} \sum_{\varphi(\beta\hbar) - \varphi(0) = (m-l)\pi} e^{-(m+l)S_0^{cl}(inst)} e^{iS\pi(m-l)} \frac{(D\beta)^{l+m}}{l!m!}.$$

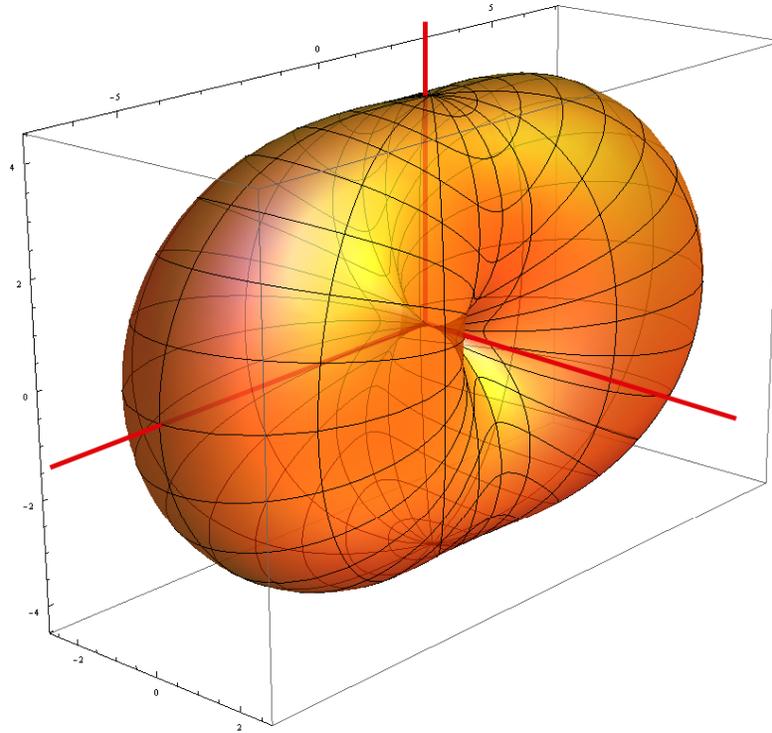


FIGURE 3.7 – Sur cette figure la distance d'un point à l'origine est paramétrisée par la relation de dispersion (3.22). On observe ainsi que les minimums d'énergies sont obtenus pour $\theta = \frac{\pi}{2}$, $\varphi = 0$ et $\theta = \frac{\pi}{2}$, $\varphi = \pi$.

Cette transition fait intervenir le nombre de basculement du spin entre $\varphi = \pi$ et $\varphi = 0$. Une transition de $\varphi = 0$ à $\varphi = \pi$ sera appelé instanton, tandis que la transition inverse sera appelée anti-instanton (Cf. FIGURE (3.8)).

Nous sommes ensuite sur l'ensemble des trajectoires permettant de passer de $|\psi = 0\rangle$ à $|\psi = \pi\rangle$. Dans cette somme m désigne le nombre d'instantons, tandis que l désigne le nombre d'anti-instantons (on se référera à [10] pour une discussion plus poussée des instantons, ainsi que [11]). Le premier des termes de la somme, $e^{-\beta E_0(l)}$ correspond à la contribution de l'énergie de point zéro dans un des puits. Le terme topologique est $e^{iS\pi(m-l)}$, correspondant à la partie $-S \int d\tau \dot{\phi}$ de l'action. Le terme $e^{-(m+l)S_0^{cl}}$ correspond à la contribution de m instantons et l anti-instantons (ils ont le même poids) dans l'intégrale de chemin. Enfin, le terme $(D\beta)^{l+m}/l!m!$ est un terme de dénombrement qui ne nous intéressera pas ici. Celui-ci est un déterminant associé aux fluctuations quadratiques autour du minimum.

Finalement l'amplitude de transition peut se mettre sous la forme

$$\langle \varphi = \pi | e^{-\beta \hat{H}} | \varphi = 0 \rangle = e^{-\beta E_0} \sinh \left(2D\beta \cos \pi S e^{-S_0^{cl}} \right).$$

Ce résultat est dû à Loss, DiVincenzo et Grinstein [12].

On en déduit alors que la probabilité de transition est proportionnelle à $|\cos \pi S|$, et ainsi pour S entier, cette probabilité est finie, tandis que pour S demi-entier, elle est nulle. Ce résultat a été obtenu par une approche semi-classique. Bien-sûr, on peut utiliser une approche purement quantique à savoir diagonaliser le Hamiltonien.

La diagonalisation du Hamiltonien pour $S = 10$ entier fait apparaître que pour $K_y \neq K_z$ un état fondamental non dégénéré, tandis que pour $S = 10, 5$ demi-entier, $\forall K_y, K_z$, celui-ci est doublement dégénéré. Donc pour $S = 10$, il existe une barrière finie qui va lever la dégénérescence entre les deux états.

Pour $S = 10, 5$, il est facile de réaliser que l'ensemble du spectre de H est doublement dégénéré. Donc il n'y a pas de levée de dégénérescence par effet tunnel. Pour le Hamiltonien considéré, il existe des considérations de symétries très générales. Celui-ci est invariant sous la symétrie par renversement temporel. Donc pour S demi-entier, l'état fondamental est doublement dégénéré d'après le théorème de Kramers.

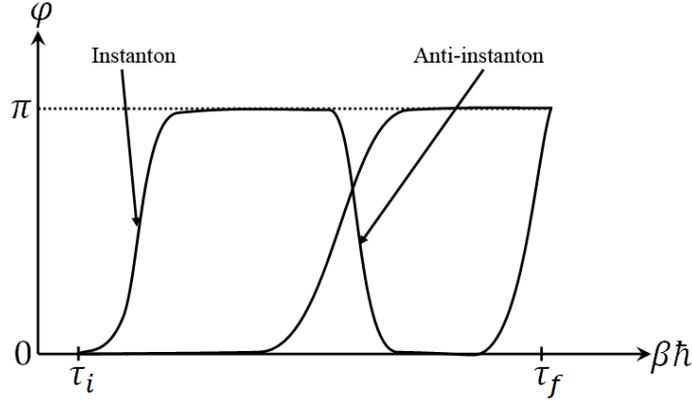


FIGURE 3.8 – Nous regardons l'évolution de l'orientation du spin en fonction du temps imaginaire caractérisée par la présence d'instants et d'anti-instants

3.7.5 Chaîne de spin

Nous considérons une chaîne de spin de longueur L interagissant au travers du Hamiltonien de Heisenberg

$$\hat{H} = -J \sum_i \hat{S}_i \cdot \hat{S}_{i+1}.$$

Nous supposons également des conditions aux limites périodiques.

Considérons en premier lieu le cas ferromagnétique, avec $J > 0$. Pour S grand ($S \gg 1$), nous pouvons écrire $\vec{S}_i = S\vec{n}_i$, avec $|\vec{n}_i|^2 = 1$. Alors

$$J\vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+1} = -\frac{JS^2}{2}(\vec{n}_i - \vec{n}_{i+1})^2 + \text{cst}$$

L'action associée s'écrit

$$\mathcal{S}_{ferro} = \int d\tau \left[\sum_i \frac{JS^2}{2}(\vec{n}_i - \vec{n}_{i+1})^2 + S \sum_i i(1 - \cos\theta_i) \frac{d\phi_i}{d\tau} \right].$$

On peut montrer que le terme topologique ne change pas le spectre de magnons de la chaîne ferromagnétique, dans la mesure où \vec{n}_i et \vec{n}_{i+1} voient quasiment la même phase topologique dans un ferromagnétique. Celle-ci ne donne donc pas lieu à des interférences dans la fonction de partition.

Au contraire, dans le cas antiferromagnétique (AF), une manière commode d'écrire \vec{S}_i est la suivante

$$\vec{S}_i = S(-1)^i \vec{n}_i.$$

Cette écriture préfigure déjà un ordre de type Néel.

Alors nous avons les termes d'action topologique au site i et $i+1$

$$\begin{aligned} \mathcal{S}_{top}^{(i)} &= iS\Sigma(\vec{n}_i) \\ \mathcal{S}_{top}^{(i+1)} &= iS\Sigma(\vec{n}_{i+1}) \simeq iS\Sigma(-\vec{n}_i) \simeq iS(4\pi - \Sigma(\vec{n}_i)). \end{aligned}$$

Par conséquent la somme de tous ces termes topologiques nous donnera pour l'action totale

$$\begin{aligned} \mathcal{S}_{top} &\simeq iS \sum_j (\Sigma(\vec{n}_{2j}) - \Sigma(\vec{n}_{2j+1})) \\ &\simeq \frac{iS}{2} 4\pi W = 2i\pi SW, \end{aligned}$$

où $W \in \mathbb{Z}$.³

La fonction de partition de notre système devient alors

$$Z = \int \mathcal{D}\vec{n} \sum_W e^{2i\pi SW} e^{-\int H_{dir}(\vec{n})}.$$

Nous obtenons donc dans le cas d'un spin entier une exponentielle égale à l'unité n'engendrant pas d'interférences et dans le cas demi-entier un terme $(-1)^W$ engendrant des interférences. Ces calculs suggèrent une différence de comportement entre spin entier et spin demi-entier pour une chaîne de Heisenberg AF isotrope. Ces développements sont basés sur une analyse semi-classique valide a priori à grand $S \gg 1$. Or on connaissait depuis longtemps le spectre de la chaîne de Heisenberg AF pour $S = 1/2$ qui est intégrable par l'Ansatz de Bethe et ne présente pas de gap.

En 1983, en se basant sur ces résultats et le cas $S = 1/2$ connu, Haldane [13] énonce la conjecture suivante : Une chaîne de spin demi-entiers ne présente pas de gap et son état fondamental est doublement dégénéré, tandis qu'une chaîne de spins entiers présente un gap de ses excitations. Ce résultat fut pris avec beaucoup de scepticisme à l'époque. Néanmoins, il fut rapidement confirmé par les diagonalisations de chaînes de spin $S = 1$ AF et également vérifié expérimentalement par la suite.

D'un point de vue théorique, pour S demi-entier, la théorie des champs dérivée par Haldane pour décrire le comportement de la chaîne de Heisenberg AF correspond à un modèle sigma non-linéaire à 1 + 1 dimension avec un terme topologique à $\theta = \pi$. Il a démontré dans les années 90 que ce type de théorie des champs est bien sans gap et peut être relié à une classe plus large de modèles que l'on nomme les modèles de de Weiss-Zumino-Witten-Novikov.

3.7.6 Quelques propriétés des termes topologiques de type Wess-Zumino

Avant de spécifier quelques propriétés des termes de type WZW , résumons quelques propriétés des termes topologiques :

1. Les termes topologiques ne dépendent pas de la métrique et sont donc invariant par reparamétrisation des intégrales

3. Pour démontrer ce résultat, il faut prendre la limite continue

$$\begin{aligned} \mathcal{S}_{top} &\simeq iS \sum_j (\Sigma(\vec{n}_{2j}) - \Sigma(n_{2j+1})) \\ &\simeq iS \int \frac{dx}{2a} \frac{\delta\Sigma}{\delta\vec{n}} \cdot a \partial_x \vec{n} \end{aligned}$$

où $2a$ correspond à la longueur de la maille des deux sous-réseaux ferro.

Or

$$\delta\Sigma(\vec{n}) = \int_0^{\beta\hbar} d\tau \delta \left(\vec{A} \cdot \frac{d\vec{n}}{d\tau} \right).$$

Après un peu d'algèbre, on en déduit que

$$\delta\Sigma(\vec{n}) = \int_0^{\beta\hbar} d\tau \vec{n} \cdot \left(\frac{d\vec{n}}{d\tau} \wedge \delta\vec{n} \right) = \int_0^{\beta\hbar} d\tau \delta\vec{n} \cdot \left(\vec{n} \wedge \frac{d\vec{n}}{d\tau} \right).$$

Donc

$$\mathcal{S}_{top} \simeq \frac{iS}{2} \int dx \int_0^{\beta\hbar} d\tau \left(\vec{n} \wedge \frac{d\vec{n}}{d\tau} \right) \cdot \frac{d\vec{n}}{dx},$$

soit

$$\mathcal{S}_{top} \simeq 2\pi i S \int_0^L \int_0^{\beta\hbar} \frac{dx d\tau}{4\pi} \vec{n} \cdot \left(\frac{d\vec{n}}{d\tau} \wedge \frac{d\vec{n}}{dx} \right).$$

La quantité $W = \int_0^L \int_0^{\beta\hbar} \frac{dx d\tau}{4\pi} \vec{n} \cdot \left(\frac{d\vec{n}}{d\tau} \wedge \frac{\partial\vec{n}}{\partial x} \right)$ est appelé index de Pontryagin et correspond au nombre d'enroulements d'un tore T^2 sur la sphère S^2 ou plus exactement il donne une forme explicite de $\Pi_2(S^2)$. Il s'agit donc d'un entier.

2. Ils sont imaginaires purs dans une représentation en temps euclidien
3. Les terme topologiques ne contribuent pas au Hamiltonien
4. Ils ne dépendent pas d'une échelle d'énergie donnée
5. Ils sont antisymétriques par rapport aux variables de temps ou d'espace

Regardons maintenant de plus près quelques propriétés spécifiques des termes topologiques de type Wess Zumino.

Pour un spin classique $\vec{S} = S\vec{n}$, nous avons vu que

$$S_{top} = -4\pi SW_0$$

avec

$$W_0 = \frac{1}{4\pi} \int dt (1 - \cos(\theta)) \partial_t \Phi = \frac{\Omega}{4\pi} \quad (3.23)$$

W_0 peut également s'exprimer dans une base indépendante d'un système de coordonnées dans laquelle, qui plus est, la symétrie de rotation est apparente.

$$W_0 = \int_0^1 d\rho \int_0^{\beta\hbar} dt \frac{1}{8\pi} \epsilon^{\mu\nu} \vec{n} \cdot [\partial_\mu \vec{n} \wedge \partial_\nu \vec{n}], \quad (3.24)$$

où nous avons supposé des conditions périodiques $\vec{n}(0) = \vec{n}(\beta\hbar)$. Nous avons introduit une coordonnée auxiliaire supplémentaire $\rho \in [0, 1]$ de telle sorte que $\vec{n}(t, \rho = 1) = \vec{n}(t)$ et $\vec{n}(t, \rho = 0) = \vec{e}_z$. Les indices μ, ν prennent leur valeurs dans t, ρ . Le terme de Weiss-Zumino s'exprime sous cette forme comme une intégrale double sur un disque. Néanmoins, il possède la propriété caractéristique suivante : sa variation dépend seulement de la valeur de \vec{n} au bord du disque, c'est-à-dire de $\vec{n}(t, \rho = 1)$. Pour le montrer, il suffit de calculer δW_0

$$\delta W_0 = \int_0^1 d\rho \int_0^{\beta\hbar} dt \frac{1}{4\pi} \epsilon^{\mu\nu} \vec{n} \cdot [\partial_\mu \delta \vec{n} \wedge \partial_\nu \vec{n}] = \int_0^1 d\rho \int_0^{\beta\hbar} dt \partial_\mu \left(\frac{1}{4\pi} \epsilon^{\mu\nu} \vec{n} \cdot [\delta \vec{n} \wedge \partial_\nu \vec{n}] \right)$$

Il en résulte

$$\delta W_0 = \frac{1}{4\pi} \int_0^{\beta\hbar} dt \delta \vec{n} \cdot [\dot{\vec{n}} \wedge \vec{n}].$$

Les équations du mouvement classique ne dépendent donc pas de cette extension auxiliaire selon la direction ρ . Dans cet espace, seule la valeur au bord du terme topologique importe. On peut donc énoncer les propriétés spécifiques suivantes des termes topologiques de type Wess Zumino

1. Le terme topologique de type WZ s'écrit donc comme une intégrale sur une (D+1)-forme dans un espace à $D + 1$ dimensions (un disque à $D + 1$ dimensions noté \mathcal{D}^{D+1} vérifiant $\partial \mathcal{D}^{D+1} = \mathcal{S}^D$) où $D = 1$ dans le cas que nous venons de discuter.
2. Il change les équations du mouvement en changeant les relations de commutation mais n'affecte pas le Hamiltonien.
3. Il peut déboucher sur une théorie sans gap (cas de la chaîne de Heisenberg AF de spin demi-entier).
4. Ils sont reliés au terme θ topologique rencontré dans le cas d'une particule quantique sur un anneau.

3.8 Phase de Berry dans l'espace réciproque

3.8.1 Bandes de Bloch

Nous considérons un Hamiltonien à une particule dans un potentiel périodique

$$V(\vec{r} + \vec{a}) = V(\vec{r}).$$

Dans ce type de potentiels, les fonctions d'onde peuvent être choisies sous la forme de Bloch. Nos fonctions d'onde $\psi_{n,\vec{q}}(\vec{r})$ dépendront ainsi de deux paramètres. D'une part n , l'indice de bande, et d'autre part $\hbar\vec{q}$, le moment du cristal (conjugué à \vec{a}). Ces fonctions d'onde vérifient alors la relation

$$\psi_{n,\vec{q}}(\vec{r} + \vec{a}) = e^{i\vec{q}\cdot\vec{a}}\psi_{n,\vec{q}}(\vec{r}).$$

Cependant notre Hamiltonien est indépendant de \vec{q} , ce qui pose un problème si l'on souhaite définir des quantités telles que la connexion de Berry. Pour introduire cette dépendance, nous écrivons à l'aide d'une transformation unitaire notre Hamiltonien transformé $\hat{H}(\vec{q})$

$$\hat{H}(\vec{q}) = e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}}\hat{H}e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}}.$$

Si notre Hamiltonien de départ est simplement de la forme

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{r}),$$

la transformation unitaire engendre pour $\hat{H}(\vec{q})$ la forme suivante⁴

$$\hat{H}(\vec{q}) = \frac{1}{2m}(\hat{p} + \hbar\vec{q})^2 + V(\hat{r}).$$

L'intérêt d'une telle transformation est avant tout du domaine du pratique. En effet, cette base se prête bien au calcul de phase de Berry.

Les fonctions d'onde du système peuvent d'après le théorème de Bloch se mettre sous la forme

$$\psi_{n,\vec{q}}(\vec{r}) = e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}}u_{n,\vec{q}}(\vec{r}),$$

où les fonctions $u_{n,\vec{q}}(\vec{r})$ sont des fonctions périodiques de période \vec{a} . Nous allons à présent travailler dans la base $\{\hat{H}(\vec{q}), u_{n,\vec{q}}(\vec{r})\}$ en utilisant comme paramètre $\vec{\xi}$ nos vecteurs d'onde \vec{q} . La connexion de Berry de notre problème s'écrit alors

$$\gamma_n = \oint_{\mathcal{C}} d\vec{q} \cdot \langle u_{n,\vec{q}} | i\vec{\nabla}_{\vec{q}} u_{n,\vec{q}} \rangle.$$

La question qui se pose alors consiste à savoir de quelle manière nous pouvons faire varier \vec{q} sur le contour \mathcal{C} . Deux possibilités s'offrent à nous

1. Nous pouvons tout d'abord appliquer un champ magnétique. La phase de Berry va alors se manifester de manière non triviale par des effets d'interférence dans les oscillations magnétiques (on parle d'oscillation de **Shubnikov de Haas**).
2. La deuxième manière de procéder consiste à appliquer un champ électrique qui engendre des variations linéaires en \vec{q} .

Nous choisissons alors comme contour fermé la première zone de Brillouin. Pour ce faire, il est nécessaire de savoir si les vecteurs $|\psi_{n,\vec{q}}\rangle$ et $|\psi_{n,\vec{q}+\vec{G}}\rangle$ sont équivalents (où \vec{G} est un vecteur de l'espace réciproque).

En particulier, les kets $|\psi_{n,\vec{q}}\rangle$ et $|\psi_{n,\vec{q}+\vec{G}}\rangle$ vérifient la même équation de Schrödinger et les mêmes conditions de bord

$$\begin{aligned} \psi_{n,\vec{q}}(\vec{r} + \vec{a}) &= e^{i\vec{q}\cdot\vec{a}}\psi_{n,\vec{q}}(\vec{r}) \\ \psi_{n,\vec{q}+\vec{G}}(\vec{r} + \vec{a}) &= e^{i\vec{q}\cdot\vec{a}}\psi_{n,\vec{q}+\vec{G}}(\vec{r}). \end{aligned}$$

Potentiellement, ces deux vecteurs peuvent différer par une phase près. Cette phase n'étant pas fixée, elle dépend de notre choix de jauge. Nous nous plaçons alors dans la jauge de Resta, qui est une jauge périodique, c'est-à-dire que

$$|\psi_{n,\vec{q}}\rangle = |\psi_{n,\vec{q}+\vec{G}}\rangle.$$

En conséquence, nos fonctions de Bloch sont telles que

$$u_{n,\vec{q}}(\vec{r}) = e^{i\vec{G}\cdot\vec{r}}u_{n,\vec{q}+\vec{G}}(\vec{r}).$$

4. Ce résultat peut être obtenu par le calcul de $\partial_{\vec{q}}\hat{H}(\vec{q})$ puis l'intégration de cette quantité.

3.8.2 Symétries

Nous avons vu précédemment que la courbure de Berry s'écrivait

$$\Omega_{\alpha,\beta}^{(0)} = i \left(\left\langle \frac{\partial \psi_0(\vec{\xi})}{\partial \xi^\alpha} \middle| \frac{\partial \psi_0(\vec{\xi})}{\partial \xi^\beta} \right\rangle - \left\langle \frac{\partial \psi_0(\vec{\xi})}{\partial \xi^\beta} \middle| \frac{\partial \psi_0(\vec{\xi})}{\partial \xi^\alpha} \right\rangle \right),$$

où $|\psi_0(\vec{\xi})\rangle$ est l'état fondamental **non dégénéré** de notre système. Nous définissons alors $\hat{P}^0(\vec{\xi})$ le projecteur sur cet état

$$\hat{P}^0(\vec{\xi}) = |\psi_0(\vec{\xi})\rangle \langle \psi_0(\vec{\xi})|, \quad (3.25)$$

et l'opérateur complémentaire

$$\hat{Q}^0(\vec{\xi}) = 1 - \hat{P}^0(\vec{\xi}).$$

On peut montrer que la courbure de Berry se met alors sous la forme

$$\Omega_{\alpha\beta}^{(0)} = -2\Im \left(\text{Tr} \{ \partial_\alpha \hat{P}^0(\vec{\xi}) \hat{Q}^0(\vec{\xi}) \partial_\beta \hat{P}^0(\vec{\xi}) \} \right). \quad (3.26)$$

Les symétries de l'état fondamental se reflétant dans les projecteurs $\hat{P}^0(\vec{\xi})$ et $\hat{Q}^0(\vec{\xi})$ se retrouvent dans les symétries du Hamiltonien

Considérons tout d'abord que le paramètre $\vec{\xi}$ est pair sous l'effet du renversement du temps. Dans ce cas $\hat{H}(\vec{\xi})$ et $\hat{P}^0(\vec{\xi})$ seront réels $\forall \vec{\xi}$. Ce comportement est par exemple obtenu pour $\vec{\xi} \equiv \vec{r}$. Dans ce cas, la connexion de Berry dépend de si le chemin considéré dans l'intégrale entoure ou non une singularité dans l'espace réciproque (cône de Dirac ...). Dans le cas où le chemin n'entoure pas de singularité

$$\Omega(\vec{\xi}) = 0 \text{ [} 2\pi\text{]},$$

tandis que dans le cas où le chemin entoure une singularité, deux valeurs sont possibles

$$\Omega(\vec{\xi}) = 0 \text{ ou } \pi \text{ [} 2\pi\text{]}.$$

Si nous supposons à présent $\vec{\xi}$ comme une fonction impaire sous le renversement du temps (comme dans le cas où $\vec{\xi} \equiv \vec{q}$), le projecteur $\hat{P}^0(\vec{\xi})$ est tel que

$$\hat{P}^0(-\vec{\xi}) = \hat{P}^{0*}(\vec{\xi}),$$

induisant pour la connexion de Berry

$$\Omega_{\alpha\beta}^{(0)}(-\vec{\xi}) = -\Omega_{\alpha\beta}^{(0)}(\vec{\xi}).$$

Si en plus, nous avons symétrie d'inversion le long du chemin d'intégration, alors $\Omega = 0$, et il en est de même pour le nombre de Chern. Cependant, si le chemin n'entoure pas de singularité $\Omega = 0$ ou π [2 π].

3.8.3 Exemples

Chaîne dimérisée

En application des résultats précédents, considérons le cas d'une chaîne dimérisée, aussi appelée chaîne SSH (Cf. FIGURE (3.9)).

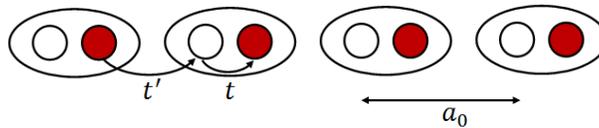


FIGURE 3.9 – Chaîne d'atomes dimérisée

Ce système est décrit en prenant des amplitudes de saut t et t' différentes entre deux sites adjacents. Nous avons ainsi deux atomes distincts a et b sur lesquels les électrons peuvent sauter. En indiquant m le m -ième dimère de notre

chaîne, nous sommes alors en mesure d'écrire le Hamiltonien sous la forme suivante (où les opérateurs de création \hat{a}^\dagger et \hat{b}^\dagger se rapportent à l'un et à l'autre des atomes du dimère)

$$\hat{H} = \sum_{m=1}^M \left[t' \hat{b}_m^\dagger \hat{a}_m + t \hat{a}_{m+1}^\dagger \hat{b}_m + \text{h.c.} \right] \quad (3.27)$$

La diagonalisation de ce Hamiltonien se fait alors dans la base de Bloch. Nous introduisons les vecteurs

$$\hat{\psi}_k^\dagger = (\hat{\psi}_{Ak}^\dagger \quad \hat{\psi}_{Bk}^\dagger) = \frac{1}{\sqrt{M}} \sum_{m=1}^M e^{ia_0 m k} (\hat{a}_m^\dagger \quad \hat{b}_m^\dagger),$$

et le Hamiltonien intermédiaire

$$\hat{\mathcal{H}}^B(\vec{k}) = -t \begin{pmatrix} 0 & \rho(\vec{k}) \\ \rho^*(\vec{k}) & 0 \end{pmatrix},$$

où $\rho(k) = \frac{t'}{t} + e^{-ika_0}$. On constate alors que notre Hamiltonien se met sous la forme

$$\hat{H} = \sum_{k=2\pi n/a_0} \hat{\psi}_{k,n}^\dagger \hat{\mathcal{H}}^B(k) \hat{\psi}_{k,n}. \quad (3.28)$$

Le Hamiltonien $\hat{\mathcal{H}}^B(\vec{k})$ peut encore s'écrire

$$\hat{\mathcal{H}}^B(\vec{k}) = -t \vec{g}(\vec{k}) \cdot \vec{\sigma},$$

où $\vec{\sigma} = \begin{pmatrix} \sigma_x \\ \sigma_y \end{pmatrix}$, et $\vec{g}(\vec{k}) = \left(\frac{t'}{t} + \cos ka_0, \sin ka_0 \right)$. La diagonalisation de notre Hamiltonien est alors triviale, et nous obtenons deux bandes obéissant à la relation de dispersion

$$\varepsilon_\pm(\vec{k}) = \pm t |g(\vec{k})| = \pm t \sqrt{t^2 + t'^2 + 2tt' \cos ka_0}.$$

Pour déterminer les fonctions propres de notre Hamiltonien, nous introduisons la phase $\phi(\vec{k})$ des fonctions $\rho(\vec{k})$ (i.e. $\rho(\vec{k}) = |\rho(\vec{k})| e^{-i\phi(\vec{k})}$) telle que

$$\phi(\vec{k}) = \arctan \left[\frac{t'}{t \sin ka_0} + \cotan(ka_0) \right]$$

Nos fonctions propres $|u_{k,\pm}\rangle$ s'écrivent alors

$$|u_{k,\pm}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{-i\phi(k)} \\ \pm 1 \end{pmatrix}.$$

Munis de ces fonctions, nous pouvons alors déterminer la phase dite **phase de Zak** et notée Z_α (ou $\alpha = \pm 1$)

$$Z_\alpha = \oint dk \langle u_{k,\alpha} | i \partial_k u_{k\alpha} \rangle = \frac{1}{2} \oint dk \frac{d\phi}{dk} = \frac{\Delta\phi}{2}. \quad (3.29)$$

Dans le cas $t' > t$, la phase de Zak vaut $Z = 0$, tandis que dans le cas $t' < t$, cette phase est non-triviale et vaut $Z = \pi$. La différence entre ces deux cas correspond à la présence pour $Z = \pi$ d'états de bords dans lesquels des atomes en bout de chaîne se trouvent non appariés. Nous avons à $t'/t = 1$ une transition topologique pour laquelle nous avons fermeture du gap.

À $k = 0$, $\hat{\mathcal{H}}^B(0) = -(t' + t)\sigma_x$, nous donnant les deux valeurs propres $\pm(t' + t)$. On peut alors identifier chacune des bandes indépendamment de la parité. À $k = \pi$, $\hat{\mathcal{H}}^B(\pi) = -(t' - t)\sigma_x$, nous donnant les deux valeurs propres $\pm(t - t')$. Notre transition topologique est donc caractérisée par une inversion de bande.

Graphène et Nitrure de bore sous champ

Nous avons vu que sous l'application d'un champ magnétique, le graphène exhibe des niveaux de Landau et est caractérisé par une orbite cyclotron. Nous définissons alors $S(c)$ de la manière suivante (c désigne l'orbite cyclotron)

$$S(c) = \iint_{\Sigma_c} d^2k,$$

où Σ est la surface entourée par l'orbite cyclotron dans l'espace réciproque. En reprenant l'expression de la longueur magnétique $l_B = \sqrt{\hbar/eB}$, nous pouvons montrer que

$$S(c)l_B^2 = 2\pi(n + \gamma), \quad (3.30)$$

où n est un entier, et γ une phase qui n'est pas donnée par les résultats d'un calcul semi-classique mais pas les ordres suivants.

Si l'on connaît la relation de dispersion, nous pouvons calculer

$$S(\varepsilon_0)l_B^2 = 2\pi(n + \gamma_L).$$

En particulier, dans le cas d'électrons libres où $\varepsilon_0 = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$, nous obtenons $S(c) = \pi k^2 = \frac{2\pi m}{\hbar^2} \varepsilon_0$, et alors

$$S(\varepsilon_0)l_B^2 = \frac{2\pi m}{\hbar^2} \frac{\hbar}{eB} \varepsilon_0.$$

Sous l'effet d'un champ magnétique, $\varepsilon_0 = (n + \frac{1}{2}) \frac{\hbar e B}{m}$ (niveaux de Landau), et ainsi

$$S(\varepsilon)l_B^2 = 2\pi \left(n + \frac{1}{2} \right),$$

et la phase est donc

$$\gamma_L = \frac{1}{2}. \quad (3.31)$$

En général γ_L et γ ne sont pas en correspondance univoque. On peut en effet montrer que

$$\gamma_L = \frac{1}{2} - \frac{1}{2\pi} \Gamma(c),$$

où $\Gamma(c)$ est la phase de Berry sur l'orbite cyclotron

$$\Gamma(c) = i \oint d\vec{k} \cdot \langle u_k | \vec{\nabla}_k u_k \rangle,$$

et donc $S(\varepsilon_0)l_B^2 = 2\pi \left(n + \frac{1}{2} \right) - \Gamma(c)$.

Considérons à présent un modèle à deux bandes caractérisé par le Hamiltonien

$$\hat{H}(\vec{k}) = \begin{pmatrix} \Delta & f(\vec{k}) \\ f^*(\vec{k}) & -\Delta \end{pmatrix} \quad (3.32)$$

auquel nous faisons subir la transformation unitaire $\hat{H}^B(\vec{k}) = e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}} \hat{H} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}$. Le cas $\Delta = 0$ correspondra au graphène, tandis que le cas $\Delta \neq 0$ se rapportera au nitrure de Bore.

Si notre système possède une symétrie par renversement du temps, $f^*(k) = f(-k)$. Le spectre est alors

$$\varepsilon_0(k) = \alpha \sqrt{\Delta^2 + |f(k)|^2}.$$

Définissons $\beta(k)$ et $\phi(k)$ par

$$\cos \beta(k) = \frac{\Delta}{|\varepsilon_0(k)|} \quad \sin \beta(k) = \frac{f(k)}{|\varepsilon_0(k)|} \quad (3.33)$$

$$\phi(k) = -\text{Arg}(f(k)). \quad (3.34)$$

Nous pouvons alors mettre le Hamiltonien $\hat{H}^B(\vec{k})$ sous la forme

$$\hat{H}^B(\vec{k}) = |\varepsilon_0(k)| \begin{pmatrix} \cos \beta & \sin \beta e^{-i\phi} \\ \sin \beta e^{i\phi} & -\cos \beta \end{pmatrix}. \quad (3.35)$$

Nos états propres sont alors

$$|u_{k,1}\rangle = \begin{pmatrix} \cos \beta/2 \\ \sin \beta/2 e^{i\phi} \end{pmatrix}, \quad |u_{k,-1}\rangle = \begin{pmatrix} -\sin \beta/2 e^{-i\phi} \\ \cos \beta/2 \end{pmatrix}.$$

De cette forme pour les vecteurs propres, nous en déduisons les différentes quantités topologiques. Nous avons pour la connexion de Berry

$$\vec{A} = -\alpha \sin^2 \frac{\beta}{2} \vec{\nabla}_k \phi,$$

pour la courbure de Berry

$$\begin{aligned} \vec{\Omega} &= \frac{\alpha}{2} \vec{\nabla}_k (\cos \beta) \times \vec{\nabla}_k \phi \\ &= -\frac{\alpha}{2} \sin \beta (\partial_{k_x} \beta \partial_{k_y} \phi - \partial_{k_x} \phi \partial_{k_y} \beta) \vec{e}_z, \end{aligned}$$

et pour la phase de Berry

$$\Gamma(c) = \oint_c d\vec{k} \cdot \vec{A}(\vec{k}).$$

La phase de Berry est calculée sur une orbite cyclotron. Sur une telle orbite, $\varepsilon_0(k)$ est constant, et donc $\beta(k)$ également. Nous en déduisons que

$$\begin{aligned} \Gamma(c) &= -\alpha \sin^2 \frac{\beta}{2} \oint d\vec{k} \cdot \vec{\nabla}_k \phi \\ &= \pi(1 - \cos \beta) W_c, \end{aligned}$$

où

$$W_c = -\alpha \oint \frac{d\phi}{2\pi} \in \mathbb{Z}.$$

Nous avons

$$S(\varepsilon_0) l_B^2 = 2\pi \left(n + \frac{1}{2} \right) - \Gamma(c),$$

où ε_0 est la dispersion en l'absence de champ. Si nous sommes à présent en présence d'un champ, la relation de dispersion devient

$$\varepsilon = \varepsilon_0 + \mathcal{M}B,$$

et l'expression précédente devient alors

$$S(\varepsilon_0) l_B^2 = 2\pi \left(n + \frac{1}{2} \right) - \pi W_c,$$

nous en déduisons donc la valeur de γ_L

$$\gamma_L = \frac{1}{2} - \frac{W_c}{2}, \quad (3.36)$$

avec $W_c \in \mathbb{Z}$. Ce résultat est dû à Piechon et al. [14].

Appliquons les résultats précédents au cas du nitrure de Bore. Nous rappelons que ce système est analogue au graphène à la différence que deux types d'atomes forment le réseau hexagonal. Il en résulte des énergies différentes selon les sites considérés. Nous notons 2Δ la différence d'énergie entre ces deux types de sites

$$\varepsilon_A - \varepsilon_B = 2\Delta \neq 0.$$

Nous avons vu au chapitre 2 que la dispersion était donnée par

$$f(k) = -t \left[e^{-i\vec{k} \cdot \vec{\delta}_1} + e^{-i\vec{k} \cdot \vec{\delta}_2} + e^{-i\vec{k} \cdot \vec{\delta}_3} \right].$$

Nous pouvons alors en déduire la courbure de Berry

$$\Omega^\alpha(k) = \frac{a^2 \sqrt{3} \alpha t^2 \Delta}{|\varepsilon_0(k)|^3} \sin\left(\vec{k} \cdot \frac{\vec{\delta}_2 - \vec{\delta}_3}{2}\right) \sin\left(\vec{k} \cdot \frac{\vec{\delta}_3 - \vec{\delta}_1}{2}\right) \sin\left(\vec{k} \cdot \frac{\vec{\delta}_1 - \vec{\delta}_2}{2}\right),$$

et la phase de Berry

$$\Gamma(c) = \pi W_c \left[1 - \frac{\Delta}{|\varepsilon_0(k)|} \right],$$

où $W_c = -\alpha \oint \frac{d\phi}{\pi}$. Cette quantité vaudra ± 1 lorsque l'orbite cyclotron considérée entourera un point de Dirac et 0 sinon.

En utilisant les relations semi-classiques, on peut également obtenir les niveaux de Landau sous la forme

$$\varepsilon_n = \alpha \sqrt{\Delta^2 + 2eB \left(n + \frac{1}{2} - \frac{W_c}{2} \right)}.$$

Dans le cas du graphène, notre spectre n'est pas gappé et donc $\Delta = 0$. La connexion de Berry s'écrit dans ce cas

$$\vec{\mathcal{A}} = -\frac{\alpha}{2} \xi \vec{\nabla}_k \theta,$$

où α est l'indice de bande et ξ vaut ± 1 selon que l'on entoure un point K ou K' . La chiralité est $\alpha\xi = \eta$ et nous pouvons grâce à cette quantité exprimer la phase de Berry

$$\Gamma = \oint d\vec{k} \cdot \vec{\mathcal{A}} = -\pi\alpha\xi = -\pi\eta.$$

Nous avons donc fait émerger un lien entre la chiralité et la phase de Berry.

Nous avons pour la courbure de Berry

$$\Omega = \Gamma \delta^2(k),$$

qui est singulière générant $\varepsilon_n \propto \sqrt{2neB}$. Les points de Dirac engendrent donc une phase de Berry non triviale et sont à l'origine du niveau de Landau $n = 0$.

3.9 Transport adiabatique et polarisation

Nous considérons ici un Hamiltonien dépendant du temps et périodique de période T

$$\hat{H}(t+T) = \hat{H}(t).$$

3.9.1 Courant pompé

Les développements de cette section sont tirés de [15].

Considérons le cas d'une chaîne dimérisée avec un potentiel chimique alterné décrite par le Hamiltonien

$$\hat{H} = \sum_j \left[\left(\frac{t}{2} + (-1)^j \frac{\delta}{2} \right) (\hat{c}_j^\dagger \hat{c}_{j+1} + \text{h.c.}) + \Delta (-1)^j \hat{c}_j^\dagger \hat{c}_k \right]. \quad (3.37)$$

La dépendance temporelle est introduite en faisant dépendre δ et Δ du temps via

$$\begin{aligned} \Delta &\rightarrow \Delta(t) = \Delta_0 \cos t \\ \delta &\rightarrow \delta(t) = \delta_0 \sin t. \end{aligned}$$

Nous nous plaçons sur un réseau, le système est alors décrit en termes d'ondes de Bloch. L'équation de Schrödinger s'écrit

$$\hat{H}(t) |\psi(t)\rangle = i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle,$$

et les états $|\psi(t)\rangle$ sont donnés par

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' E_n(t')\right) a_n(t) |n(t)\rangle,$$

les vecteurs $|n(t)\rangle$ étant les vecteurs propres instantannés.

L'injection de ces fonctions d'ondes dans l'équation de Schrödinger conduit à une équation sur les paramètres $a_n(t)$

$$\dot{a}_n(t) = \frac{da_n(t)}{dt} = \sum_{a_l(t)} \langle n(t) | \frac{\partial}{\partial t} | l(t) \rangle e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' (E_l(t') - E_n(t'))}.$$

Nous faisons l'hypothèse adiabatique, garantissant de ne pas avoir de mélange des états. La jauge choisie est la jauge de transport parallèle décrite par

$$\langle n(t) | \frac{\partial}{\partial t} | n(t) \rangle = 0.$$

Après quelques manipulations, on obtient $a_n(t_0) = 1$ et $a_{n'}(t_0) = 0$. On prépare $|\psi(t)\rangle$ dans l'état $|n(t_0)\rangle$ à $t = t_0$. L'état du système se décompose alors sous la forme d'une somme de deux termes comme

$$|\psi(t)\rangle = \exp \left\{ -\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' E_n(t') \right\} \left(|n\rangle - i\hbar \sum_{n' \neq n} \frac{\langle n' | \frac{\partial}{\partial t} | n \rangle}{E_n - E_{n'}} |n'\rangle \right). \quad (3.38)$$

Le facteur exponentiel de cette expression est le terme de phase global habituel. L'état de Bloch est alors

$$|u_n(t)\rangle \simeq |u_n(t_0)\rangle - i\hbar \sum_{n' \neq n} \frac{\langle u_{n'} | \frac{d}{dt} | u_n \rangle}{E_n - E_{n'}} |u_{n'}\rangle. \quad (3.39)$$

Dans cette expression on observe que le terme $\langle u_{n'} | \frac{d}{dt} | u_n \rangle$ ressemble à une connexion de Berry à la condition que t puisse être vu comme un paramètre extérieur (on identifie alors t à ξ).

Nous cherchons à calculer le courant $\hat{j} = -e\hat{v}$, où l'opérateur vitesse est défini comme la dérivée temporelle de l'opérateur position

$$\hat{v} = \dot{r} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{r}] = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \hat{H}}{\partial q}(q, t),$$

où le Hamiltonien $\hat{H}(\vec{q}, t)$ est défini à partir du Hamiltonien de départ \hat{H} comme

$$\hat{H}(\vec{q}, t) = e^{-i\vec{q} \cdot \hat{r}} \hat{H} e^{i\vec{q} \cdot \hat{r}}.$$

Les valeurs propres de l'opérateur vitesse sont telles que

$$v_n(q, t) = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \varepsilon_n(q, t)}{\partial q} - i \sum_{n' \neq n} \left(\frac{\langle u_{n'} | \frac{\partial}{\partial t} | u_n \rangle \langle u_n | \frac{\partial \hat{H}}{\partial q} | u_{n'} \rangle}{E_n - E_{n'}} - \text{c.c.} \right).$$

En effet, $v_n(q, t) = \langle u_n(t) | \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \hat{H}}{\partial q} | u_n(t) \rangle$, et on peut montrer que l'expression précédente en découle⁵ Les valeurs propres de l'opérateurs vitesses font intervenir la courbure de Berry $\Omega_{q,t}^n$ dans l'espace des paramètres (q, t)

$$v_n(q, t) = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \varepsilon_n}{\partial q} - \Omega_{q,t}^n. \quad (3.40)$$

Connaissant la vitesse, le courant est obtenu en sommant sur les bandes n remplies et en intégrant sur la zone de Brillouin, c'est-à-dire

$$j(t) = -e \sum_{n_{\text{filled}}} \int_{BZ} \frac{dq}{2\pi} v_n(q, t) = e \sum_n \int \frac{dq}{2\pi} \Omega_{q,t}^n. \quad (3.41)$$

Le courant est ainsi directement lié à la courbure de Berry, et nous avons donc un lien direct entre quantité physique et quantité topologique.

5. En particulier on remarquera que dans l'approximation adiabatique

$$\langle u_n | \frac{\partial \hat{H}}{\partial q} | u_{n'} \rangle \simeq (\varepsilon_n - \varepsilon_{n'}) \langle \frac{\partial u_n}{\partial q} | u_{n'} \rangle$$

Si on considère à présent le courant porté par la bande n sur une période temporelle, nous devons supprimer la somme sur n dans l'expression (3.41) et la remplacer par une intégrale sur t entre 0 et T (où nous rappelons que T est la période du Hamiltonien). Le courant est donc pour la bande n

$$i_n = -e \int_0^T dt \int_{BZ} \frac{dq}{2\pi} \Omega_{q,t}^n.$$

Ces deux intégrales correspondent à l'intégration de la courbure de Berry sur un Tore, d'où (d'après le théorème de Gauss-Bonnet)

$$i_n = pe, \quad p \in \mathbb{Z}, \quad (3.42)$$

où p joue donc le rôle du premier nombre de Chern C_1 .

Le courant étant quantifié nous avons donc un pompage de la charge lorsque le Hamiltonien est périodique, il existe un lien entre la charge pompée et la topologie du système au travers du nombre de Chern lorsque celui-ci est non nul. Cette prédiction a été faite par Thouless en 1983 [15].

Nous avons vu que la courbure de Berry obéissait à la règle de somme [16], ainsi si nous avons deux bandes pour notre système, $p = -1$ correspond à une bande pleine et $p = 1$ à la bande de conduction, et ainsi un courant non nul dans la bande pleine implique un courant non nul dans la bande de conduction, et ainsi les bandes "parlent" entre elles. Cependant les bandes ne peuvent *a priori* pas se parler si elles ne communiquent pas, ce qui détruit le fait d'avoir deux bandes séparées. Il s'agit ainsi d'une inconsistance de notre interprétation qui cependant ne semble pas invalider pour autant le résultat final.

Si nous reprenons le modèle de Rice-Mele décrit par le Hamiltonien présenté au début de cette section (3.37), nous pouvons à une dimension écrire

$$\hat{H}(q) = \vec{h}(q) \cdot \vec{\sigma},$$

avec

$$\vec{h}(q) = (t \cos \frac{qa}{2}, -\delta \cos \frac{qa}{2}, \Delta).$$

Nous obtenons alors deux bandes

$$\varepsilon_{\pm} = \pm \|\vec{h}(q)\| = \pm \sqrt{\Delta^2 + t^2 \cos^2 \frac{qa}{2} + \delta^2 \cos^2 \frac{qa}{2}}.$$

Soit q dans la première zone de Brillouin ($q \in [0, \frac{2\pi}{a}]$), le point de dégénérescence est obtenu pour $\Delta = \delta = 0$ et $q = \frac{\pi}{a}$. En introduisant la périodicité de $\Delta(t)$ et $\delta(t)$ via

$$\begin{aligned} \Delta(t) &= \Delta_0 \cos \frac{2\pi t}{T} \\ \delta(t) &= \delta_0 \sin \frac{2\pi t}{T}. \end{aligned}$$

Le couple de paramètres $\Delta(t)$ et $\delta(t)$ décrivent ainsi un cercle autour de $(0,0)$ dans l'espace des paramètres, et donc $\langle Q \rangle_T = \pm e$, induisant donc un transfert de charge sans voltage. Si au contraire on choisit un autre contour n'encerclant pas le point $(0,0)$ alors $\langle Q \rangle_T = 0$.

Chapitre 4

Isolants topologiques

Pour cette partie sur les isolants topologiques on pourra se référer aux revues récentes [17] et [18] pour de plus amples détails.

4.1 Effet Hall quantique

4.1.1 Classique

Avant de décrire l'effet Hall quantique, nous allons tout d'abord rappeler brièvement en quoi consiste sa version classique.

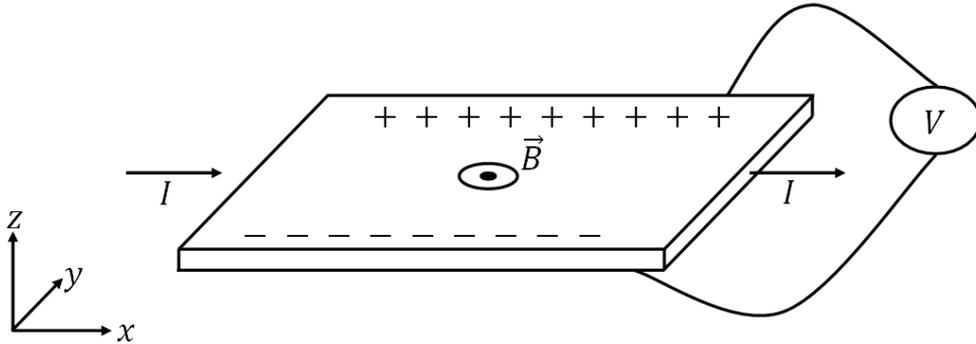


FIGURE 4.1 – Principe expérimental de l'effet Hall

Le principe de l'effet Hall est représenté sur la figure (4.1). On considère une gaz d'électrons bidimensionnel sous un champ magnétique transverse. On applique un champ électrique 'selon la direction x , un courant I traverse donc le gaz d'électrons. Ce courant génère une polarisation sur les bords du matériau dont résultera une tension appelée tension de Hall. Classiquement les équations décrivant le mouvement des électrons au sein du métal sont les suivantes :

$$m \left(\frac{d\vec{v}}{dt} + \frac{\vec{v}}{\tau} \right) = -e(\vec{E} + \vec{v} \wedge \vec{B}), \quad (4.1)$$

les frottements ou relaxation possibles au sein du matériau pour les électrons de conduction étant décrits via le terme \vec{v}/τ , τ correspondant au temps de relaxation.

Dans le régime permanent, la vitesse est constante, nous permettant de réécrire les équations du mouvement sous la forme des deux équations couplées suivantes

$$\begin{aligned} v_x &= -\frac{e\tau}{m} E_x - \omega_c \tau v_y, \\ v_y &= \omega_c \tau v_x, \end{aligned}$$

où nous avons défini $\omega_c = \frac{eB}{m}$.

Le courant correspondant est alors donné par $\vec{j} = -ne\vec{v}$, et celui-ci obéit donc aux équations

$$\begin{aligned} j_x &= \frac{\sigma_0}{1 + (\omega_c\tau)^2} E_x \\ j_y &= \frac{\sigma_0\omega_c\tau}{1 + (\omega_c\tau)^2} E_x, \end{aligned}$$

où $\sigma_0 = \frac{ne^2\tau}{m}$. La première de ces équations est simplement l'équation de Drude lorsque nous prenons la limite $\omega_c \rightarrow 0$ décrivant le mouvement d'électrons subissant une force de frottement dans le régime stationnaire.

Partant de ces équations pour le courant, nous pouvons alors en déduire les composantes du tenseur de conductivité

$$\begin{aligned} \sigma_{xx} &= \frac{\sigma_0}{1 + (\omega_c\tau)^2} \\ \sigma_{yx} &= \frac{\sigma_0}{1 + (\omega_c\tau)^2} \\ \sigma_{yy} = \sigma_{xx} & \quad \sigma_{xy} = -\sigma_{yx}, \end{aligned}$$

et de même nous obtenons les composantes du tenseur de résistivité

$$\begin{aligned} \rho_{xx} &= \frac{1}{\sigma_0} \\ \rho_{xy} &= \frac{m\omega_c}{n_e^2} = \frac{1}{ne} B, \end{aligned}$$

dans lesquelles réside l'effet Hall classique, c'est-à-dire la dépendance linéaire de $\rho_{xy} = \rho_H$ avec le champ magnétique

$$\rho_H = \rho_{xy} \propto B. \quad (4.2)$$

Définissons à présent la densité surfacique $n = \frac{N}{A}$, nous avons

$$\rho_{xy} = \frac{AB}{ne} = \frac{1}{N} \frac{\phi}{e} = \frac{1}{\nu} \frac{h}{e^2},$$

où $\nu = N \frac{\phi_0}{\phi}$ est appelé facteur de remplissage et où $\phi_0 = \frac{h}{e}$. Le rapport ϕ/ϕ_0 définit le nombre de quantum de flux. le facteur de remplissage est donc le nombre total d'électrons divisé par le nombre total de quantum de flux. La composante ρ_{xy} du tenseur de résistivité est telle que

$$\rho_{xy} = \frac{1}{\nu} R_K,$$

où $R_K = \frac{h}{e^2}$ est appelé quantum de résistance (ou le von Klitzing). Cette valeur est mesurée expérimentalement à 9 chiffres significatifs $R_K = 25812,807557\Omega$ et est de ce fait utilisé comme un nouveau standard d'unité en métrologie depuis 1990.

4.1.2 Quantique

Nous avons donc vu que la prédiction classique est celle d'une résistivité proportionnelle au champ B . Cependant en 1980 [19] les mesures de résistivité de Hall avec $V_g(\propto \nu)$ et B donnent les résultats représentés schématiquement sur la figure (4.2). Il observe un large plateau dans la résistivité de Hall à la valeur $R_{xy} = 6453,3\omega = R_K/4$ tandis que $R_{xx} = 0$. Ce large plateau peut être associé au facteur de remplissage $\nu = 4$. Des mesures plus précises furent effectués par la suite et ont donné lieu à la figure et (4.3). On observe un plateau pour chaque valeur entière du facteur de remplissage et donc ρ_H est fortement non linéaire en champ contrairement au cas classique.

Pour tenter de comprendre cet effet via un phénomène quantique considérons le cas d'un gaz d'électrons sous champ magnétique (niveaux de Landau) sans bord. Les niveaux d'énergie sont donnés par

$$\varepsilon_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega_c,$$

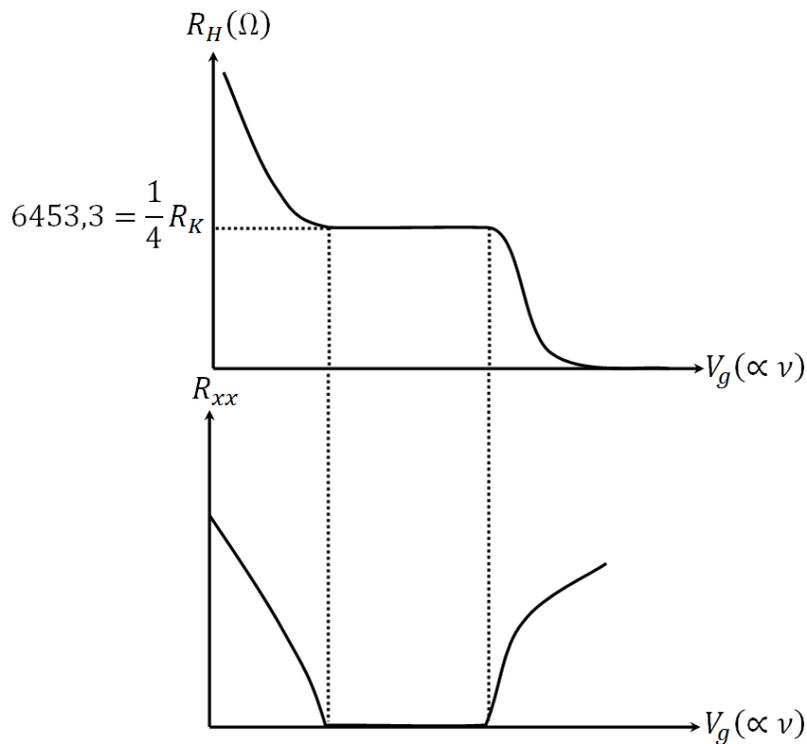
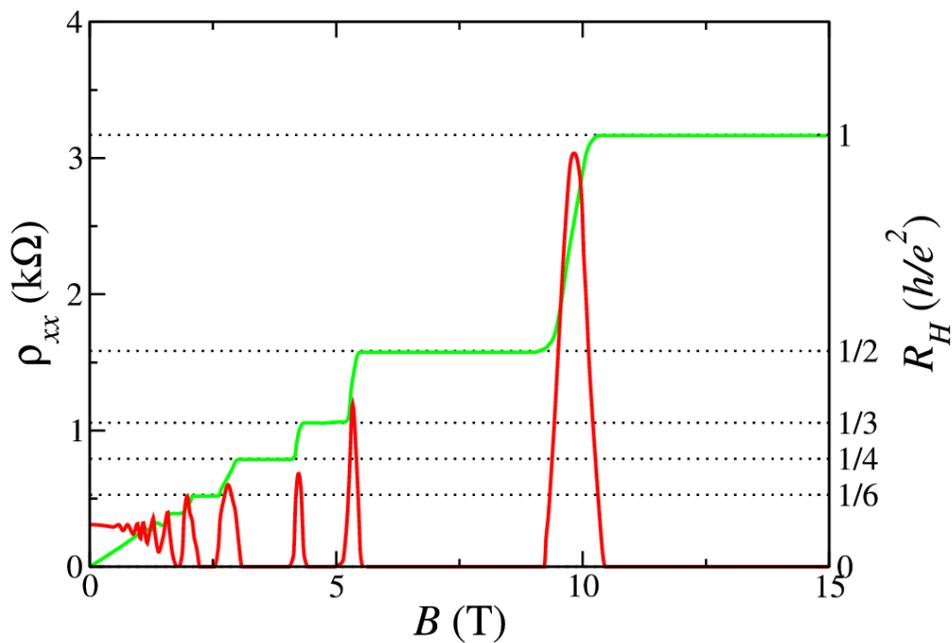
FIGURE 4.2 – Résistance R_H et R_{xx} mesurées expérimentalement

FIGURE 4.3 – Mesure de la resistivité avec le champ magnétique

tandis que les fonctions d'onde sont données par

$$\psi_{n,k}(x, y) = e^{ikx} \chi_n(y - l_B^2 k),$$

où nous avons $\omega_c = \frac{eB}{m}$ et où nous rappelons que la longueur cyclotron est définie comme $l_B = \sqrt{\frac{\hbar c}{eB}}$.

Pour un système d'aire A , le nombre d'électrons dans chaque niveau est donné par

$$\mathcal{N} = \frac{A}{2\pi l_B^2} = \frac{\phi}{\phi_0}.$$

Le premier niveau de Landau est rempli lorsque $N = \mathcal{N}$. On s'attend à une périodicité dans le facteur de remplissage $\nu = \frac{N}{\mathcal{N}}$, or on observe que $\rho_{xy} = \frac{1}{\nu} R_K$ (présence de plateaux) et $\rho_{xx} = 0$.

La caractéristique la plus remarquable de ce phénomène est la précision extrême avec laquelle R_H peut être mesurée (9 chiffres après la virgule!!), et il est légitime de se poser la question d'une telle robustesse.

4.1.3 Une première explication

La première tentative d'explication phénoménologique de l'effet Hall quantique est due à Laughlin [20]. Laughlin réalise l'expérience de pensée suivante (Cf. figure (4.4)), du conducteur considéré précédemment, il construit un cylindre au travers duquel passe un flux magnétique φ . Ce flux magnétique ne doit pas être confondu avec celui généré par le champ magnétique qui reste perpendiculaire à la surface du cylindre et est donc radial. Le flux φ sert à varier et à contrôler le moment k_y .

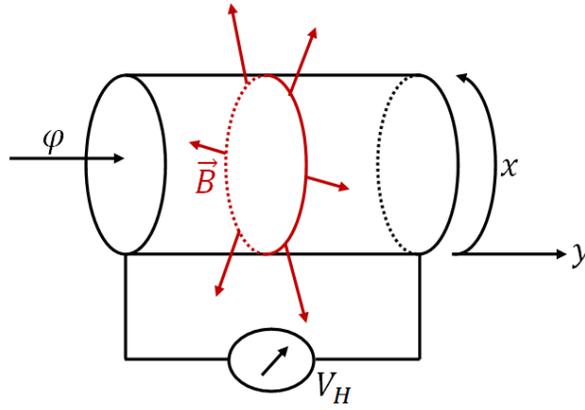


FIGURE 4.4 – Principe de l'expérience de pensée de Laughlin

Notre problème est alors une généralisation de celui d'un électron sur un anneau soumis à un flux magnétique transverse φ . Les niveaux d'énergies de ce système sont alors donnés par

$$\begin{aligned} \varepsilon_n(\varphi) &= \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{2\pi}{L} \right)^2 \left(n + \frac{\varphi}{\phi_0} \right)^2 \\ &= \frac{\hbar^2}{2m} \left(k + \frac{2\pi\varphi}{K\phi_0} \right)^2, \end{aligned}$$

où m est la masse de l'électron, L la circonférence de l'anneau et $\Phi_0 = h/e$ le quantum de flux élémentaire.

le spectre étant périodique en ϕ_0 (doublement dégénéré en $\phi_0/2$). Le courant (permanent) est donné par

$$i_n = -\frac{d\varepsilon_n(\varphi)}{d\varphi},$$

et résulte du magnétisme orbital de l'électron induit par le flux magnétique φ .

Revenons à l'expérience de pensée de Laughlin. Le Hamiltonien de notre système est

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} [(\hat{p}_x + eA)^2 + \hat{p}_y^2] + \hat{V}(x, y) + eE_y,$$

et le courant est donné par

$$I_x = -\frac{\partial U(\varphi)}{\partial \varphi} = -\frac{1}{L} \frac{\partial U(\varphi)}{\partial A},$$

où U est l'énergie totale des électrons.

Nous pouvons alors nous demander ce qu'il advient en présence de désordre. Tout d'abord en l'absence de désordre la densité d'états est constituée de pics situés aux différents niveaux de Landau (Cf. FIGURE (4.5) en noir). L'introduction de désordre génère un élargissement de ces pics (en rouge sur la figure) causant finalement un recouvrement des différents pics. Ces zones de recouvrement correspondent à des états localisés tandis que les pics en eux-mêmes correspondent à des états non-localisés.

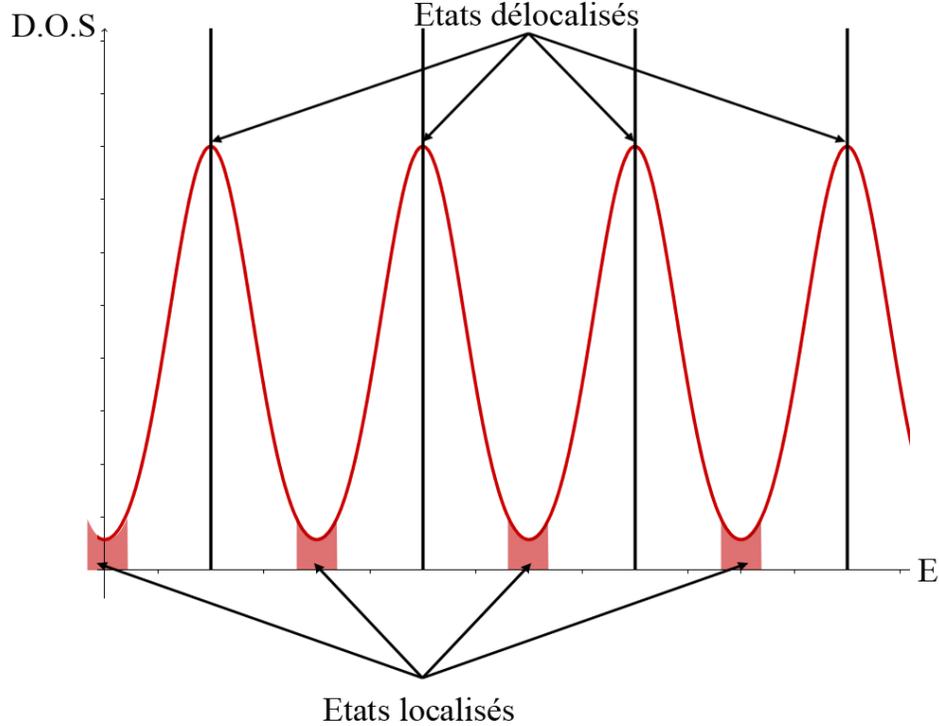


FIGURE 4.5 – Effet du désordre sur la densité d'états.

Supposons que le niveau de Fermi ε_F soit ajusté dans un gap de mobilité (un "pseudo-gap" en réalité en raison du recouvrement causé par le désordre), le courant I_n sera alors porté par les états délocalisés.

Changeons maintenant le flux φ par exactement un quantum de flux, donc $\varphi \rightarrow \varphi + \phi_0$. Les moments p_x de tous les états occupés du système sont alors translatés de $2\pi/L$, qui est l'écart moyen entre les niveaux selon la direction x .

Dans ce cas, $A \rightarrow A + \Delta A$, avec $\Delta A = \frac{\phi_0}{L}$, c'est-à-dire que tous les états délocalisés se transforment en eux-mêmes tandis que les états localisés ne sont pas affectés du tout. La différence d'énergie entre ces deux situations est donnée par

$$U(\varphi - \phi_0) - U(\varphi) \simeq -\phi_0 I_x \neq 0.$$

Notons que l'on est passé de dérivée partielle à une dérivée. On suppose en fait une variation très lente, infinitésimale du flux. Le flux φ joue le rôle de paramètre de pompage par analogie avec l'article de Thouless [15]. L'argument de Laughlin consiste à dire que cette variation d'énergie ne peut venir que des bords (selon y) de l'échantillon car le bulk est isolant. En effet ceci n'est possible que si un nombre entier d'électrons est transféré entre les deux bords, et donc la conservation de l'énergie implique

$$-\phi_0 I_x = -neV_y,$$

avec n entier, et ainsi

$$\rho_{xy} = \frac{V_y}{I_x} = \frac{1}{n} \frac{h}{e^2}.$$

La deuxième étape du raisonnement consiste à montrer que $n = \nu$ (ν correspondra alors au nombre de niveaux de Landau). Ceci est possible à montrer en l'absence de désordre dans la mesure où le modèle est dans ce cas intégrable. Laughlin utilise ensuite un argument d'adiabaticité pour justifier le caractère général du résultat.

4.1.4 TKKN

L'argument de Laughlin possède cependant des points faibles, notamment au niveau de la pertinence de la notion de gap dans les niveaux de Landau. Celui-ci peut donc être amélioré grâce au calcul explicite de la conductivité effectué par Thouless, Kohmoto, Nightingale et den Nijs (TKKN) [21].

L'idée de TKKN est de considérer un système d'électrons sous champ dans un potentiel périodique spatialement sans désordre. Le potentiel vérifie alors

$$U(x, y) = U(x + a, y) = U(x, y + b).$$

On impose de plus à notre système un champ magnétique transverse dont le nombre de quanta de flux par cellule ab sera donné par

$$\varphi = ab \frac{eB}{\hbar}.$$

On suppose que le flux peut se réécrire comme le rapport d'entiers

$$\varphi = \frac{p}{q}. \quad (4.3)$$

Nous nous plaçons dans le cadre de ce problème dans la jauge de Landau

$$\vec{A} = (0, Bx).$$

La généralisation du théorème de Bloch à deux dimensions sous champ nous donne les relations suivantes

$$\begin{aligned} \psi_{k_1 k_2}(x, y) &= \psi_{k_1 k_2}(x, y + b) e^{-ik_2 b}, \\ &= \psi_{k_1 k_2}(x + qa, y) e^{-ik_1 a} e^{-2ip \frac{y}{b}}. \end{aligned}$$

Dans la base de Bloch, nos fonctions d'onde peuvent se mettre sous la forme d'ondes de Bloch

$$u_{k_1 k_2} = \psi_{k_1 k_2} \exp(-ik_1 x - ik_2 y),$$

vérifiant

$$\begin{aligned} u_{k_1 k_2}(x, y) &= u_{k_1, k_2}(x, y + b), \\ &= u_{k_1 k_2}(x + qa, y) e^{-\frac{2i\pi p y}{b}}. \end{aligned}$$

Nous écrivons également notre Hamiltonien dans la base de Bloch :

$$\begin{aligned} \tilde{H}(k_1, k_2) &= e^{-i(k_1 x + k_2 y)} \hat{H} e^{i(k_1 x + k_2 y)} \\ &= \frac{1}{2m} \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} + \hbar k_1 \right)^2 + \frac{1}{2m} \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial y} + \hbar k_2 - eBx \right)^2 + U(x, y). \end{aligned}$$

Sous les hypothèses précédentes, TKKN ont effectué un calcul de la conductivité de Hall dans la théorie de la réponse linéaire (dans le champ électrique). Ce calcul fait appel à la théorie de la réponse linéaire quantique formulée par Kubo et est assez fastidieux. Je ne le détaillerai pas (en fait je ne sais pas où il est détaillé proprement). TKKN donnent directement le résultat final suivant [21] :

$$\sigma_H = \frac{ie^2 \hbar}{L_x L_y} \sum_{\alpha, \beta} \sum_{\epsilon_{\alpha k} < \epsilon_F < \epsilon_{\beta k}} \frac{\langle u_{\alpha k} | \hat{v}_x | u_{\beta k} \rangle \langle u_{\beta k} | \hat{v}_y | u_{\alpha k} \rangle - (\alpha \leftrightarrow \beta)}{(\epsilon_{\alpha k} - \epsilon_{\beta k})^2}. \quad (4.4)$$

Dans cette expression, α et β désignent les indices de bandes, et les bornes de sommations de l'énergie correspondent à l'obligation d'avoir un gap dans notre système, l'énergie de Fermi étant dans ce gap. Les quantités L_x et L_y sont simplement les dimensions latérales de notre échantillon.

Nous supposons donc l'existence d'un gap (le dénominateur n'étant ainsi jamais divergent).

L'opérateur vitesse ou vélocité \hat{v} est défini comme

$$\hat{v} \equiv \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \tilde{H}}{\partial \vec{k}}, \quad (4.5)$$

ce qui fait ainsi apparaître l'expression (4.4) comme une courbure de Berry. La conductivité de Hall peut encore se réécrire (en notant n le nombre de bandes remplies, $\varepsilon_n < \varepsilon_F < \varepsilon_{n+1}$)

$$\begin{aligned}\sigma_H &= \frac{2e^2}{\hbar} \Im \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{BZ} dk \sum_{\alpha=1}^n \sum_{\beta=n+1}^{\infty} \frac{\langle u_{\alpha k} | \partial_x \tilde{H}_k | u_{\beta k} \rangle \langle u_{\beta k} | \partial_y \tilde{H}_k | u_{\alpha k} \rangle}{(\varepsilon_{\alpha k} - \varepsilon_{\beta k})^2} \\ &= \frac{2e^2}{\hbar} \Im \sum_{\alpha=1}^n \langle \partial_x u_{\alpha k} | \partial_y u_{\alpha k} \rangle \\ &= -\frac{1}{2} \Omega_{xy}(k) \frac{2e^2}{\hbar},\end{aligned}$$

où $\Omega_{xy}(k)$ est la courbure de Berry. Finalement nous avons pour la conductivité de Hall

$$\sigma_H = -\frac{e^2}{h} C_1,$$

où $C_1 \in \mathbb{Z}$. Nous avons donc une conductivité proportionnelle à un invariant topologique qui est dans ce cas le premier nombre de Chern. Il s'agit d'un résultat très important dans la mesure où il relie la conductance de Hall à un invariant topologique. Ceci explique donc la robustesse des plateaux de Hall mesurés expérimentalement.

Nous avons donc relié la conductance de Hall aux propriétés de l'état fondamental de notre système en faisant trois hypothèses

1. L'absence de désordre dans notre système
2. La présence d'un potentiel périodique en espace
3. L'existence d'un gap (mis à la main) $\varepsilon_n < \varepsilon_F < \varepsilon_{n+1}$

Comme nous allons le voir dans le paragraphe suivant, la clé est surtout le gap qui protège la quantification.

4.1.5 Un argument plus général : Niu-Thouless-Wu

Un argument plus général à l'effet Hall a été donné par Niu, Thouless et Wu [22]. Considérons le Hamiltonien

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^N \left[\frac{1}{2m} \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x_i} \right)^2 + \frac{1}{2m} \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial y_i} - eBx_i \right)^2 \right] + \sum_{i=1}^N U(x_i, y_i) + \sum_{j=1}^N \sum_{i < j} V(\|\vec{r}_i - \vec{r}_j\|),$$

décrivant un système d'électrons en interaction avec possiblement présence de désordre (contenu dans $U(x_i, y_i)$).

Le calcul de la conductivité dans la théorie de la réponse linéaire donne pour la conductivité de Hall

$$\sigma_H = \frac{ie^2\hbar}{L_x L_y} \sum_{n>0} \frac{(v_{0n}^x)(v_{n0}^y) - (v_{0n}^y)(v_{n0}^x)}{(E_0 - E_n)^2}, \quad (4.6)$$

avec

$$\begin{aligned}\hat{v}^x &= \frac{1}{2m} \sum_{i=1}^N \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial x_i} \right), \\ \hat{v}^y &= \frac{1}{2m} \sum_{i=1}^N \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial y_i} - eBx_i \right),\end{aligned}$$

les éléments de matrice étant pris comme $v_{0n}^x = \langle 0 | \hat{v}^x | n \rangle$. Nous désignons ici par $|0\rangle$ l'état fondamental et par $|n\rangle$ un état quelconque (ces états n'étant pas nécessairement des états à une particule). L'hypothèse fondamentale faite est celle de l'existence d'un état fondamental bien défini, c'est-à-dire séparé des états excités afin d'éviter la divergence de la conductivité ceci quelque soit les conditions de bord que l'on considère.

Dans l'argument de Laughlin discuté dans un paragraphe ci-dessus, nous formons un tube avec le gaz bidimensionnel et considérons un flux magnétique traversant la section du tube. Ce flux arbitraire revient à imposer une condition de bord particulière sur la fonction d'onde dans une direction et à analyser le courant pompé d'un bord à l'autre lorsque l'on varie cette condition de bord sur une période. L'idée de Qiu, Thouless et Wu [22] consiste à étendre et généraliser l'argument de Laughlin en imposant des conditions de bord particulières sur la fonction

d'onde (à N particules) selon les deux directions spatiales et à analyser comment varie la conductivité de Hall lorsque l'on change ces conditions de bord.

Selon cette logique, on choisit les conditions aux limites suivantes pour la fonction d'onde

$$\begin{aligned}\psi(x_i + L_x) &= e^{i\kappa_x L_x} e^{i\frac{B}{\hbar} y_i L_x} \psi(x_i), \\ \psi(y_i + L_y) &= e^{i\kappa_y} \psi(y_i),\end{aligned}$$

où κ_x, κ_y sont des paramètres quelconque homogène à l'inverse d'une longueur.

On effectue la transformation unitaire suivante :

$$\begin{aligned}\phi_n &= \exp(-i\kappa_x(x_1 + \dots + x_n)) \exp(-i\kappa_y(y_1 + \dots + y_n)) \psi_n \\ \tilde{H} &= U^{-1} \hat{H} U.\end{aligned}$$

Cette transformation unitaire joue un rôle analogue à la base de Bloch. En effet, sous l'action de cette transformation, \tilde{H} s'obtient simplement à partir de H en changeant :

$$\begin{aligned}-i\partial_{x_i} &\longrightarrow -i\partial_{x_i} + \kappa_x, \\ -i\partial_{y_i} &\longrightarrow -i\partial_{y_i} + \kappa_y.\end{aligned}$$

Dans ce cas $\hat{v}^{x/y} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \tilde{H}}{\partial \kappa_{x/y}}$ sont juste les nouveaux opérateurs de vélocité.

On peut donc exprimer la conductivité de Hall en fonction des degrés des paramètres $\kappa_{x/y}$.

$$\sigma_H(\alpha, \beta) = \frac{e^2 \hbar}{L_x L_y} \sum_{n>0} \frac{\langle \phi_0 | \frac{\partial \tilde{H}}{\partial \alpha} | \phi_n \rangle \langle \phi_n | \frac{\partial \tilde{H}}{\partial \beta} | \phi_0 \rangle}{(E_0 - E_n)^2}. \quad (4.7)$$

On reconnaît également dans cette équation une expression analogue à l'intégrand qui intervient dans le calcul de la courbure de Berry. Par des manipulations analogues à celles de TKKN, on peut récrire la conductivité de Hall comme

$$\begin{aligned}\sigma_H(\theta, \varphi) &= \frac{ie^2}{\hbar L_x L_y} \left[\left\langle \frac{\partial \phi_0}{\partial \kappa_x} \middle| \frac{\partial \phi_0}{\partial \kappa_y} \right\rangle - \left\langle \frac{\partial \phi_0}{\partial \kappa_y} \middle| \frac{\partial \phi_0}{\partial \kappa_x} \right\rangle \right] \\ &= \frac{ie^2}{\hbar} \left[\left\langle \frac{\partial \phi_0}{\partial \theta} \middle| \frac{\partial \phi_0}{\partial \varphi} \right\rangle - \left\langle \frac{\partial \phi_0}{\partial \varphi} \middle| \frac{\partial \phi_0}{\partial \theta} \right\rangle \right],\end{aligned} \quad (4.8)$$

où l'on a introduit les phases $\theta = \kappa_x L_x$ et $\varphi = \kappa_y L_y$.

On fait ensuite l'hypothèse que la conductivité de Hall ne dépend des conditions aux bords. Il s'agit d'une hypothèse forte déjà présente dans l'argument de Laughlin mais de manière explicite. On calcule alors la quantité recherchée en moyennant sur les paramètres θ et φ

$$\sigma_H = \langle \sigma_H(\theta, \varphi) \rangle = \int \frac{d\theta}{2\pi} \int \frac{d\varphi}{2\pi} \sigma_H(\theta, \varphi). \quad (4.9)$$

Comme $(\theta, \varphi) \in [0, 2\pi] \times [0, 2\pi]$, il en résulte que

$$\sigma_H = \frac{2^2}{h} C_1, \quad (4.10)$$

où $C_1 \in \mathbb{Z}$ est le premier nombre de Chern. Il s'agit là d'un résultat beaucoup plus fort que celui de TKKN car très peu d'hypothèse ont été formulées sur l'hamiltonien sous champ. Le résultat est valable en présence de désordre et d'interactions.

La quantification de la conductivité de Hall repose ainsi directement sur l'existence d'un gap bien défini dans le gaz d'électrons bidimensionnel sous champ. Le désordre joue à cet égard un rôle important pour ouvrir ce gap en localisant les électrons.

4.2 Effet Hall quantique anormal et isolants de Chern

L'effet Hall a été mesuré pour la première fois en 1879 ce qui permit d'établir la proportionnalité entre ρ_{xy} et le champ magnétique transversal appliqué B . En 1883, des mesures de conductivité sur des échantillons magnétiques montrent une saturation de ρ à une valeur reliée à l'aimantation, on parle de conductivité anormale. La compréhension de ce phénomène ne date que des années 2000. Je renvoie à la revue de Nagaosa et al. [23] qui fait le tour du sujet.

4.2.1 Retour sur le modèle de Haldane comme prototype d'effet Hall quantique anormal

Comme nous l'avons déjà détaillé dans le chapitre 2, Haldane[3] a introduit un modèle qui présente des analogies de comportement avec l'effet Hall quantique entier mais en l'absence de champ magnétique global extérieur (donc sans niveau de Landau) juste en ajoutant des flux magnétiques opposés à l'échelle des sous-réseaux qui constituent la cellule intermédiaire. Quand bien même, ce modèle n'a, à ce jour, pas de réalisation expérimentale, il a joué un rôle important dans la compréhension des isolants topologiques bidimensionnels. Comme pour l'effet Hall quantique entier, le modèle de Haldane est caractérisé par un invariant topologique, le premier nombre Chern $C_1 \in \mathbb{Z}$. De part cette analogie de comportement avec l'effet Hall quantique entier, on parle d'isolant de Chern ou d'effet Hall quantique anormal.

Nous avons étudié précédemment (2.7.2) consistant en l'introduction d'un terme de saut aux seconds voisins dans le Hamiltonien décrivant le graphène avec des flux magnétiques de direction opposées dans chaque sous réseau. Nous avons également vu que les seuls paramètres apparaissant étaient t_1 , t_2 , φ et $\varepsilon_1 - \varepsilon_2$. Rappelons les quantités qui avaient été utilisées

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \sum_{\vec{k}} \sum_{a,b} \varepsilon_{ab} \hat{c}_a^\dagger(\vec{k}) \hat{\mathcal{H}}_{ab}(\vec{k}) \hat{c}_b(\vec{k}) \\ \hat{\mathcal{H}}(\vec{k}) &= \varepsilon_0(\vec{k}) \hat{1}_2 + \vec{d}(\vec{k}) \cdot \vec{\sigma} \\ \varepsilon_0(\vec{k}) &= 2t_2 \cos \varphi \sum_{i=1}^3 \cos(\vec{k} \cdot \vec{b}_i) \\ d_x(\vec{k}) &= t \sum_{i=1}^3 \cos(\vec{k} \cdot \vec{\delta}_i) \\ d_y(\vec{k}) &= t \sum_{i=1}^3 \sin(\vec{k} \cdot \vec{\delta}_i) \\ d_z(\vec{k}) &= \frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_2}{2} + 2t_2 \sin \varphi \sum_{i=1}^3 \sin(\vec{k} \cdot \vec{b}_i),\end{aligned}$$

les différents vecteurs étant définis à la figure (2.1). Le terme en σ_z du Hamiltonien est celui brisant les symétries \mathcal{T} et \mathcal{P} . Les bandes sont données par

$$\varepsilon(\vec{k}) = \varepsilon_0(\vec{k}) \pm |\vec{d}(\vec{k})|,$$

exhibant donc deux bandes pour lesquelles les fonctions d'ondes sont

$$\begin{aligned}\phi_+(\vec{k}) &= \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta_k}{2} e^{-i\phi_k/2} \equiv u_1 \\ \sin \frac{\theta_k}{2} e^{-i\phi_k/2} \equiv u_2 \end{pmatrix} \\ \phi_-(\vec{k}) &= \begin{pmatrix} \sin \frac{\theta_k}{2} e^{-i\phi_k/2} \equiv u_{-1} \\ -\cos \frac{\theta_k}{2} e^{-i\phi_k/2} \equiv u_{-2} \end{pmatrix}\end{aligned}$$

Les angles θ_k et ϕ_k sont définis par $\hat{d}(\vec{k}) \equiv \frac{\vec{d}(\vec{k})}{\|\vec{d}(\vec{k})\|}$ pour lequel (en supposant $\|\vec{d}(\vec{k})\| \neq 0$)

$$\hat{d}(\vec{k}) = \begin{pmatrix} \cos \phi_k \sin \theta_k \\ \sin \phi_k \sin \theta_k \\ \cos \theta_k \end{pmatrix}. \quad (4.11)$$

À partir des états propres $\alpha = \pm$, nous pouvons accéder à la connexion de Berry

$$\begin{aligned}\vec{A}_\alpha(\vec{k}) &= i\phi_\alpha(\vec{k}) \vec{\nabla}_k \phi_\alpha(\vec{k}) \\ &= i \sum_{a=1,2} u_{\alpha a} \vec{\nabla}_k u_{\alpha a},\end{aligned}$$

et à la courbure de Berry

$$\Omega_\alpha^z(\vec{k}) = (\vec{\nabla}_k \wedge \vec{A}_\alpha(\vec{k}))_z. \quad (4.12)$$

Nous obtenons donc pour le nombre de Chern

$$C_\alpha = \frac{1}{2\pi} \int d^2k \Omega_\alpha^z(k) = \alpha = \pm 1. \quad (4.13)$$

Nous avons donc un nombre de Chern non trivial et par conséquent des propriétés topologiques non triviales de notre système.

Une autre formulation des propriétés topologiques peut se faire *via* l'opérateur de courant proportionnel à l'opérateur de vélocité

$$\hat{j}_i = \frac{\partial \hat{\mathcal{H}}(\vec{k})}{\partial k_i},$$

soit

$$\hat{j}_i = \frac{\partial \varepsilon_0(k)}{\partial k} \hat{1}_2 + \frac{\partial \vec{d}(\vec{k})}{\partial k_i} \cdot \vec{\sigma},$$

c'est le deuxième terme qui est responsable des propriétés topologiques du système.

La conductivité de Hall s'écrit alors à l'aide des fonctions de Fermi $f_\pm(\vec{k})$ comme

$$\sigma_{xy} = \frac{e^2}{\hbar} \int \frac{d^2k}{4\pi} \left(\frac{\partial \vec{d}(\vec{k})}{\partial k_x} \wedge \frac{\partial \vec{d}(\vec{k})}{\partial k_y} \right) \cdot \vec{d}(\vec{k}) (f_+(k) - f_-(k)). \quad (4.14)$$

En supposant $T = 0$ et le potentiel chimique dans le gap, nous obtenons le résultat suivant, général pour tout modèle à deux bandes

$$\sigma_{xy} = \frac{e^2}{\hbar} \int_{\text{Bandes remplies}} \frac{d^2k}{4\pi} \left(\frac{\partial \vec{d}}{\partial k_x} \wedge \frac{\partial \vec{d}}{\partial k_y} \right) \cdot \vec{d} = \frac{e^2}{\hbar} n_W, \text{ où } n_W \in \mathbb{Z}. \quad (4.15)$$

n_W est appelé **index de Pontryagin** et correspond au nombre d'enroulement d'un tore T^2 sur une sphère S^2 . Dans le cas du modèle de Haldane, $n_W = \pm 1$ (dans les phases topologiques). Ainsi, les propriétés topologiques sont formulées directement au niveau du Hamiltonien, sans nécessairement avoir besoin de passer par les fonctions d'onde. Pour modifier n_W , il faut changer les paramètres de \hat{H} . Avec $\hat{d}(k)$, nous aurons alors une interprétation analogue à la texture de spin. Nous avons

$$\frac{\partial \vec{d}(\vec{k})}{\partial k_x} \wedge \frac{\partial \vec{d}(\vec{k})}{\partial k_y} = \left(\frac{\partial \theta_k}{\partial k_x} \frac{\partial \phi_k}{\partial k_y} - \frac{\partial \theta_k}{\partial k_y} \frac{\partial \phi_k}{\partial k_x} \right) \sin \theta_k \vec{d},$$

et notre index de Pontryagin s'écrit alors

$$\begin{aligned} n_W &= \frac{1}{4\pi} \int d^2l \sin \theta_k \left(\frac{\partial \theta_k}{\partial k_x} \frac{\partial \phi_k}{\partial k_y} - \frac{\partial \theta_k}{\partial k_y} \frac{\partial \phi_k}{\partial k_x} \right) \\ &= -\frac{1}{4\pi} \int d^2k \left(\vec{\nabla} \wedge (\cos \theta_k \vec{\nabla} \phi_k) \right)_z, \end{aligned}$$

ce qui en utilisant le théorème de Stokes et en introduisant le contour Γ sur lequel repose la surface intégrée nous donne

$$n_W = -\frac{1}{4\pi} \oint_{\Gamma} \cos \theta_k \vec{\nabla} \phi_k \cdot d\vec{l}. \quad (4.16)$$

Cette intégrale est nulle sauf si Γ encercle des singularités, qui sont ici les points auxquels les bandes se touchent, soient les points de Dirac définis ici par $\vec{k} = \vec{K}_\pm$. Nous avons en ces points $d_x(K_\pm) = d_y(K_\pm) = 0$, les points de Dirac étant définis par $\gamma(k) = \sum_{\alpha=1}^3 e^{i\vec{k} \cdot \vec{\delta}_\alpha} = 0$. Les points de Dirac sont donc envoyés par l'applications $\vec{d}(\vec{k})$ sur un ou les pôles. L'intégrale donnant n_W sera non triviale suivant que le chemin Γ encercle ou non les pôles de la sphère parcourue par θ_k et ϕ_k . Ces pôles sont tels que pour le pôle nord $\cos \theta_k \simeq 1$ et pour le pôle sud $\cos \theta_k \simeq -1$.

Le signe de $d_z(k)$ (la masse) nous indique quel pôle est atteint. Si aucun pôle n'est encerclé, $n_W = 0$. Pour le cas de l'isolant de Semenoff, $d^z(\pm K) = M_1 > 0$, et donc seul le pôle nord est atteint ce qui donne

$$n_W^{Sem} = -\frac{1}{4\pi} (2\pi(\xi = +1) + 2\pi(\xi = -1)) = 0.$$

Le nombre de Chern est nul car il faut prendre en compte la chiralité ξ des points de Dirac. Concrètement, la chiralité rentre en jeu dans l'intégrale sur le contour Γ puisqu'elle détermine dans quel sens on entoure le pôle (le sens trigonométrique ou le sens inverse).

Pour le modèle de Haldane, $d^z(+K) = M_1 > 0$ et $d^z(-K) = -M_1 < 0$, en raison de l'inversion de bande. Les deux pôles sont donc atteints lorsque l'on a une inversion de bande! Nous avons donc

$$n_W^{Haldane} = -\frac{1}{4\pi}(2\pi(\xi = +1)\text{sgn}(M_+) - 2\pi(\xi = -1)\text{sgn}(M_-)) = \pm 1,$$

L'index de Pontryagin pouvant se mettre sous la forme plus générale

$$n_W = \frac{1}{2}[\text{sgn}(M_-) - \text{sgn}(M_+)]$$

et est donc déterminé par le signe des masses des bandes. Pour résumer, pour un avoir un nombre de Chern non-nul il est nécessaire d'avoir des inversions de bandes. Si les deux bandes ont le même signe de masse, alors $n_W = 0$.

Lorsque l'on varie le sparamètres du modèle de Haldane (le flux et la différence d'énergie entre sous-réseaux) le modèle de Haldane présente trois type de phases : une phase normale avec $n_W = 0$, et deux phases topologiques avec $n_W = \pm 1$.

Ce critère simple sur le signe des masses des différentes bandes nous offre également une recette pour faire de l'ingénierie d'isolant de Chern pour concevoir des modèles d'isolant de Chern avec un nombre de Chern arbitraire [24].

4.2.2 Etats de bord chiraux

Nous avons vu dans l'étude du modèle de Haldane, plus généralement dans l'étude de modèles à deux bandes qu'une conséquence de l'inversion de bandes est une inversion du signe de la masse dans le hamiltonien. Comme dans l'effet Hall quantique entier, ceci a pour conséquence l'apparition d'états de bord à l'interface entre deux régions topologiquement distinctes. Pour des isolants topologiques bidimensionnels, cette interface est donc $1D$.

Ce résultat est en fait général : des états de bord sont présents à l'interface de dimension $D - 1$ séparant deux régions de dimension D topologiquement distinctes.

L'intérêt des modèles à deux bandes comme le modèle de Haldane à $2D$ est que l'on peut construire explicitement ces états de bord. Pour plus de détail, je renvoie à la revue récente de J. Cayssol [25].

Interface entre un isolant de Chern et un isolant trivial

Considérons le demi-plan $x < 0$ rempli par un isolant de Semenoff et le demi-plan $x > 0$ rempli par un isolant de Haldane. Pour calculer l'état de bord à l'interface entre les deux isolants, on fait l'hypothèse que l'état de bord est confiné à l'interface et se propage selon l'axe y . L'invariance par translation selon l'axe y implique que k_y est un bon nombre quantique. De plus l'état de bord s'il existe est une état de basse énergie traversant le gap. On peut donc considérer la version linéarisée du Hamiltonien de Haldane $\mathcal{H}_0 = \hbar v_F(k_x \sigma_x \tau_x + k_y \sigma_y)$. Il suffit alors de considérer l'équation aux valeurs propres dans l'équation de Dirac. Celle-ci s'écrit :

$$(-i\hbar v_F \sigma_x \tau_x \partial_x + \hbar v_F k_y \sigma_y + M(x))\psi = E\psi, \quad (4.17)$$

avec $M(x) = M_S \theta(-x) \sigma_z + M_H \theta(x) \sigma_z \tau_z$ la terme de masse inhomogène (M_S la masse de Semenoff et M_H la masse de Haldane).

On peut remplacer la fonction θ de Heavyside par une autre fonction plus lisse à partir du moment où l'extension spatiale de la variation de cette fonction est plus petite que l'extension spatiale de l'état de bord selon x .

Analysons déjà les conditions d'existence d'un état de bord en se plaçant à $E = 0$ ce qui implique $k_y = 0$. L'équation aux valeurs propres à $E = 0$ s'écrit :

$$\hbar v_F \partial_x \psi = -M_H \sigma_y \psi \quad x > 0 \quad (4.18)$$

$$\hbar v_F \partial_x \psi = -M_H \sigma_y \tau_z \psi \quad x < 0 \quad (4.19)$$

Pour $x > 0$, la solution de l'état lié à $E = 0$ est un état propre de σ_y de valeur propre $\text{sign}(M_H)$. Pour $x < 0$, la solution dépend des valeurs propres de τ_z (de la chiralité) que l'on notera $-\xi = \pm 1$. La solution de l'état lié à $E = 0$ est également un état propre de σ_y de valeur propre $\text{sign}(-\xi M_S)$. Une solution d'énergie nulle à l'interface est possible à condition que

$$\text{sign}(M_H) = -\text{sign}(\xi M_S). \quad (4.20)$$

Supposons que l'on fixe le signe de M_S par exemple. Alors cette condition est réalisée uniquement pour un seul point de Dirac dont l'indice de vallée est donc déterminé par $\xi = -\text{sign}(M_S M_H)$. On voit donc que cet état lié à l'interface est nécessairement polarisé en vallée et brise donc l'invariance temporelle (ce qui est normal puisque le modèle de Haldane brise \mathcal{T}). Supposons $M_S > 0$. Si l'on restaure la dépendance selon y , l'énergie de cet état de bord vaut donc $E = \text{sign}(M_H) \hbar v_F k_y$. Il s'agit donc d'un état chiral!

Si l'on envoie la masse de Semenoff à l'infini, cela revient à considérer une interface entre le modèle de Haldane et le vide. On prédit donc ainsi l'existence d'un état de bord chiral à l'interface.

Interface entre deux isolants de Chern distincts

Considérons maintenant l'interface entre deux modèles de Haldane de nombre de Chern opposés. L'équation aux valeurs propres reste identique :

$$(-i\hbar v_F \sigma_x \tau_x \partial_x + \hbar v_F k_y \sigma_y + M_H(x))\psi = E\psi, \quad (4.21)$$

avec $M_H(+\infty) > 0$ et $M_H(-\infty) < 0$. Nous supposons donc que l'on a un défaut (un soliton) dans le terme de masse autour de $x = 0$. Nous avons déjà rencontré ce genre de défauts lorsque l'on a traité la chaîne de polyacétylène 3.8.3. Comme dans le paragraphe précédent, nous cherchons déjà les solutions à $E = 0$ (donc $k_y = 0$). L'équation aux valeurs propres s'écrit :

$$\hbar v_F \partial_x \psi = -M_H(x) \sigma_y \psi, \quad (4.22)$$

et est indépendante de τ_z . Une solution de cette équation s'écrit :

$$\psi(x) = a \exp\left(-\int_0^x dx' \frac{M_H(x')}{\hbar v_F}\right) \begin{pmatrix} 1 \\ i \end{pmatrix},$$

et est valable $\forall \xi$. Donc la solution générale s'exprime de la manière suivante

$$\psi(x) = \exp\left(-\int_0^x dx' \frac{M_H(x')}{\hbar v_F}\right) \left[a \begin{pmatrix} 1 \\ i \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + b \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ i \end{pmatrix} \right],$$

et est donc deux fois dégénérée. Si l'on restaure la dépendance en y , la solution ci-dessus est aussi un état propre de σ_y d'énergie $E = +\hbar v_F k_y$. Il s'agit donc de deux modes *chiraux* qui parcourent l'interface dans le même sens. L'invariance par renversement du temps est brisée.

Interface entre deux isolants de Semenoff

On peut reprendre les mêmes calculs. Cette fois-ci la solution s'exprime

$$\psi(x) = \exp\left(-\int_0^x dx' \frac{M_H(x')}{\hbar v_F}\right) \left[a \begin{pmatrix} 1 \\ i \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} + b \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ -i \end{pmatrix} \right],$$

On a deux nouveaux une solution doublement dégénérée. Cette solution est aussi état propre de σ_y . Par contre, les valeurs propres associées sont $E = \pm \hbar v_F k_y$. Il s'agit donc de deux modes de chiralité opposées se propageant le long de l'interface dans des sens opposés.

Bilan Nous avons dans les trois cas considérés toujours trouvé des solutions aux interfaces y compris pour le dernier cas. Néanmoins, il faut bien garder à l'esprit que l'existence de solutions ne garantit en rien leur stabilité. Ainsi dans le dernier cas, on peut facilement se convaincre que les processus de retrodiffusion (automatique avec un peu d'aspérité) vont mélanger et détruire ces deux états de bord. Ils ne sont pas protégés topologiquement!

Lorsqu'il y a un seul état de bord associé à un nombre de Chern $C = \pm 1$, le désordre à l'interface ne peut détruire cet état de bord car le désordre ne peut changer la chiralité. Idem lorsque deux états de bord de même chiralité. Cela implique que si l'on veut vérifier ces arguments numériquement par diagonalisation exacte, il ne suffira pas de montrer l'existence d'états de bord mais il faudra vérifier leur stabilité. A cet égard, un exercice instructif est d'étudier l'interface entre deux modèles de Haldane lorsque l'on fait varier par exemple le paramètre de phase d'un des modèles de Haldane de tel sorte que son nombre de Chern varie de -1 à 0 bien à 1 .

4.3 Isolants topologiques bidimensionnels

Nous avons étudié précédemment le graphène, et nous avons vu que celui-ci possédait des points de Dirac protégés topologiquement par la symétrie de renversement du temps et la symétrie d'inversion, nous donnant une dégénérescence complète en spin. L'idée permettant de prendre en compte le spin sans pour autant briser la symétrie de renversement du temps est de prendre en compte l'interaction spin orbite. Cette idée est due à Kane et Mele [?].

4.3.1 Spin-orbite intrinsèque. Modèle de Kane-Mele

Nous reprenons notre réseau en nid d'abeille auquel nous commençons à être familiers, et nous considérons le Hamiltonien d'interaction spin orbite suivant

$$\hat{H}_{KM} = t \sum_{\langle i,j \rangle} \sum_{\alpha=\uparrow,\downarrow} \hat{c}_{i\alpha}^\dagger \hat{c}_{j\alpha} + \left(it_2 \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} \nu_{ij} \hat{c}_{i\alpha}^\dagger (\hat{S}^z)_{\alpha\beta} \hat{c}_{j\beta} + \text{h.c.} \right). \quad (4.23)$$

Le terme de spin-orbite est ainsi introduit dans les termes de saut au second voisin, le terme ν_{ij} étant la chiralité de la plaquette triangulaire, prenant les valeurs $\nu = \pm 1$. Ce modèle revient dans le modèle de Haldane à prendre $\varphi = \frac{\pi}{2}$ pour les particules de spin \uparrow et $\varphi = -\frac{\pi}{2}$ pour les particules de spin \downarrow . Il est de plus évident que le spin \hat{S}^z commute avec ce Hamiltonien (4.23)

$$[\hat{H}_{KM}, \hat{S}^z] = 0.$$

Par conséquent le deuxième terme de \hat{H}_{KM} correspond à un terme de spin orbite, le terme $\hat{L} \cdot \hat{S}$ se trouvant remplacé par $\nu \hat{S}^z$. Le Hamiltonien \hat{H}_{KM} respecte de plus la symétrie par renversement du temps.

À basse énergie, nous pouvons écrire

$$\hat{\mathcal{H}}_{so} = \Delta_{so} \sigma_z \tau_z \hat{S}_z,$$

σ_z se référant au sous-réseau, τ_z à l'indice de vallée et \hat{S}_z au spin. Pour chaque espèce de spin, nous avons ouverture d'un gap.

Le modèle de Haldane nous dit que $m_{k,\alpha} = -m_{-k,\alpha}$, et la symétrie de renversement du temps impose d'avoir $m_{k,\alpha} = m_{-k,-\alpha}$, le nombre de Chern est donc nul.

Nous écrivons l'opérateur de renversement du temps $\hat{\tau} = \tau_x \hat{K}$ dans le cas d'un électron sans spin ($\tau^2 = +1$), et $\hat{\tau} = \tau_x \hat{K} (i\hat{S}_y)$ dans le cas d'un électron de spin demi-entier ($\tau^2 = -1$), \hat{K} étant l'opérateur de conjugaison complexe. L'invariance de notre Hamiltonien sous le renversement temporel s'écrit

$$\hat{\tau} \hat{\mathcal{H}}_0 \hat{\tau} = \hat{\mathcal{H}}_{so}.$$

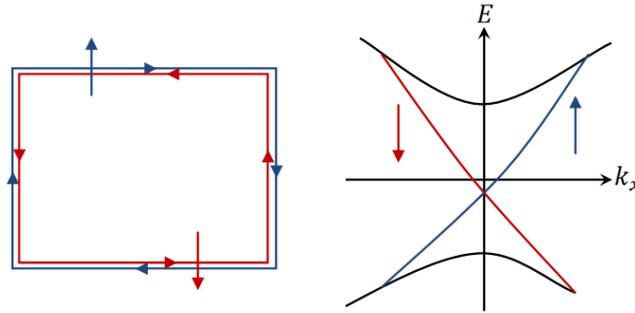


FIGURE 4.6 – Les états de bords sont reliés à l'orientation du spin.

Nous avons alors $4^2 = 16$ manières possibles d'ouvrir des gaps dans le graphène [?].

Dans notre échantillon, les courants électroniques se déplacent dans des sens opposés selon le spin des électrons (Cf. figure (4.6)). Le terme de couplage spin orbite va renverser le spin et l'impulsion des électrons, et ainsi un désordre non magnétique ne peut en général affecter ces états de bord, ceux-ci générant des interaction transformant $\hat{c}_{k,\uparrow}^\dagger$ en $\hat{c}_{-k,\downarrow}^\dagger$.

L'introduction d'un désordre magnétique se fait *via* l'écriture du Hamiltonien

$$\hat{H}_M = J \sum_{kk'} \hat{c}_{k\alpha}^\dagger (\hat{S}_I) \cdot \vec{\sigma}_{\alpha\beta}^{el} \hat{c}_{k'\beta}.$$

Ce Hamiltonien brise la symétrie par renversement du temps.

En conclusion, le graphène auquel est ajouté du spin orbite est un nouvel état de la matière que l'on nomme **isolant topologique**. Le seul bémol à ce développement théorique est que ce système étant bel et bien protégé topologiquement, le gap Δ_{so} est de l'ordre du mK et n'est pas observable expérimentalement.

4.3.2 Hétérosstructures de HgTe/CdTe

Le couplage spin-orbite étant faible dans le graphène, il faut chercher une manière de le rendre grand. L'idée des hétérosstructures de HgTe/CdTe est que le spin-orbite peut causer de l'inversion de bandes [?]. Le HgTe est un semi-métal, et le CdTe un semi-conducteur. La structure de bande de ces matériaux séparés est présentée à la figure (4.7)

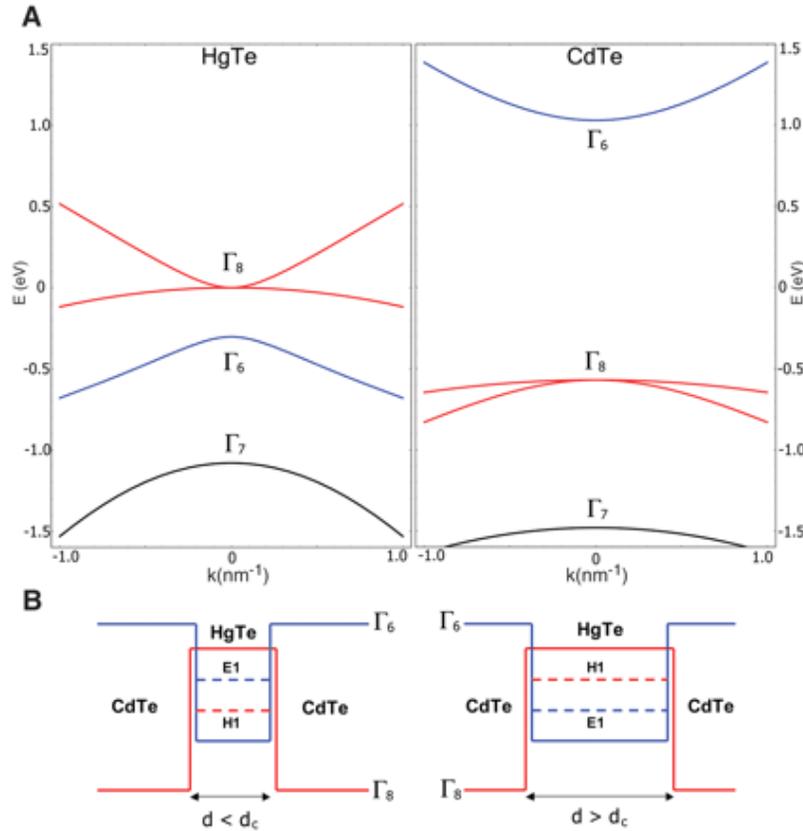


FIGURE 4.7 – (a) Structure de bandes de HgTe et de CdTe. (b) inversion de bandes au delà d'une largeur limite de l'interface CdTe/HgTe/CdTe. Figures extraites de [?]

Sur la figure (4.7) on observe que les seules bandes jouant un rôle sont les bandes Γ_8 et Γ_6 , la bande Γ_7 restant dans la même configuration relative entre ces deux structures. De plus la bande plate de Γ_8 ne semble pas jouer de rôle non plus. Il a été montré (figure (4.7.b)) que pour une épaisseur critique $d_c \simeq 6,4nm$ on observe une inversion des bandes H_1 et E_1 ¹.

Pour modéliser ce genre de système, il nous faut 4 états $|E, \pm\rangle$ et $|H, \pm\rangle$. On suppose de plus que Hg, Te et Cd sont identiques. On écrit alors dans la base $\{|E_1, +\rangle; |H_1, +\rangle; |E_1, -\rangle; |H_1, -\rangle\}$, le Hamiltonien 4×4 suivant

$$\hat{\mathcal{H}}_{4 \times 4} = \begin{pmatrix} \hat{\mathcal{H}}_{2 \times 2}(k) & 0 \\ 0 & \hat{\mathcal{H}}^*(-k) \end{pmatrix}, \quad (4.24)$$

1. Expérience réalisée dans le groupe de Malenhamp (Whurzburg).

les blocs de spins opposés sont découplés et nous avons (pour en prendre en compte la symétrie par renversement du temps)

$$\hat{\mathcal{H}}_{2 \times 2} = \varepsilon_0(k) \vec{d}(k) \cdot \vec{\sigma},$$

où (à basse énergie)

$$d^z(\vec{k}) \simeq M - (k_x^2 - k_z^2) + \mathcal{O}(k^4), \quad (4.25)$$

$$\vec{d}(\vec{k}) \simeq (Ak_x, Ak_y, M - B|\vec{k}|^2). \quad (4.26)$$

La relation de dispersion est alors $\varepsilon_0(\vec{k}) \simeq C - Dk^2$.

Si $MB > 0$, nous avons une texture sur la sphère parcourue par le vecteur \vec{d} , mais si $MB < 0$ nous n'avons pas de texture.

Des calculs microscopiques donnent les valeurs $A = -3, 8eV\text{\AA}$ et $B = -60eV\text{\AA}^2$. Le régime non trivial correspond à $M < 0$. La physique de ce genre de systèmes est analogue à celle de Kane-Mele, notamment au travers de l'existence d'états de bord hélicoïdaux.

4.3.3 États de bords hélicoïdaux et dégénérescence de Kramers

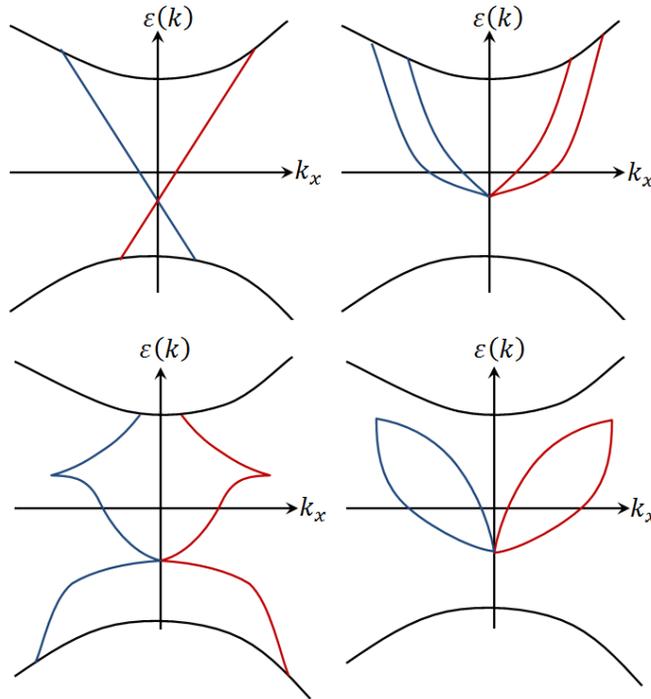


FIGURE 4.8 – Haut : Spectre possible avec un point de croisement dans le gap. Bas : Spectre possible avec deux points de croisement dans le gap. La parité du nombre de croisement de paire de Kramers avec le niveau de Fermi est un invariant topologique. Lorsque ce nombre est impair on parle d'isolant topologique alors que lorsqu'il est pair (ou nul) l'isolant est trivial.

Théorème 5 (Kramers) *Pour chaque énergie E dans un système de particules de spin demi-entier contenant un nombre impair de particules et vérifiant la symétrie par renversement du temps, il existe au moins deux états dégénérés.*

En effet, considérons $|\psi\rangle$ un état d'énergies propre E . La symétrie par renversement du temps s'écrit $[\hat{H}, \hat{T}] = 0$, impliquant que l'opérateur de renversement du temps \hat{T} admet également $|\psi\rangle$ comme état propre de \hat{H} . Nous avons

$$\langle \psi | \hat{T} | \psi \rangle = 0,$$

l'opérateur de renversement s'écrivant $\hat{T} = \hat{U}\hat{K}$ avec $\hat{U} = -\hat{U}^T$ (antisymétrique et unitaire). Alors en effet

$$\begin{aligned}
 \langle \psi | \hat{T} | \psi \rangle &= \sum_{m,n} \psi_m^* U_{mn} \hat{K} \psi_n \\
 &= \sum_{m,n} \psi_m^* U_{mn} \psi_n^* \\
 &= \sum_{m,n} \psi_m^* (-U_{nm}) \psi_n^* \\
 &= - \sum_{m,n} \psi_n^* U_{nm} (\hat{K} \psi_m) \\
 &= - \langle \psi | \hat{T} | \psi \rangle.
 \end{aligned}$$

La conséquence de cette propriété pour les états de Bloch est que si

$$\mathcal{H}(k) |u(k)\rangle = E(k) |u(k)\rangle,$$

alors $\hat{T} |u(k)\rangle$ est état propre de $\hat{\mathcal{H}}(-\vec{k})$. Ceci implique l'existence de points spéciaux dans la première zone de Brillouin qui sont $(0, 0)$, $(0, \pi)$, $(\pi, 0)$ et (π, π) où le spectre est au moins doublement dégénéré (points de croisement).

Ceci a donc des conséquences sur les spectres possibles d'un isolant topologique bidimensionnel. La nature des spectres possibles est représenté sur la figure Fig. 4.8 selon que l'on ait un ou deux points de croisement à l'intérieur du gap. La parité du nombre de croisement de paire de Kramers avec le niveau de Fermi est un invariant topologique. Lorsque ce nombre est impair on parle d'isolant topologique alors que lorsqu'il est pair (ou nul) l'isolant est trivial. ce type d'isolant topologique qui respecte l'invariance temporelle est donc de type \mathbf{Z}_2 . Différentes formulations de cet invariant topologique de type \mathbf{Z}_2 ont été formulé algébriquement.

4.4 Isolants topologiques 3D

A rédiger

4.5 Supraconducteurs topologiques et fermions de Majorana

A rédiger

4.6 Classification des isolants et supraconducteurs topologiques

A rédiger

4.7 Bilan, perspectives et problèmes ouverts

A rédiger

Bibliographie

- [1] J.B. Zuber and C. Itzykson. *Quantum Field Theory*. Dover, 2006.
- [2] G. W. Semenov. Condensed-matter simulation of a three-dimensional anomaly. *Phys. Rev. Lett.*, page 2449, 1984.
- [3] F. D. M. Haldane. Model for a quantum hall effect without landau levels : Condensed-matter realization of the "parity anomaly". *Phys. Rev. Lett.*, 61 :2015–2018, Oct 1988.
- [4] W.P. Su, J.R. Schrieffer, and A.J. Heeger. Solitons in polyacetylene. *Phys. Rev. Lett.*, pages 1698–1701, 1979.
- [5] Mikio Nakahara. *Geometry, Topology and Physics*. Institut of physics publishing, 2003.
- [6] N. D. Mermin. The topological theory of defects in ordered media. *Reviews of modern physics*, pages 591–648, 1979.
- [7] Di Xiao, Ming-Che Chang, and Qian Niu. Berry phase effects on electronic properties. *Rev. Mod. Phys.*, 82 :1959–2007, Jul 2010.
- [8] Raffaele Resta. Geometry and topology in electronic structure theory.
- [9] P. Dirac. Quantized singularities in the electromagnetic field. *Proceedings of the Royal Society, A* 133, 1931.
- [10] R. Rajaraman. *Instantons and solitons*. North Holland, 15 Avril 1987.
- [11] S. Coleman. *Aspects of Symmetry : Selected Erice Lectures*. Cambridge university press, 1988.
- [12] D. Loss, D. DiVincenzo, and G. Grinstein. Suppression of tunneling by interference in half-integer-spin particles. *Physical review letters*, 69 :3232–3235, 1992.
- [13] F. D. Haldane. *Physical review letters*, 50 :1153, 1983.
- [14] F Piechon and et al. Topological berry phase and semiclassical quantization of cyclotron orbits for two dimensional electrons in coupled band models. *EPJB*, 77 :351–362, 2010.
- [15] D. J. Thouless. Quantization of particle transport. *Phys. Rev. B*, 27 :6083–6087, May 1983.
- [16] J. E. Avron, R. Seiler, and B. Simon. Homotopy and quantization in condensed matter physics. *Phys. Rev. Lett.*, 51 :51–53, Jul 1983.
- [17] M.Z. Hasan and C.L. Kane. Colloquium : topological insulators. *Review of modern physics*, 83 :3045–3067, 2010.
- [18] Xiao-Ling Qi and Shou-Cheng Zhang. *Review of modern physics*, 83 :1057–1110, 2011.
- [19] K.von Klitzing, G. Dorda, and M. Pepper. New method for high-accuracy determination of the fine-structure constant based on quantized Hall resistance. *Physical review letters*, 45 :494–497, 1980.
- [20] Laughlin. Quantized Hall effect in two dimensions. *Physical review B*, 23 :5632–5633, 1981.
- [21] D. J. Thouless, M. Kohmoto, M. P. Nightingale, and M. den Nijs. Quantized hall conductance in a two-dimensional periodic potential. *Phys. Rev. Lett.*, 49 :405–408, Aug 1982.
- [22] Q. Niu, D. J. Thouless, and Y.-S. Wu. *Physical Review B*, 31 :3372, 1985.
- [23] N. Nagaosa, J. Sinova, S. Onoda, A.H. MacDonald, and N.P Ong. Anomalous Hall effect. *Review of Modern Physics*, 82 :1539, 2010.
- [24] Doru Sticlet, Frederic Piéchon, Jean-Noël Fuchs, Pavel Kalugin, and Pascal Simon. Geometrical engineering of a two-band chern insulator in two dimensions with arbitrary topological index. *Phys. Rev. B*, 85 :165456, Apr 2012.
- [25] J. Cayssol. *arXiv :1303.5902*, 2012.