

# **Topologie et Géométrie en Matière Condensée**

**David Carpentier**

**Notes informelles : Ne pas distribuer ! Merci.**



# Table des matières

<b>1</b>	<b>Introduction</b>	<b>1</b>
1.1	Théorie des bandes . . . . .	1
1.2	Géométrie et topologie de champ de vecteurs propres . . . . .	2
<b>I</b>	<b>Transport parallèle et Phase géométrique</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Phase d'Aharonov-Bohm</b>	<b>3</b>
2.1	Expérience de pensée d'Aharonov et Bohm . . . . .	3
2.1.1	Magnétostatique et invariance de jauge . . . . .	4
2.1.2	Relations de commutation canoniques, invariance de jauge et moment canonique . . . . .	4
2.1.3	Déphasage d'Aharonov et Bohm . . . . .	5
2.2	Monopole de Dirac . . . . .	7
<b>3</b>	<b>Phase de Berry</b>	<b>11</b>
3.1	Notion de phase géométrique . . . . .	11
3.2	Evolution Adiabatique . . . . .	14
3.2.1	Equation d'évolution d'un état . . . . .	14
3.2.2	Evolution adiabatique . . . . .	14
3.3	Courbure de Berry . . . . .	15
3.4	Exemple : spin dans un champ magnétique . . . . .	17
3.5	Transport parallèle de vecteur dans un fibré . . . . .	19
3.6	Phase géométrique dans les cristaux . . . . .	21
3.6.1	Définition générale . . . . .	21
3.6.2	Transport semi-classique et courbure de Berry . . . . .	23
<b>4</b>	<b>Le graphène</b>	<b>27</b>
4.1	Liaisons $sp^2$ . . . . .	27
4.2	Réseau de Bravais et réseau réciproque . . . . .	28
4.3	Approche de liaisons fortes . . . . .	29
4.4	Limite de basse énergie : fermions de Dirac . . . . .	35
4.5	Etats propres et chiralité . . . . .	37

4.5.1	Etats propres du Hamiltonien complet . . . . .	37
4.5.2	Etats propres de basse énergie et Chiralité . . . . .	38
4.6	Phase de Berry . . . . .	39
4.7	Symétrie et stabilité des points de Dirac . . . . .	40
4.7.1	Symétries cristalline . . . . .	40
4.7.2	Extension de la notion de symétrie : symétrie chirale . . . . .	41
4.8	Une symétrie particulière : le renversement du temps . . . . .	42
4.8.1	Renversement du temps en mécanique classique . . . . .	42
4.8.2	Renversement du temps en mécanique quantique . . . . .	43
4.8.3	Renversement du temps et spin . . . . .	44
4.8.4	Le renversement du temps dans le graphène . . . . .	45
4.8.5	Retour sur la stabilité des points de Dirac . . . . .	47
4.8.6	Symétrie et courbure de Berry . . . . .	47
 <b>II Caractérisation Topologique d'une Phase de la Matière</b>		<b>49</b>
<b>5</b>	<b>Effet Hall Quantique</b>	<b>51</b>
5.1	Effet Hall classique . . . . .	52
5.1.1	Mouvement d'une particule . . . . .	52
5.1.2	Formalisme Hamiltonien classique . . . . .	55
5.1.3	Résistivité de Hall et invariance galiléenne . . . . .	55
5.1.4	Résistivité de Hall . . . . .	55
5.2	Hamiltonien quantique : les niveaux de Landau . . . . .	56
5.2.1	Approche algébrique . . . . .	56
5.2.2	Etats propres dans la jauge de Landau . . . . .	57
5.3	Réponse à un champ électrique . . . . .	59
5.3.1	Invariance galiléenne . . . . .	59
5.3.2	Calcul explicite dans le premier niveau de Landau . . . . .	60
5.4	Argument de Laughlin et géométrie de Corbino . . . . .	60
5.5	Etats de Bord et formalisme de Landauer . . . . .	62
5.5.1	Notion d'état de bord . . . . .	62
5.5.2	Formalisme de Landauer-Büttiker . . . . .	63
5.6	Transition entre états d'effet Hall quantique et percolation quantique	66
5.7	Niveaux de Landau de Fermions de Dirac . . . . .	66
5.7.1	Niveaux de Landau anormaux . . . . .	66
5.7.2	Relation en phase de Berry et niveaux de Landau . . . . .	68
5.8	Effet Hall quantique fractionnaire . . . . .	69
5.8.1	Etats propres de Landau dans la jauge symétrique . . . . .	69
5.8.2	Effet des interactions . . . . .	71
5.8.3	Effet Hall quantique entier . . . . .	72
5.8.4	Effet Hall quantique fractionnaire . . . . .	73
<b>6</b>	<b>Conductivité de Hall et Nombre de Chern</b>	<b>77</b>
6.1	Conductivité de Hall et Nombre de Chern . . . . .	77

6.1.1	Conditions aux limites généralisées . . . . .	77
6.1.2	Conductivité et transport adiabatique . . . . .	78
6.1.3	Conductivité de Hall et nombre de Chern . . . . .	80
6.2	Point de vue alternatif : Lagrangien de Chern-Simons . . . . .	81
6.2.1	Lagrangien de Chern-Simons et conductivité de Hall . . . . .	81
6.2.2	Quantification de $\kappa$ . . . . .	83
6.3	Retour à un cristal . . . . .	83
<b>7</b>	<b>Isolants de Chern</b> . . . . .	<b>85</b>
7.1	Effet Hall dans un cristal . . . . .	85
7.2	Isolant idéal : modèle à deux bandes . . . . .	85
7.3	Le modèle de Haldane . . . . .	87
<b>8</b>	<b>Topologie et Symétrie de Renversement du Temps</b> . . . . .	<b>91</b>
8.1	Renversement du Temps et Hamiltonien de Bloch . . . . .	91
8.2	Le modèle de Kane-Mele . . . . .	92
8.3	L'invariant de Kane-Mele . . . . .	96
8.4	Matériaux isolants topologiques . . . . .	98
<b>9</b>	<b>Des isolants aux semi-métaux</b> . . . . .	<b>101</b>
9.1	De la topologie des états de volume aux états de surface . . . . .	101
9.2	Transitions topologiques et semi-métaux . . . . .	103
9.3	Propriétés topologiques des semi-métaux . . . . .	104
	<b>Bibliographie</b> . . . . .	<b>107</b>



# Chapitre 1

## Introduction

### 1.1 Théorie des bandes

Le comportement électronique de nombreux solides est décrit à l'aide de la théorie des bandes. Dans cette approche, les interactions électroniques sont négligées. Cette approche décrit l'hybridation des orbitales électroniques des différents atomes constituant le réseau, répartis sur le cristal. Les éléments de base de cette approche sont donc les orbitales atomiques (s,p,d,...) et le cristal qui décrit l'arrangement périodique des atomes dans l'espace. Le réseau de Bravais sous-jacent au cristal est défini par l'ensemble des vecteurs  $\gamma \in \Gamma$  de translation  $T_\gamma$  qui laissent le cristal invariant. C'est-à-dire l'ensemble des translations qui commutent avec le Hamiltonien  $\mathcal{H}$  décrivant les électrons dans le cristal. Le cristal initial n'est pas forcément un réseau de Bravais : il correspond à la reproduction périodique d'un motif de  $n_c$  atomes définissant une cellule élémentaire du réseau de Bravais. Le théorème de Bloch nous enseigne qu'en diagonalisant simultanément ce Hamiltonien et l'ensemble des translations  $\{T_\gamma\}_{\gamma \in \Gamma}$ , nous obtenons des ondes planes modulées :

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \quad (1.1)$$

où  $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  est une fonction de Bloch périodique sur le *réseau de Bravais* :

$$T_\gamma u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \gamma) = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \quad \forall \gamma \in \Gamma. \quad (1.2)$$

La transformée de Fourier permet d'identifier l'espace de Hilbert des fonctions d'onde défini sur le cristal avec l'ensemble des fonctions de Bloch. A partir de la définition (1.1), on vérifie aisément que les fonctions de Bloch sont fonctions propres des opérateurs de translation :

$$T_\gamma \psi_{\mathbf{k}} = e^{i\mathbf{k}\cdot\gamma} \psi_{\mathbf{k}} \quad \forall \gamma \in \Gamma. \quad (1.3)$$

Cette relation nous indique que les pseudo-moments  $\mathbf{k}$  sont définis modulo un vecteur du réseau réciproque, défini comme l'ensemble des vecteurs  $\mathbf{G}$  tel que

$$\mathbf{G}\cdot\gamma = 2\pi n, \quad n \in \mathbb{Z} \quad \forall \gamma \in \Gamma. \quad (1.4)$$

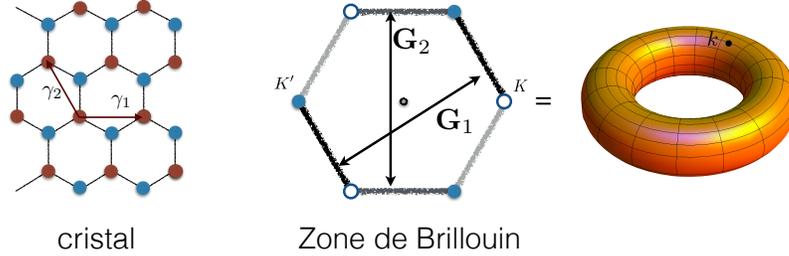


FIGURE 1.1 – Cristal hexagonal correspondant à la répartition des atomes de Carbone dans le graphène (à gauche) et zone de Brillouin (à droite). Cette zone de Brillouin est équivalente à un tore : tous les états électroniques des bords opposés sont égaux.

Ainsi l'ensemble des valeurs indépendantes que peut prendre le pseudo-moment  $\mathbf{k}$  correspond à une cellule élémentaire de Wigner-Seitz du réseau réciproque, appelée *première zone de Brillouin*. Par définition, cette zone de Brillouin est périodique dans toutes les directions. Les fonctions de Bloch  $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  sont obtenues en diagonalisant le Hamiltonien dans l'espace des fonctions quasi-périodique (1.1) pour chaque valeur de  $\mathbf{k}$ . On obtient ainsi un ensemble d'énergies propres  $\epsilon_{\alpha}(\mathbf{k}), k = 1, \dots, n_c \times n_{orb}$  où  $n_{orb}$  correspond au nombre d'orbitales atomiques par atome considérées. Lorsque  $\mathbf{k}$  évolue dans la première zone de Brillouin, ces énergies définissent des bandes d'énergies qui caractérisent de nombreuses propriétés des solides, dont leur comportement électrique et leurs propriétés optiques. En particulier, on distingue les métaux des isolants en fonctions de la présence d'une zone d'énergie dans états disponibles autour du potentiel chimique, appelée *gap* en énergie. Les isolants possèdent un tel *gap*, alors que le potentiel chimique se trouve à l'intérieur d'une des bandes d'énergie pour un métal. Plus finement, on distingue ensuite différents types de solides en fonctions de l'apparition de différentes structures spatiale de répartition de la charge, d'une densité de moment magnétique, de l'apparition d'un ordre supraconducteur, etc. Certaines phases requiert de décrire les interactions électroniques, absentes de la description précédente.

## 1.2 Géométrie et topologie de champ de vecteurs propres

Récemment, une caractérisation différente des phases de matière condensée est apparue, issue en particulier de la découverte de l'effet Hall quantique. Cette caractérisation revient à considérer l'ensemble des états propres  $\psi_{\mathbf{k},\alpha}$  correspondant aux différentes bandes  $\epsilon_{\alpha}(\mathbf{k})$ . Pour un solide (infiniment) grand,  $\mathbf{k}$  peut varier continûment dans la zone de Brillouin. Lorsque  $\mathbf{k}$  varie,  $\psi_{\mathbf{k},\alpha}$  décrit un champ de vecteur propre pour chaque  $\alpha$ . La situation est analogue par exemple à la description de milieux

élastiques, décrit par un champ de déformation  $\mathbf{u}(\mathbf{r})$ , ou la description d'un champ électromagnétique dans l'espace  $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ . Les différences viennent ici d'une part de la nature vectorielle du champ : pour les états électroniques, il s'agit de vecteur dans un espace de Hilbert ; d'autre part de la paramétrisation du champ par un pseudo-moment  $\mathbf{k}$  qui prend ses valeurs sur un tore fini, et non dans un espace infini. Il est naturel d'essayer de caractériser les propriétés de ce champ de vecteur  $\psi_{\mathbf{k},\alpha}$  avec des outils analogues à ceux décrivant les champs plus habituels.

En particulier, les outils géométriques permettent de décrire l'évolution continue de  $\psi_{\mathbf{k},\alpha}$  lorsque  $\mathbf{k}$  varie dans la zone de Brillouin. Si nous considérons par simplicité une bande unique et non dégénérée  $\alpha_0$ , le seul degré de liberté dans le choix de  $\psi_{\mathbf{k},\alpha_0}$  est sa phase  $\theta_{\mathbf{k},\alpha_0}$ . Celle-ci est arbitraire pour une valeur du pseudo-moment  $\mathbf{k}_0$ . Cependant, la géométrie du champ de vecteur propre peut être caractérisée à partir de l'évolution de cette phase lorsque  $\mathbf{k}$  varie continûment autour de  $\mathbf{k}_0$ . En particulier, une question naturelle est l'évolution de  $\theta_{\mathbf{k},\alpha_0}$  le long d'un chemin dans la zone de Brillouin : pour un chemin fermé, la variation de cette phase est-elle toujours nulle ? Cette question est intimement reliée avec des problèmes similaires de la variation de la phase d'une fonction d'onde en présence d'un champ électromagnétique. L'évolution de la phase de cette fonction d'onde comporte une composante appelée phase de Aharonov-Bohm qui est intimement reliée à la présence du potentiel vecteur. De même, l'évolution adiabatique d'un état propre d'un hamiltonien dépendant du temps donne naissance à une phase appelée phase de Berry caractérisant la contrainte provenant de l'évolution adiabatique. Une première partie de ce cours va donc consister à introduire les outils permettant de décrire cette évolution continue de vecteurs propres. Nous verrons qu'une quantité analogue au potentiel vecteur électromagnétique et appelée connexion peut être introduite afin de caractériser l'évolution des vecteurs propres, et de leur phase. Poussant l'analogie plus loin, l'"intensité locale de la variation de ces vecteurs" est quantifiée par une courbure analogue au champ magnétique. Ces outils seront appliquées sur la physique des électrons dans le graphène, et nous discuterons les conséquences physiques de ces variations de phase.

Les outils géométriques permettent également de détecter les singularités d'un champ de vecteur continu : les endroits où ce champ cesse d'être défini. Dans le cas d'un champ élastique, ces singularités correspondent aux vortex, dislocations, disclinaisons, etc selon la nature du champ. Ces défauts sont caractérisés par la variation du champ de déplacement lors d'une évolution autour de la singularité. L'exemple du vortex, représenté sur la figure 1.2, correspond à une singularité d'un champ de vecteur caractérisé par une phase (angle entre les flèches et l'axe  $Ox$  par exemple). Lors d'un tour autour du vortex dans le sens horaire, cette phase varie de  $2\pi$ . Cette variation est indépendante du chemin choisi pour évoluer autour du vortex : on parle de charge topologique du défaut. La topologie est en effet une branche des mathématiques qui étudie les propriétés de différents objets invariants sous les déformations continues de ces objets. La charge d'un défaut est le premier exemple rencontré dans ce cours de telle propriété topologique. L'utilisation de la topologie a permis de classer l'ensemble des défauts possibles pour les champs de déformations

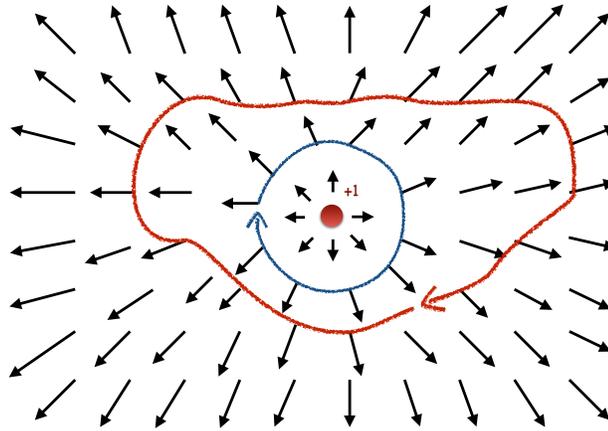


FIGURE 1.2 – Représentation schématique d'un défaut topologique.

élastiques. L'utilisation de la caractérisation topologique est classiquement illustré sur l'étude des surfaces bidimensionnelles déformables (Fig. 1.3). Il est aisé de réaliser que la sphère et le tore ne peuvent être déformé l'un dans l'autre. L'outil permettant d'identifier les surfaces déformables l'un en l'autre est la caractéristique d'Euler. Sa définition initiale suppose de déformer la surface considérée en un polyèdre. L'indice est alors défini par  $\chi = \text{nombre de vertex} - \text{nombre d'arrêtes} + \text{nombre de faces}$ . Différents exemples de polyèdres correspondant à la sphère et au tore sont représentés sur la figure 1.4. Cet indice ne dépend pas du polyèdre choisi : deux polyèdres déformables l'un dans l'autre correspondent au même indice d'Euler. A l'opposé, deux polyèdres correspondant l'un à la sphère et l'autre au tore

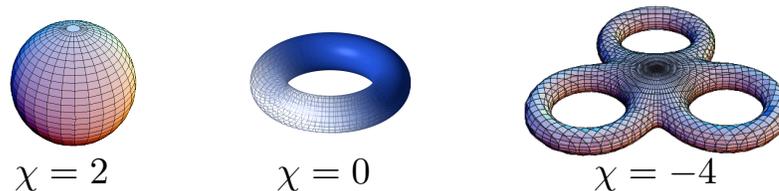


FIGURE 1.3 – Différentes surfaces bidimensionnelles qui ne peuvent être déformées les unes dans les autres, et sont caractérisées par une valeur différente de l'indice d'Euler.

donnent bien deux valeurs différentes à l'indice d'Euler. De façon générale, cette indice est relié au genre de la surface par la formule  $\chi = 2 - 2g$ . Nous réalisons ainsi

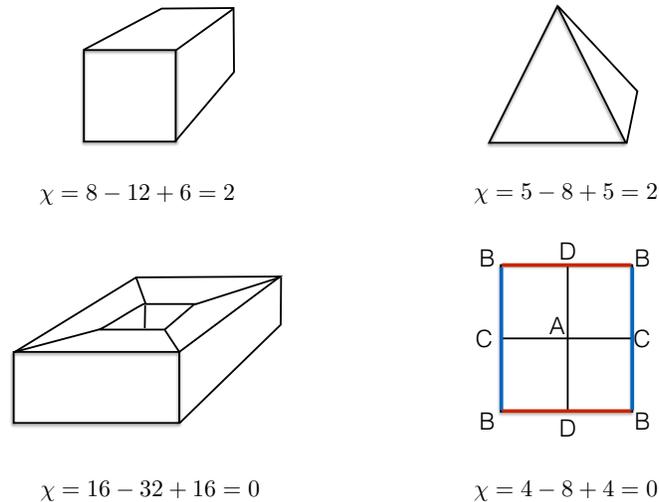


FIGURE 1.4 – Calcul de l'indice d'Euler par déformation de la surface en un polyèdre.

que cet indice distingue bien les classes de surfaces non déformables les unes dans les autres. Sa relation avec le genre démontre qu'il dépend de la surface dans son ensemble, et non de ses propriétés locales. De façon remarquable, pour une surface suffisamment régulière il peut être déduit d'une propriété locale de la surface : la courbure de Gauss  $\kappa = 1/(R_1 R_2)$  définie à partir des deux rayons de courbures principaux  $R_1, R_2$ . Le théorème de Gauss-Bonnet relie l'intégrale de cette courbure sur la surface entière à la caractéristique d'Euler :

$$\chi = \frac{1}{2\pi} \int_{\text{surface}} \kappa dS. \quad (1.5)$$

Cette formule manifeste l'existence de relation entre propriétés géométriques locales (ici la courbure) et propriétés topologiques globale (l'indice d'Euler). Nous rencontrerons à nouveau ce type de relation dans la suite de ce cours.

L'exemple précédent, bien que particulièrement intuitif, n'est pas directement relié à la description des propriétés topologiques de nos champs de vecteurs propres  $\psi_{\mathbf{k},\alpha}$  sur la zone de Brillouin. Ce problème correspond à étudier les propriétés d'un champ de vecteur sur une surface fermée : en effet, nous avons vu que la zone de Brillouin est un tore, propriété cruciale à ce point. De tels objets correspondent à ce que l'on appelle des fibrés vectoriels, définis par un espace de base, ici la zone de Brillouin, et un espace vectoriel définissant la nature des vecteurs considérés (ici l'espace de Hilbert des fonctions quasi-périodiques (1.1) en chaque point  $\mathbf{k}$ ). Un exemple de tels fibrés vectoriels est représenté sur la figure 1.5, correspondant à des champs de vecteurs tangents à la sphère et au tore. A travers cet exemple, nous réalisons une différence cruciale entre les deux champs de vecteurs : si les vecteurs

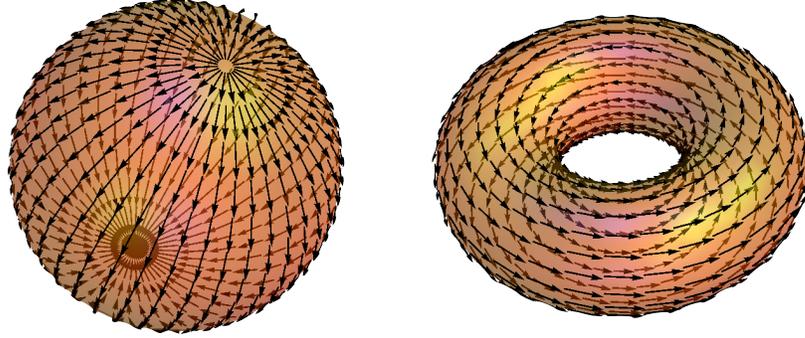


FIGURE 1.5 – Représentation d'un champ de vecteurs tangents sur la sphère et sur le tore. Si le champ est parfaitement continu et défini partout sur le tore, il comporte nécessairement des singularités sur la sphère. Il s'agit d'une conséquence du théorème de la boule chevelue, qui manifeste que le fibré vectoriel correspondant est topologiquement non trivial.

tangents au tore sont bien partout définis, ceux sur la sphère ne sont pas définis en deux points correspondant à des singularités : des vortex considérés précédemment. Il est possible de montrer (cela correspond au théorème dit de la boule chevelue) que tout champ de vecteur sur la sphère possède nécessairement une singularité. Il s'agit ainsi d'une propriété du fibré vectoriel considéré, et non du champ de vecteurs choisi. Cette propriété, qui manifeste l'absence de champ continu défini en tout point, signale le caractère "twisté" global du fibré. Il s'agit d'une propriété indépendante des déformations continue de ce fibré : c'est une propriété topologique ! Remarquons que l'existence d'une topologie non triviale empêche l'existence d'un isomorphisme (déformation continue) du fibré en un fibré simple constitué du produit de l'espace de base et de l'espace vectoriel. De plus, l'existence des défauts est intuitivement reliée à des propriétés de variation du champ de vecteur lorsque l'on évolue le long d'une boucle autour de la surface (d'un bord à l'autre de la zone de Brillouin).

Revenons au cas de fonctions de Bloch, états propres d'un Hamiltonien électronique. L'existence d'une topologie non triviale pour ces fonctions de Bloch donne naissance à une nouvelle forme d'état de la matière, non plus caractérisé par un paramètre d'ordre standard dans une approche à la Landau, mais à un indice topologique de l'ensemble des états propres autour de la zone de Brillouin. Pour que cet ensemble d'états propres corresponde à un état physique, il faut que ces états décrivent l'état en question : il s'agit naturellement le cas dans un isolant, pour lequel le fondamental est décrit à partir de l'ensemble des états électroniques correspondant aux bandes d'énergies sous le gap. Les phases correspondantes s'appellent des isolants topologiques, que nous décrirons dans la seconde partie de ce cours. Par analogie avec les exemples de la figure 1.5, nous nous attendons à ce que dans un isolant topologique il ne soit pas possible de définir continûment les états propres au-

tour de la zone de Brillouin. Cela devrait se manifester également par des propriétés d'enroulement de la phase des états propres lorsque le quasi-moment  $\mathbf{k}$  évolue d'un bord à l'autre de la zone de Brillouin. Est-ce à dire que ces états propres ne seront pas définis pour certaines valeurs du quasi-moment ? Non : rien n'empêche de définir de façon discontinue la phase des états propres autour de la zone de Brillouin. Mais cela empêche de déformer continûment l'état fondamental d'un isolant topologique en l'état fondamental d'un isolant standard. Si l'on considère une interface entre deux matériaux correspondant à deux telles phases, il ne sera pas possible de résoudre l'équation de Schrödinger en ne considérant que les états sous les gaps d'énergie, ce qui reviendrait à trouver une extrapolation continue entre les deux ensembles d'états propres sous le gap. Nécessairement, il faudra fermer le gap des isolants à l'interface entre eux. Cette fermeture du gap à l'interface manifeste l'apparition d'états métalliques à une telle interface. L'existence de ces états est la manifestation expérimentale majeure de la nature topologique de ces nouveaux isolants.



**Première partie**

**Transport parallèle et Phase  
géométrique**



## Chapitre 2

### Phase d'Aharonov-Bohm

Nous nous intéressons dans ce chapitre à la dépendance de la phase des fonctions d'onde d'objet chargé, typiquement des électrons, en la présence d'un potentiel vecteur. Dans ce problème initialement considéré par Aharonov et Bohm [?], nous allons voir que cette phase est sensible au potentiel vecteur bien que l'électron ne rencontre jamais aucun champ magnétique. Cela permet en particulier de détecter à distance la présence d'un flux magnétique.

#### 2.1 Expérience de pensée d'Aharonov et Bohm

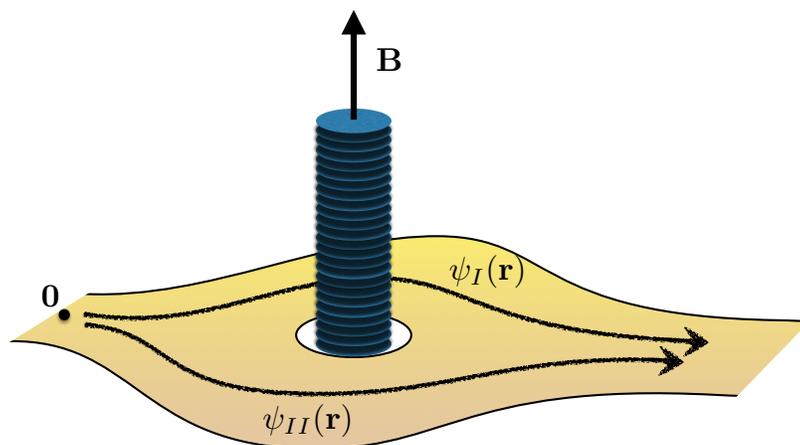


FIGURE 2.1 – Géométrie de l'expérience de pensée de Aharonov-Bohm

Nous nous intéressons donc à la géométrie de l'expérience de pensée représentée sur la figure 2.1. Nous considérons des électrons évoluant dans un plan. Ce plan est percé d'un solénoïde donnant naissance à un champ magnétique  $\mathbf{B}$  en son sein. Les électrons ne peuvent interagir directement avec le solénoïde. L'évolution des électrons est donc décrite par le Hamiltonien

$$\mathcal{H} = \frac{(\hat{\mathbf{p}} - q\mathbf{A}(\mathbf{r}))^2}{2m}, \quad (2.1)$$

où  $m$  et  $q = -e$  sont la masse et la charge des électrons.

### 2.1.1 Magnétostatique et invariance de jauge

On suppose le champ magnétique  $\mathbf{B}$  indépendant du temps, mais non uniforme. Il satisfait donc l'équation (absence de monopole magnétique) :

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0 \Rightarrow \mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{r}). \quad (2.2)$$

Cette équation manifeste l'invariance de jauge du potentiel vecteurs : deux potentiels  $\mathbf{A}(\mathbf{r})$  et  $\mathbf{A}'(\mathbf{r})$  différant d'une transformation de jauge

$$\mathbf{A}'(\mathbf{r}) = \mathbf{A}(\mathbf{r}) + \nabla\chi(\mathbf{r}), \quad (2.3)$$

où  $\chi(\mathbf{r})$  est une fonction scalaire, correspondent à un même champ magnétique. Nous devons veiller à ce que la physique déduite du Hamiltonien (2.1), qui dépend explicitement du potentiel vecteur  $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ , soit bien invariante de ce choix de jauge.

### 2.1.2 Relations de commutation canoniques, invariance de jauge et moment canonique

Rappelons que l'opérateur position et l'impulsion satisfont les relations de commutations canoniques

$$[\hat{r}_k, \hat{r}_l] = 0, \quad [\hat{p}_k, \hat{p}_l] = 0, \quad [\hat{r}_k, \hat{p}_l] = i\hbar\delta_{kl}. \quad (2.4)$$

A partir de l'action de l'opérateur position  $\hat{\mathbf{r}}$  sur une fonction d'onde  $\hat{\mathbf{r}}[\psi(\mathbf{r})] = \mathbf{r}\psi(\mathbf{r})$  (compatible avec la première relation de commutation), la dernière relation de commutation impose la relation, valable pour toute fonction d'onde,

$$\hat{r}_k \hat{p}_l [\psi(\mathbf{r})] = \hat{p}_l [r_k \psi(\mathbf{r})] + i\hbar\delta_{kl} \psi(\mathbf{r}). \quad (2.5)$$

La solution de cette équation est

$$\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla + \mathbf{X}(\mathbf{r}) \quad (2.6)$$

où  $\mathbf{X}(\mathbf{r})$  est un champ vectoriel de même dimension  $d$  que  $\hat{\mathbf{p}}$  et arbitraire à ce stade. La seconde relation de commutation dans (2.4) impose maintenant

$$\hat{p}_k \hat{p}_l = \hat{p}_l \hat{p}_k \quad (2.7)$$

$$\Rightarrow (-i\hbar\partial_k + X_k(\mathbf{r}))(-i\hbar\partial_l + X_l(\mathbf{r}))[\psi(\mathbf{r})] = (-i\hbar\partial_l + X_l(\mathbf{r}))(-i\hbar\partial_k + X_k(\mathbf{r}))[\psi(\mathbf{r})] \quad (2.8)$$

$$\Rightarrow \partial_k X_l(\mathbf{r}) = \partial_l X_k(\mathbf{r}). \quad (2.9)$$

Ainsi  $\mathbf{X}(\mathbf{r})$  est un champ de rotationnel nul, qui s'exprime sous la forme

$$\mathbf{X}(\mathbf{r}) = \nabla f(\mathbf{r}), \quad (2.10)$$

où  $g(\mathbf{r})$  est une fonction scalaire arbitraire. La solution des équations de commutation canonique de la mécanique quantique impose donc des opérateurs position et impulsion de la forme

$$\hat{\mathbf{r}}[\psi(\mathbf{r})] = \mathbf{r}\psi(\mathbf{r}) \quad (2.11a)$$

$$\hat{\mathbf{p}}[\psi(\mathbf{r})] = -i\hbar\nabla\psi(\mathbf{r}) + \psi(\mathbf{r})\nabla f(\mathbf{r}). \quad (2.11b)$$

La forme générale (2.11b) de l'opérateur impulsion nous indique que la fonction arbitraire  $f(\mathbf{r})$  peut être absorbé dans phase des fonctions d'onde considérées *via* une transformation de jauge :

$$\psi(\mathbf{r}) \rightarrow \psi'(\mathbf{r}) = \hat{U}\psi(\mathbf{r}) = e^{\frac{i}{\hbar}f(\mathbf{r})}\psi(\mathbf{r}). \quad (2.12)$$

Il est donc toujours possible de se ramener à la forme habituelle de l'opérateur impulsion. Cependant cet exercice nous révèle l'invariance de jauge intrinsèque de la mécanique quantique. Cet invariance de jauge est à mettre en regard de celle des équations de Maxwell de l'électromagnétique : un changement de jauge du potentiel vecteur électromagnétique  $\mathbf{A}'(\mathbf{r}) = \mathbf{A}(\mathbf{r}) + \nabla\chi(\mathbf{r})$  (cf 2.3) peut être absorbé au niveau du Hamiltonien quantique (2.1) par une redéfinition de l'opérateur impulsion

$$\hat{\mathbf{p}} \rightarrow \hat{\mathbf{p}}' = \hat{\mathbf{p}} + q\nabla\chi(\mathbf{r}) \quad (2.13)$$

qui est bien de la forme (2.11b). D'après l'invariance de jauge quantique, cette redéfinition peut être elle-même absorbée par un changement de jauge des fonctions d'onde

$$\psi(\mathbf{r}) \rightarrow \psi'(\mathbf{r}) = \hat{U}\psi(\mathbf{r}) = e^{\frac{i}{\hbar}q\chi(\mathbf{r})}\psi(\mathbf{r}). \quad (2.14)$$

Invariance de jauge de l'électromagnétisme et du formalisme quantique se marient ici parfaitement.

### 2.1.3 Déphasage d'Aharonov et Bohm

Reprenons maintenant l'expérience décrite sur la figure 2.1. Le champ magnétique étant nul en dehors du solénoïde, le potentiel vecteur doit y satisfaire

$$\nabla \times \mathbf{A}(\mathbf{r}) = \mathbf{B}(\mathbf{r}) = \mathbf{0}. \quad (2.15)$$

La solution habituelle  $\mathbf{A}(\mathbf{r}) = \nabla\chi(\mathbf{r})$  de cette équation suppose que l'espace de la solution soit connexe, c'est-à-dire que tous les chemins fermés puissent être déformés en un point. En effet, une telle solution s'intègre en

$$\chi(\mathbf{r}) = \chi(\mathbf{0}) + \int_{C:\mathbf{0}\rightarrow\mathbf{r}} \mathbf{A}(\mathbf{r}) \cdot d\mathbf{r}. \quad (2.16)$$

Afin que  $\chi(\mathbf{r})$  soit bien défini, l'intégrale ci-dessus ne doit pas dépendre du chemin  $C$  choisi pour relier l'origine  $\mathbf{0}$  au point  $\mathbf{r}$ . Cette indépendance implique donc que pour tout chemin fermé  $\partial S$ ,

$$\oint_{\partial S} \mathbf{A}(\mathbf{r}) \cdot d\mathbf{r} = \int_S \mathbf{B} \cdot d\mathbf{r} = 0. \quad (2.17)$$

Cette propriété n'est pas satisfaite pour la géométrie de la fig. 2.1 de par la présence du flux qui perce le plan. Une solution n'est donc possible que sur chaque région n'enserrant pas le solénoïde. Deux telles régions sont représentées sur la figure 2.3. Dans chaque région, une solution de la forme  $\mathbf{A}_{I/II}(\mathbf{r}) = \nabla\chi_{I/II}(\mathbf{r})$  est maintenant

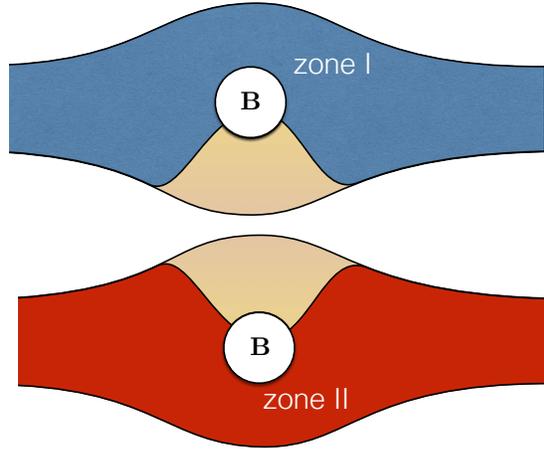


FIGURE 2.2 – Définition de deux régions connexes I et II dans la géométrie de Aharonov-Bohm

possible.

Considérons maintenant l'évolution d'une fonction d'onde  $\psi_1(\mathbf{r})$  n'évoluant que dans la région I d'un bord à l'autre de l'échantillon. D'après la transformation de jauge (2.14), la présence du potentiel vecteur  $\mathbf{A}_1(\mathbf{r}) = \nabla\chi_1(\mathbf{r})$  peut être entièrement absorbée dans une redéfinition de la phase :

$$\psi_1(\mathbf{r}) = e^{\frac{i}{\hbar}q\chi_1(\mathbf{r})}\psi_1^{(0)}(\mathbf{r}) \quad (2.18)$$

où  $\psi_1^{(0)}(\mathbf{r})$  est une fonction d'onde déterminée en l'absence du champ magnétique, et parfaitement définie dans l'ensemble de l'échantillon. Nous pouvons procéder de

même dans la région II. La phase relative entre les deux fonctions d'ondes  $\psi_I(\mathbf{r})$  et  $\psi_{II}(\mathbf{r})$  en un point  $\mathbf{r}$  à la sortie du conducteur est donc donnée par

$$\varphi = \frac{q}{\hbar} (\chi_I(\mathbf{r}) - \chi_{II}(\mathbf{r})). \quad (2.19)$$

En utilisant l'équation (2.16) pour deux chemins  $C_I$  et  $C_{II}$  allant de  $\mathbf{0}$  à  $\mathbf{r}$  à l'intérieur respectivement des régions I et II, nous en tirons

$$\varphi = \frac{q}{\hbar} \left( \int_{C_I} \mathbf{A}_I(\mathbf{r}) \cdot d\mathbf{r} - \int_{C_{II}} \mathbf{A}_{II}(\mathbf{r}) \cdot d\mathbf{r} \right) \quad (2.20)$$

$$= \frac{q}{\hbar} \oint_C \mathbf{A}(\mathbf{r}) \cdot d\mathbf{r} \quad (2.21)$$

$$= 2\pi \frac{\Phi}{\phi_0} \quad (2.22)$$

où  $\Phi$  est le flux contenu à l'intérieur du solénoïde, et  $\phi_0 = h/q$  le quantum de flux. Ce déphasage ne dépend pas du chemin  $C$ , union de  $C_I$  et  $C_{II}$ , choisi autour du solénoïde : on peut donc le qualifier de topologique en ce sens. Remarquons ici le résultat remarquable qu'implique cette dérivation : un flux magnétique déphase les électrons circulant autour de lui, bien que ces électrons ne rencontrent jamais de champ magnétique. Ce résultat remarquable est une conséquence directe de l'invariance de jauge de la mécanique quantique. En particulier, le courant en sortie d'un tel anneau est modulé périodiquement en fonction du flux magnétique. Ce résultat a en particulier été observé expérimentalement dans des fils d'or de longueur de l'ordre du micron, et à  $T = 10 \text{ mK}$ .

**Remarque 2.1.** Il est également possible de dériver ce résultat en considérant un potentiel vecteur défini en tout point du plan. Dans le cas d'un solénoïde dirigé selon l'axe  $z$ , et tel que  $\mathbf{B}(\mathbf{r}) = B_0 \hat{e}_z$  pour  $\rho = (x^2 + y^2)^{\frac{1}{2}} < r_0$  et  $\mathbf{B}(\mathbf{r}) = 0$  en dehors du solénoïde ( $\rho > r_0$ ), un choix possible de potentiel vecteur est

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}) = \begin{cases} \frac{B_0 \rho}{2} \hat{e}_\phi & \text{pour } \rho < r_0 \\ \frac{\Phi}{2\pi \rho} \hat{e}_\phi & \text{pour } \rho > r_0 \end{cases} \quad (2.23)$$

où  $\Phi = B_0 \pi r_0^2$  est le flux magnétique à travers le solénoïde.

## 2.2 Monopole de Dirac

Nous nous tournons maintenant vers le problème considéré par Dirac de la conséquence en mécanique quantique de l'existence d'un monopole magnétique [?, ?]. Un tel monopole magnétique placé à l'origine  $\mathbf{r} = \mathbf{0}$  créerait un champ magnétique

$$\mathbf{B}(\mathbf{r}) = \frac{q_m}{4\pi r^2} \hat{e}_r. \quad (2.24)$$

Par définition, un tel champ magnétique ne peut se déduire d'un potentiel vecteur unique  $\mathbf{A}(\mathbf{r})$  car  $\int_S \mathbf{B} \cdot d\mathbf{r} = q_m \neq 0$  pour toute surface  $S$  enserrant le monopole. Cependant, de même que dans le traitement du problème d'Aharonov-Bohm, il est possible de se ramener à deux potentiels vecteurs  $\mathbf{A}_I(\mathbf{r})$  et  $\mathbf{A}_{II}(\mathbf{r})$ , chacun défini sur une région qui est connexe si l'on exclut l'origine. Dans ces deux régions, aucune surface  $S$  n'enserme l'origine, et  $\int_S \mathbf{B} \cdot d\mathbf{r} = 0$  est vérifiée pour toute surface fermée. Deux régions possibles sont données en coordonnées polaires par  $0 \leq \theta \leq 3\pi/4$  et  $\pi/4 \leq \theta \leq \pi$  en excluant l'origine :  $r > 0$ .

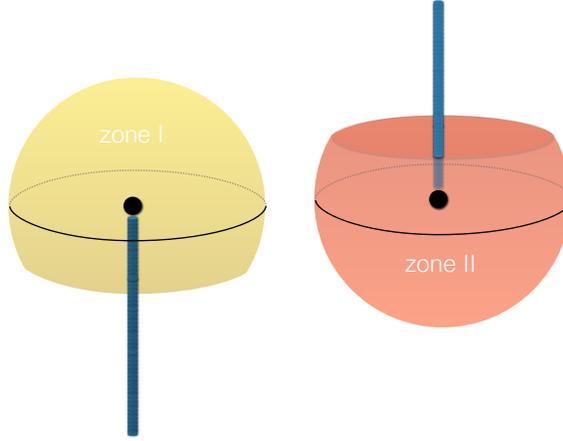


FIGURE 2.3 – Monopole magnétique à l'origine, et définition de deux régions connexes I et II représentée ici comme deux régions sur le cercle définissant les directions en coordonnées polaires. Pour chaque région I ou II, il est possible de définir un potentiel vecteur décrivant le monopole ainsi qu'une corde de Dirac portée par l'axe  $z$  et issue du monopole.

Il nous reste à déterminer les potentiels vecteurs correspondants. Dans la région  $I$  nous choisissons le potentiel vecteur suivant :

$$\mathbf{A}_I(\mathbf{r}) = \frac{q_m}{4\pi r} \frac{1 - \cos \theta}{\sin \theta} \hat{e}_\phi. \quad (2.25)$$

Ce potentiel est bien défini sauf pour  $\theta = \pi$ , *i.e.* pour  $z < 0$  qui ne fait pas partie de la région  $I$ . Un calcul du rotationnel de ce potentiel (voir eqs. (2.35)) nous permet de vérifier que

$$B_r = \frac{q_m}{4\pi r^2}, \quad B_\theta = 0, \quad B_\phi = 0, \quad (2.26)$$

qui correspond bien au champ magnétique créé par une charge  $q_m$  à l'origine, dont le flux à travers toute surface qui l'enserme est constant. Cependant, nous faisons une erreur dans ce calcul : en plus du champ magnétique précédent, ce potentiel vecteur crée un champ magnétique porté par un demi-solénoïde infiniment fin (tube de flux)

allant du monopole à l'infini et appelée corde de Dirac. Dans le cas présent, cette corde de Dirac est dirigée le long du demi axe  $z < 0$ , et de flux  $q_m$ . Pour nous convaincre de la présence de cette corde de Dirac (il n'est pas possible de calculer directement le champ magnétique le long de ce demi-axe), nous pouvons considérer la circulation du potentiel vecteur  $\mathbf{A}_I(\mathbf{r})$  le long d'un cercle de rayon  $r \sin \theta$ , qui doit être égal au flux magnétique à l'intérieur de la surface portée par ce cercle :

$$\oint \mathbf{A}_I(\mathbf{r}) \cdot d\mathbf{r} = \oint \mathbf{A}_I(\mathbf{r}) \cdot \hat{e}_\phi (r \sin \theta) d\phi = \frac{q_m}{2} (1 - \cos \theta). \quad (2.27)$$

Ce flux contient la contribution du monopole magnétique. Afin de l'éliminer, considérons un cercle infiniment proche de l'axe  $z$ , correspondant à  $\theta \rightarrow 0$  ou  $\theta \rightarrow \pi$  : nous obtenons

$$\lim_{\theta \rightarrow 0} \oint \mathbf{A}_I(\mathbf{r}) \cdot d\mathbf{r} = 0 \quad (z > 0) \quad ; \quad \lim_{\theta \rightarrow \pi} \oint \mathbf{A}_I(\mathbf{r}) \cdot d\mathbf{r} = q_m \quad (z < 0), \quad (2.28)$$

ce qui correspond bien au résultat annoncé. De même, pour la région II nous pouvons considérer le potentiel

$$\mathbf{A}_{II}(\mathbf{r}) = -\frac{q_m}{4\pi r} \frac{1 + \cos \theta}{\sin \theta} \hat{e}_\phi \quad (2.29)$$

qui décrit un champ magnétique d'un monopole  $q_m$  à l'origine ainsi que d'une corde de Dirac le long de l'axe  $z > 0$  de flux  $-q_m \hat{e}_z$ .

Une fois ces deux potentiels choisis, nous réalisons que la différence  $\mathbf{A}_I(\mathbf{r}) - \mathbf{A}_{II}(\mathbf{r})$  correspond nécessairement au potentiel vecteur (2.23) pour un solénoïde le long de l'axe  $z$  entier, de flux donné par  $q_m \hat{e}_z$ , déjà rencontré dans le problème de Aharonov-Bohm :

$$\mathbf{A}_I(\mathbf{r}) - \mathbf{A}_{II}(\mathbf{r}) = -\frac{q_m}{2\pi r} \frac{1}{\sin \theta} \hat{e}_\phi \quad (2.30)$$

En dehors de l'axe  $z$ , le champ magnétique est nul est cette différence peut donc s'exprimer comme une transformation de jauge :

$$\mathbf{A}_I(\mathbf{r}) - \mathbf{A}_{II}(\mathbf{r}) = -\frac{q_m}{2\pi r} \frac{1}{\sin \theta} \hat{e}_\phi = \nabla \left( -\frac{q_m}{2\pi} \phi \right) = \nabla \chi(\mathbf{r}) \quad (2.31)$$

Cette transformation de jauge ne peut être définie pour tout l'espace (ce qui contredirait l'existence du monopole) : en effet elle n'est bien définie qu'en dehors de l'axe  $z$  (où  $\phi$  n'est pas défini). En particulier, elle est naturellement définie dans la région commune aux régions I et II.

Considérons maintenant une particule de charge  $q_e$  évoluant autour de ce monopole, et décrite par le Hamiltonien (2.1). Dans la région I, avec le choix de jauge (2.25) nous obtenons la fonction d'onde  $\psi_I(\mathbf{r})$ . Dans la région II, le choix de jauge (2.29) conduit à une fonction d'onde  $\psi_{II}(\mathbf{r})$ . Dans la région commune  $I \cap II$ , les deux fonctions d'onde sont reliées par une transformation de jauge :

$$\psi_{II}(\mathbf{r}) = \exp\left(\frac{i}{\hbar} q_e \chi(\mathbf{r})\right) \psi_I(\mathbf{r}) = \exp\left(-i \frac{q_e q_m}{\hbar} \phi\right) \psi_I(\mathbf{r}) \quad (2.32)$$

Par définition, les fonctions d'ondes doivent être monovaluées en mécanique quantique :  $\psi_I(\mathbf{r})$  et  $\psi_{II}(\mathbf{r})$  sont donc monovaluées, ce qui implique que la facteur de phase doit également l'être. En particulier, une variation de  $2\pi$  de l'angle  $\phi$  ne doit pas modifier la valeur de ce facteur. C'est l'argument utilisée par Dirac pour en déduire la quantification de la charge  $q_e$  si un monopole existe, ou plus précisément la relation de quantification

$$q_e q_m = n 2\pi\hbar \text{ with } n \in \mathbb{Z}. \quad (2.33)$$

Les deux problèmes rencontrés dans ce chapitre nous ont permis d'établir un lien important entre l'invariance de jauge quantique et l'invariance de jauge de l'électromagnétisme, qui se traduit par une dépendance de la phase des fonctions d'onde électronique en la présence d'un potentiel vecteur magnétique. En passant la description par Dirac de la présence d'un monopole magnétique nous a fourni le premier exemple d'un problème dans lequel la phase de cette fonction d'onde ne peut être définie de façon continue dans l'espace entier. La description devait se faire par régions, chacune connexe et n'entourant pas le monopole, et l'invariance de jauge permettait de recoller les fonctions d'onde aux jonctions entre régions. Nous rencontrerons par la suite d'autres exemples analogues signalant des propriétés topologiques des fonctions d'onde.

**Note 2.2.** On rappelle les expressions suivantes en coordonnées cylindriques :

$$\nabla f = \partial_\rho f \hat{e}_\rho + \frac{1}{\rho} \partial_\phi f \hat{e}_\phi + \partial_z f \hat{e}_z \quad (2.34a)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{X} = \frac{1}{\rho} \partial_\rho(\rho A_\rho) + \frac{1}{\rho} \partial_\phi A_\phi + \partial_z A_z \quad (2.34b)$$

$$\begin{aligned} \nabla \times \mathbf{X} = & \left[ \frac{1}{\rho} \partial_\phi A_z - \partial_z A_\phi \right] \hat{e}_\rho + \left[ \partial_z A_\rho - \partial_\rho A_z \right] \hat{e}_\phi \\ & + \frac{1}{\rho} \left[ \partial_\rho(\rho A_\phi) - \partial_\phi A_\rho \right] \hat{e}_z, \end{aligned} \quad (2.34c)$$

et en coordonnées sphériques :

$$\nabla f = \partial_r f \hat{e}_r + \frac{1}{r} \partial_\theta f \hat{e}_\theta + \frac{1}{r \sin \theta} \partial_\phi f \hat{e}_\phi \quad (2.35a)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{X} = \frac{1}{r^2} \partial_r(r^2 A_r) + \frac{1}{r \sin \theta} \partial_\theta(A_\theta \sin \theta) + \frac{1}{r \sin \theta} \partial_\phi A_\phi \quad (2.35b)$$

$$\begin{aligned} \nabla \times \mathbf{X} = & \frac{1}{r \sin \theta} \left[ \partial_\theta(A_\phi \sin \theta) - \partial_\phi A_\theta \right] \hat{e}_r + \frac{1}{r} \left[ \frac{1}{\sin \theta} \partial_\phi A_r - \partial_r(r A_\phi) \right] \hat{e}_\theta \\ & + \frac{1}{r} \left[ \partial_r(r A_\theta) - \partial_\theta A_r \right] \hat{e}_\phi \end{aligned} \quad (2.35c)$$

# Chapitre 3

## Phase de Berry

Dans ce chapitre, nous allons nous intéresser à l'évolution adiabatique d'un état  $|\psi(t)\rangle$ , état propre d'un Hamiltonien dépendant du temps. Nous considérons la situation générique où ce Hamiltonien  $H[\lambda]$  dépend d'un ensemble de paramètres  $\lambda = (\lambda_1, \lambda_2, \dots)$  (champ magnétique, volume, etc) qui évoluent lentement dans le temps. Une évolution particulièrement pertinente est un cycle dans le temps, dans lequel les paramètres extérieurs reviennent à leur valeur initiale à la fin de l'évolution. La question naturelle est celle de l'évolution de l'état propre considéré : revient-il exactement à son état initial ? Nous allons voir qu'il n'en est pas toujours le cas, et qu'il peut acquérir une phase lors de son évolution. Cette phase, appelée Berry suite aux travaux fondateurs de M. Berry sur ce sujet, peut être reliée à un potentiel vecteur par analogie avec la phase d'Aharonov-Bohm. Associé à ce potentiel vecteur nous introduisons une quantité analogue au champ magnétique, la courbure de Berry, dont la présence agit comme une source de déphasage lors d'une évolution adiabatique.

### 3.1 Notion de phase géométrique

Nous considérons donc un ensemble de paramètres  $\lambda = (\lambda_1, \lambda_2, \dots)$  continu paramétrisant un Hamiltonien  $H[\lambda]$ . Ceci implique que pour chaque valeur de  $\lambda$  nous considérons un espace de Hilbert  $\mathcal{H}$  auquel appartiennent les états quantiques sur lesquels agit le Hamiltonien. D'un point de vue formel, nous sommes donc en train de considérer un fibré vectoriel entrevu dans l'introduction et illustré sur la figure 3.1 : il est défini par son espace de base, ici l'espace  $\Lambda$  des paramètres  $\lambda$ , et la donnée d'un espace vectoriel - ou fibre - pour chaque valeur de  $\lambda$ , ici l'espace de Hilbert  $\mathcal{H}$  indépendant de  $\lambda$ . Nous allons considérer une évolution particulière des états dans ce fibré, donnée par l'évolution adiabatique d'un état  $|\psi_n\rangle$  du Hamiltonien  $H[\lambda]$  lorsque  $\lambda$  évolue lentement dans l'espace  $\Lambda$ . Considérons un état  $|\psi(t)\rangle$  dont l'évolution hamiltonienne est donnée par l'équation de Schrödinger

$$i\hbar \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = H[\lambda(t)] |\psi(t)\rangle. \quad (3.1)$$

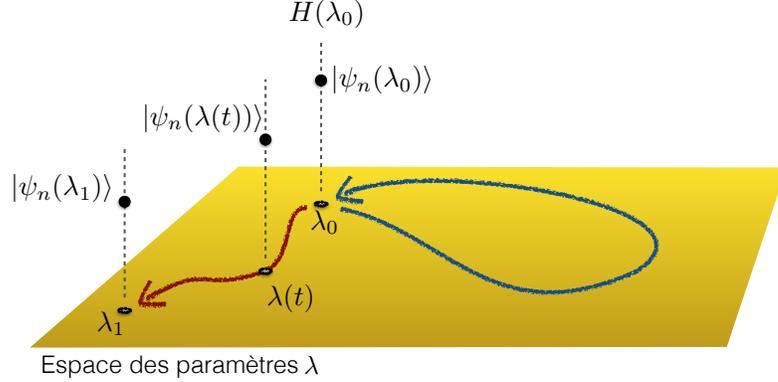


FIGURE 3.1 – Berry.

Il est commode de considérer pour chaque valeur de  $\lambda$  une base orthonormée d'états propres de  $H[\lambda]$  qui satisfont donc

$$H[\lambda] |\psi_n(\lambda)\rangle = E_n(\lambda) |\psi_n(\lambda)\rangle. \quad (3.2)$$

Nous supposons qu'une telle base peut être choisie de façon continue en  $\lambda$ . Nous supposons qu'à  $t = 0$  le système est préparé dans un état propre du Hamiltonien, et qu'il reste dans cet état propre lors de l'évolution lente des paramètres du Hamiltonien, c'est-à-dire

$$|\psi(t)\rangle = c_n(t) |\psi_n[\lambda(t)]\rangle \quad \forall t. \quad (3.3)$$

Nous supposons que cet état propre demeure non dégénérée au cours de l'ensemble de son évolution : il n'y a aucun croisement de niveau. En reportant dans l'équation de Schrödinger (3.1), nous en déduisons l'équation d'évolution du coefficient  $c_n(t)$ , qui est un nombre complexe de module 1 :

$$i\hbar \dot{c}_n(t) = c_n(t) E_n[\lambda(t)] - i\hbar c_n(t) \langle \psi_n[\lambda(t)] | \frac{d}{dt} | \psi_n[\lambda(t)] \rangle. \quad (3.4)$$

Cette équation s'intègre en

$$c_n(t) = c_n(0) \exp i(\theta_{\text{dyn}} + \theta_{\text{geom}}) \quad (3.5)$$

avec

$$\theta_{\text{dyn}} = -\frac{1}{\hbar} \int_0^T E_n[\lambda(t)] dt \quad ; \quad \theta_{\text{geom}} = +i \int_0^T \langle \psi_n[\lambda(t)] | \frac{d}{dt} | \psi_n[\lambda(t)] \rangle dt \quad (3.6)$$

Ainsi l'évolution d'un état propre du Hamiltonien lors d'une évolution lente des paramètres extérieurs donne naissance à deux déphasages : un déphasage habituel

$\theta_{\text{dyn}}$ , qui provient de l'évolution de l'énergie de l'état au cours du temps, et donc de la dynamique de cet état. Et une nouvelle phase  $\theta_{\text{geom}}$ . Nous allons voir que cette phase, communément appelée *phase de Berry*, est une caractéristique intrinsèque des états propres du Hamiltonien pour chaque valeur de  $\lambda$ , et donc du fibré vectoriel. En effet, il est possible de réexprimer cette phase comme une intégrale le long du chemin  $C$  suivi dans l'espace des paramètres  $\Lambda$  :

$$\theta_{\text{geom}} = i \int_0^T \langle \psi_n[\lambda(t)] | \frac{d}{dt} | \psi_n[\lambda(t)] \rangle dt \quad (3.7)$$

$$= i \int_0^T \langle \psi_n[\lambda(t)] | \dot{\lambda} \cdot \nabla_{\lambda} | \psi_n[\lambda(t)] \rangle dt \quad (3.8)$$

$$= i \int_C \langle \psi_n[\lambda] | \nabla_{\lambda} | \psi_n[\lambda] \rangle \cdot d\lambda. \quad (3.9)$$

Cette dernière expression exprime le caractère géométrique de cette phase : elle ne dépend pas de la vitesse de variation (faible)  $\dot{\lambda}$  des paramètres du Hamiltonien, mais uniquement du chemin suivi  $C$ . Cette expression nous indique également que cette phase est bien réelle. En effet, utilisant la norme de l'état propre  $|\psi_n[\lambda]\rangle$  étant naturellement réelle, nous tirons de l'égalité

$$\nabla_{\lambda} (\langle \psi_n[\lambda] | \psi_n[\lambda] \rangle) = \overline{\langle \psi_n[\lambda] | \nabla_{\lambda} | \psi_n[\lambda] \rangle} + \langle \psi_n[\lambda] | \nabla_{\lambda} | \psi_n[\lambda] \rangle = \mathbf{0} \quad (3.10)$$

que l'intégrande de (3.9) est bien un imaginaire pur et donc  $\theta_{\text{geom}}$  réelle. La situation que nous rencontrons ici est assez analogue à celle rencontrée dans la discussion de la phase de Aharonov-Bohm : les deux phases dépendent du chemin parcouru. Pour la phase d'Aharonov-Bohm ce chemin est parcouru dans l'espace réel et pour la phase de Berry il est parcouru dans l'espace abstrait des paramètres  $\Lambda$ . Il est donc tentant d'introduire une grandeur analogue au potentiel vecteur électromagnétique, appelée connexion de Berry :

$$\mathcal{A}(\lambda) = i \langle \psi_n(\lambda) | \nabla_{\lambda} | \psi_n(\lambda) \rangle, \quad (3.11)$$

tel que

$$\theta_{\text{geom}} = \int_C \mathcal{A}(\lambda) \cdot d\lambda. \quad (3.12)$$

Cet vecteur a la dimension de l'espace des paramètres.

Dans le calcul de la phase géométrique  $\theta_{\text{geom}}$  nous avons supposé connu un état propre  $|\psi_n(\lambda)\rangle$  qui varie *continûment* avec  $\lambda$  : ceci est crucial pour pouvoir définir la connexion de Berry (3.63). Nous verrons plus loin une formulation de la phase géométrique qui ne requiert par une telle continuité (de la phase) de cet état propre. Il est cependant capital d'étudier la dépendance de  $\theta_{\text{geom}}$  en le choix arbitraire de phase continu de  $|\psi_n(\lambda)\rangle$ . Pour cela, considérons un second choix d'états propres  $|\tilde{\psi}_n(\lambda)\rangle$ , qui nécessairement diffèrent de  $|\psi_n(\lambda)\rangle$  par un changement de jauge (nous avons supposé que l'énergie propre considérée était non dégénérée) :

$$|\tilde{\psi}_n(\lambda)\rangle = e^{i\chi(\lambda)} |\psi_n(\lambda)\rangle. \quad (3.13)$$

Ce changement de jauge entraîne une modification de la connexion de Berry :

$$\mathcal{A}(\lambda) \rightarrow \tilde{\mathcal{A}}(\lambda) = \mathcal{A}(\lambda) - \nabla_\lambda \chi(\lambda) \quad (3.14)$$

qui est le pendant de la transformation de jauge du potentiel vectoriel électromagnétique (2.3). En particulier, nous obtenons que la phase  $\theta_{\text{geom}}$  correspondant à un chemin fermé est indépendante de jauge, comme toute grandeur physique. Ainsi, une phase de Berry différent d'un multiple de  $2\pi$  pour un chemin fermé ne pourra pas être absorbée dans un changement de jauge : c'est un déphasage caractéristique de l'évolution de l'état lors de la variation du paramètre  $\lambda$ , qui peut donc être mesurer expérimentalement.

## 3.2 Evolution Adiabatique

Avant de poursuivre notre étude de cette phase géométrique, revenons sur la notion de transport adiabatique. Nous avons supposé précédemment que nous pouvions restreindre l'évolution d'un état propre initial au sous espace propre correspondant du Hamiltonien instantané  $H[\lambda(t)]$ . Nous allons dériver plus précisément les conditions de cette restriction.

### 3.2.1 Equation d'évolution d'un état

Nous considérons maintenant l'évolution lorsque  $\lambda(t)$  varie lentement d'un état  $|\psi(t)\rangle$ , initialement état propre du Hamiltonien :  $|\psi(t=0)\rangle = |\psi_{n_0}[\lambda(0)]\rangle$ . Pour chaque valeur  $\lambda(t)$ , ce vecteur  $|\psi(t)\rangle$  peut être décomposé sur la base d'états propres de  $H[\lambda(t)]$  définie ci-dessus :

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n(t) |\psi_n[\lambda(t)]\rangle. \quad (3.15)$$

En reportant dans l'équation de Schrödinger, nous obtenons

$$i\hbar \sum_n \dot{c}_n(t) |\psi_n[\lambda(t)]\rangle + i\hbar \sum_n c_n(t) \dot{\lambda} \cdot \nabla_\lambda |\psi_n[\lambda(t)]\rangle = \sum_n c_n(t) E_n[\lambda(t)] |\psi_n[\lambda(t)]\rangle, \quad (3.16)$$

qui se traduit en une équation différentielle pour les coefficients

$$i\hbar \dot{c}_n(t) = -i\hbar \sum_m c_m(t) \langle \psi_n[\lambda(t)] | \dot{\lambda} \cdot \nabla_\lambda | \psi_m[\lambda(t)] \rangle + c_n(t) E_n[\lambda(t)]. \quad (3.17)$$

### 3.2.2 Evolution adiabatique

L'équation (3.17) nous incite à intégrer la phase dynamique dans les coefficients  $c_n(t)$  afin de se focaliser sur le premier terme. Pour cela, nous définissons des coefficients

$$\tilde{c}_n(t) = \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_0^t E_n(t') dt'\right) c_n(t) \quad (3.18)$$

qui satisfont l'équation simplifiée

$$\dot{\tilde{c}}_n(t) = - \sum_m \tilde{c}_m(t) \exp\left(i \int_0^t \omega_{nm}(t') dt'\right) \langle \psi_n[\lambda(t)] | \lambda \cdot \nabla_\lambda | \psi_m[\lambda(t)] \rangle, \quad (3.19)$$

où nous avons introduit la fréquence de Bohr instantanée :

$$\hbar\omega_{n,m}[\lambda(t)] = E_n[\lambda(t)] - E_m[\lambda(t)]. \quad (3.20)$$

Dans cette équation,  $\lambda$  va jouer le rôle d'un paramètre perturbatif dans la limite d'une évolution lente des paramètres. La condition initiale décrit la présence du vecteur dans un état propre  $|\psi(t=0)\rangle = |\psi_{n_0}[\lambda(0)]\rangle$ . Ceci nous donne la solution en fonction du temps à l'ordre 0 en  $\lambda$  (lorsque les paramètres n'évoluent pas) :

$$c_n^{(0)}(t) = \delta_{n,n_0}. \quad (3.21)$$

A l'ordre suivant en  $\lambda$ , nous obtenons d'après (3.17)

$$\dot{\tilde{c}}_n^{(1)}(t) = - \exp\left(i \int_0^t \omega_{nn_0}(t') dt'\right) \langle \psi_n[\lambda(t)] | \lambda \cdot \nabla_\lambda | \psi_{n_0}[\lambda(t)] \rangle. \quad (3.22)$$

Si l'on suppose que ni  $\omega_{nn_0}$  ni  $\langle \psi_n[\lambda(t)] | \lambda \cdot \nabla_\lambda | \psi_{n_0}[\lambda(t)] \rangle$  ne dépendent du temps, cette équation se résoudrait en

$$\tilde{c}_{n \neq n_0}^{(1)}(t) \simeq \frac{e^{i\omega_{nn_0}t} - 1}{i\omega_{nn_0}} \langle \psi_n[\lambda(t)] | \lambda \cdot \nabla_\lambda | \psi_{n_0}[\lambda(t)] \rangle. \quad (3.23)$$

Cette solution approchée nous permet d'en déduire un critère pour pouvoir négliger ces coefficients  $\tilde{c}_{n \neq n_0}^{(1)}(t)$  au cours du temps, c'est-à-dire supposer que l'état propre demeure toujours dans le même état propre  $n_0$  au cours du temps :

$$\left| \lambda \cdot \frac{\langle \psi_n(\lambda) | \nabla_\lambda | \psi_{n_0}(\lambda) \rangle}{\hbar(E_n - E_{n_0})} \right| \ll 1 \quad \forall n. \quad (3.24)$$

En particulier cette condition impose une vitesse de variation maximum  $\dot{\lambda}$  des paramètres extérieurs qui dépend des écarts entre niveaux  $\hbar\omega_{nn_0}$ . Assez naturellement plus un niveau  $E_{n \neq n_0}$  s'approche, plus une dynamique adiabatique requiert une évolution lente de  $\lambda$ . Cette condition exclue donc la situation d'un croisement de niveau.

### 3.3 Courbure de Berry

Dans la situation très particulière où l'espace des paramètres est de dimension 3, nous pouvons pousser l'analogie avec la phase d'Aharonov-Bohm plus loin et introduire l'analogie d'un champ magnétique, appelé connexion de Berry, et défini par

$$\mathcal{B}(\lambda) = \nabla_\lambda \times \mathcal{A}(\lambda) = i \langle \nabla_\lambda \psi_n(\lambda) | \times | \nabla_\lambda \psi_n(\lambda) \rangle, \quad (3.25)$$

L'introduction de cette grandeur nous permet d'en déduire que lors d'une évolution périodique dans l'espace des paramètres, c'est-à-dire pour un circuit  $C = \partial S$  fermé, la phase géométrique acquise par l'état propre du Hamiltonien n'est pas nécessairement nulle : elle dépend du "flux de Berry" contenu à l'intérieur du chemin :

$$\theta_{\text{geom}} = \oint_C \mathcal{A}(\lambda) \cdot d\lambda = \int_S \mathcal{B}(\lambda) \cdot d^2\lambda. \quad (3.26)$$

**Note 3.1.** De façon plus générale, si  $\Lambda$  est de dimension  $p > 3$ , une intégrale le long d'une ligne de la connexion de Berry s'écrira

$$\int_{t=0}^T \sum_{i=1}^p \mathcal{A}_i(\lambda(t)) \frac{d\lambda_i}{dt} dt \equiv \oint_C \mathcal{A} \cdot d\lambda \quad (3.27)$$

Un tel objet, qui peut être intégré le long d'une ligne est appelée une 1-forme différentielle. En particulier, il est possible d'obtenir une 1-forme  $f$  à partir d'une fonction scalaire  $g(\lambda)$  donnée par  $f = dg = \sum_{i=1}^p (\partial g / \partial \lambda_i) d\lambda_i$ . De même les 2-forme qui s'intègre sur une surface de dimension 2. A partir d'une 1-forme  $f$  il est possible d'obtenir une 2-forme  $h$  définie par  $h = df = \sum_{i,j=1}^p (\partial f_j / \partial \lambda_i) d\lambda_i \wedge d\lambda_j$  avec par définition  $d\lambda_i \wedge d\lambda_j = -d\lambda_j \wedge d\lambda_i$ . Cette définition généralise la notion de rotationnel. En particulier, si  $f = dg$ , alors  $df = 0$ . Le théorème de Stokes se généralise en

$$\oint_{\partial S} f = \int_S df. \quad (3.28)$$

Ainsi, de façon générale la courbure de Berry est une 2-forme qui s'écrit

$$\mathcal{B}(\lambda) = d\mathcal{A}(\lambda) \quad (3.29)$$

Jusque maintenant, nous avons défini la connexion et la courbure de Berry en faisant appel à une base d'états propres définie de façon continue en  $\lambda$ . Une telle base peut être peu commode à déterminer, en particulier numérique. Dans certains cas, nous verrons par ailleurs qu'elle n'existe que localement. Il est donc commode de faire intervenir une expression de la courbure de Berry qui ne suppose aucune continuité de la base. En particulier, cette expression sera indépendante du choix de phase des éléments de la base, et donc manifestement invariante de jauge. L'idée générale de cette dérivation est de reporter les dérivées en  $\lambda$  des états propres au Hamiltonien, qui lui est par définition continu en  $\lambda$ . Par ailleurs la dérivation par rapport à  $\lambda_a$  de l'équation aux valeurs propres (3.2) nous donne

$$(\partial_a H) |\psi_n\rangle + H |\partial_a \psi_n\rangle = (\partial_a E_n) |\psi_n\rangle + E_n |\partial_a \psi_n\rangle, \quad (3.30)$$

où nous avons utilisé la notation concise  $\partial_a = \partial_{\lambda_a}$ . Pour  $m \neq n$  nous en déduisons

$$\langle \psi_m | \partial_a H | \psi_n \rangle = (E_n - E_m) \langle \psi_m | \partial_a \psi_n \rangle. \quad (3.31)$$

Cette expression va nous permettre de passer de variation des  $|\psi_n\rangle$  à des éléments de matrice de  $\partial_a H$ . Revenons maintenant à la définition de la courbure de Berry

$$\mathcal{B}_a^{(n)} = i \epsilon_{abc} \langle \partial_b \psi_n | \partial_c \psi_n \rangle = i \epsilon_{abc} \sum_{m \neq n} \langle \partial_b \psi_n | \psi_m \rangle \langle \psi_m | \partial_c \psi_n \rangle \quad (3.32)$$

où nous avons utilisé l'annulation du terme  $m = n$  :

$$\langle \psi_n | \psi_n \rangle = 1 \Rightarrow \langle \partial_b \psi_n | \psi_n \rangle + \langle \psi_n | \partial_b \psi_n \rangle = 0 \Rightarrow \epsilon_{abc} \langle \partial_b \psi_n | \psi_n \rangle \langle \psi_n | \partial_c \psi_n \rangle = 0. \quad (3.33)$$

Reportant l'expression (3.31) dans l'équation ci-dessus, nous obtenons

$$\mathcal{B}_a^{(n)} = i \epsilon_{abc} \sum_{m \neq n} \langle \partial_b \psi_n | \psi_m \rangle \langle \psi_m | \partial_c \psi_n \rangle \quad (3.34)$$

$$= i \epsilon_{abc} \sum_{m \neq n} \frac{\langle \psi_n | \partial_b H | \psi_m \rangle \langle \psi_m | \partial_c H | \psi_n \rangle}{(E_n - E_m)^2} \quad (3.35)$$

soit de façon plus concise pour un espace  $\Lambda$  de dimension 3

$$\mathcal{B}^{(n)} = i \sum_{m \neq n} \frac{\langle \psi_n | \nabla_\lambda H | \psi_m \rangle \times \langle \psi_m | \nabla_\lambda H | \psi_n \rangle}{(E_n - E_m)^2}. \quad (3.36)$$

Une conséquence de cette formule est que pour toute valeur de  $\lambda$  la somme des courbures de Berry pour toutes les états propres de la base s'annule :

$$\sum_n \mathcal{B}^{(n)}(\lambda) = 0. \quad (3.37)$$

Par ailleurs, l'expression (3.35) manifeste que cette connexion de Berry sera d'autant plus grande que des énergies  $E_m$  seront proches de  $E_n$  au point  $\lambda$  considéré. Ainsi, cette connexion sera dominée par les régions où l'approximation adiabatique de restriction à un état propre donnée sera la plus restrictive sur la vitesse de variation des paramètres.

### 3.4 Exemple : spin dans un champ magnétique

On considère le problème d'un spin interagissant avec un champ magnétique par effet Zeeman. Le Hamiltonien décrivant ce problème est bien dépendant d'un paramètre extérieur, le champ magnétique  $\mathbf{B}$  (correspondant donc à 3 paramètres réels) :

$$H = -\mathbf{B} \cdot \boldsymbol{\mu} = -\mu \mathbf{B} \cdot \mathbf{S} = -(\mu B) \hat{n} \cdot \mathbf{S} \text{ avec } \hat{n} = \mathbf{B}/|\mathbf{B}| \quad (3.38)$$

Lorsque l'orientation  $\hat{n}$  du champ magnétique varie, le problème revient à regarder l'évolution d'un vecteur de spin (dans un espace vectoriel de dimension  $2S + 1$ ) au dessus d'une sphère (les directions du champ magnétique). La base locale des états

de spin correspondant à la direction  $\hat{n}$  est notée  $\{|m, \hat{n}\rangle\}$ ,  $m = -S, \dots, +S$ . Ils satisfont

$$S_{\hat{n}} |m, \hat{n}\rangle = \hbar m |m, \hat{n}\rangle \quad (3.39a)$$

$$S_+ |m, \hat{n}\rangle = \hbar \sqrt{S(S+1) - m(m+1)} |m+1, \hat{n}\rangle \quad (3.39b)$$

$$S_- |m, \hat{n}\rangle = \hbar \sqrt{S(S+1) - m(m-1)} |m-1, \hat{n}\rangle \quad (3.39c)$$

Considérons l'évolution de l'état d'énergie  $E_m = -\mu\hbar Bm$ , noté  $|m, \hat{n}\rangle$ . L'expression (3.36) de la courbure de Berry de la bande  $m$  s'exprime comme

$$\mathcal{B}^{(m)}(\mathbf{B}) = i \sum_{p \neq m} \frac{\langle m, \hat{n} | \nabla_{\mathbf{B}} H | p, \hat{n} \rangle \times \langle p, \hat{n} | \nabla_{\mathbf{B}} H | m, \hat{n} \rangle}{(E_p - E_m)^2}. \quad (3.40)$$

$$= \frac{i}{\hbar^2} \sum_{p \neq m} \frac{\langle m, \hat{n} | \mathbf{S} | p, \hat{n} \rangle \times \langle p, \hat{n} | \mathbf{S} | m, \hat{n} \rangle}{B^2(p-m)^2}. \quad (3.41)$$

Appelons par commodité  $z$  l'axe  $\hat{n}$ , ce qui nous permet de définir les opérateurs de spin dans deux directions orthogonales  $S_x = \frac{1}{2}(S_+ + S_-)$  et  $S_y = \frac{1}{2i}(S_+ - S_-)$ . De (3.39) nous tirons que les seuls éléments de matrices non nuls de ces deux opérateurs sont

$$\begin{aligned} \langle p, \hat{n} | S_x | m, \hat{n} \rangle &= \frac{\hbar}{2} \left( \sqrt{S(S+1) - m(m+1)} \delta_{p,m+1} \right. \\ &\quad \left. + \sqrt{S(S+1) - m(m-1)} \delta_{p,m-1} \right) \end{aligned} \quad (3.42a)$$

$$\begin{aligned} \langle p, \hat{n} | S_y | m, \hat{n} \rangle &= \frac{\hbar}{2i} \left( \sqrt{S(S+1) - m(m+1)} \delta_{p,m+1} \right. \\ &\quad \left. - \sqrt{S(S+1) - m(m-1)} \delta_{p,m-1} \right) \end{aligned} \quad (3.42b)$$

$$\langle p, \hat{n} | S_z | m, \hat{n} \rangle = \hbar m \delta_{m,p} |n, \hat{n}\rangle. \quad (3.42c)$$

La seule composante non nulle de  $\mathcal{B}^{(m)}(\mathbf{B})$  est donc celle selon  $\hat{n}$  (car les éléments de matrice de  $S_{\hat{n}}$  s'annulent entre deux états  $m \neq p$ )

$$\mathcal{B}^{(m)}(\mathbf{B}) = \frac{i}{\hbar^2} \frac{1}{B^2} \sum_{p=m \pm 1} \left[ \langle m, \hat{n} | S_x | p, \hat{n} \rangle \langle p, \hat{n} | S_y | m, \hat{n} \rangle - (y \leftrightarrow x) \right] \hat{n} \quad (3.43)$$

$$= \frac{i}{\hbar} \frac{1}{B^2} \left[ \frac{-\hbar^2}{2i} (S(S+1) - m(m-1)) + \frac{\hbar^2}{2i} (S(S+1) - m(m+1)) \right] \hat{n} \quad (3.44)$$

$$= -\frac{m}{B^2} \hat{n} = -\frac{m}{B^3} \mathbf{B} \quad (3.45)$$

Ce résultat nous rappelle le champ magnétique créé par un monopole magnétique (2.24), correspondant à une charge  $q_m = -4\pi m$ . Ce monopole existe ici dans l'espace des paramètres et non plus dans l'espace réel. De plus, il correspond à la situation  $B = 0$ , c'est-à-dire au point de croisement entre les différents états  $E_m(\mathbf{B})$ . Sa charge est additive : elle est directement proportionnelle au nombre de bandes qui se croisent.

Ce point est exclu par définition du transport adiabatique qui suppose des états non dégénérés : le transport des vecteurs doit se faire en dehors de cet origine de l'espace des paramètres. Nous rencontrons ici le premier exemple d'une situation générale dans laquelle les croisements de niveaux correspondent aux sources de courbure de Berry. Nous trouvons de même que  $\mathcal{B}^{(-)}(\mathbf{B}) = -\mathcal{B}^{(+)}(\mathbf{B}) = +(\hbar/(2B^2))\hat{n}$  pour la bande  $E_-(\mathbf{B})$ .

Poursuivons notre analyse de la phase de Berry : lors d'une évolution périodique le long d'une courbe  $C = \partial\mathcal{S}$  dans l'espace des champs magnétiques, la phase géométrique acquise par les états de spin est donc

$$\phi_{\partial\mathcal{S}}^{(m)} = \frac{1}{\hbar} \int_{\mathcal{S}} d\mathbf{B} \mathcal{B}^{(m)}(\mathbf{B}) = - \int_{\mathcal{S}} \frac{1}{B^2} \hat{n} d\mathbf{B} \quad (3.46)$$

qui correspond à  $m$  fois l'angle solide vu de l'origine de la surface  $\mathcal{S}$ . En particulier nous retrouvons un résultat connu : pour une rotation de  $2\pi$  du champ magnétique, correspondant à une trajectoire le long de l'équateur de la sphère de rayon  $B$ , l'angle solide vaut  $2\pi$ , et la phase acquise par les états de spin est de  $m2\pi$ , soit une multiple entier ou demi-entier de  $2\pi$ . Tourner un spin demi-entier entraîne un changement de la phase de l'état correspondant, ce que nous venons d'interpréter comme une phase de Berry.

### 3.5 Transport parallèle de vecteur dans un fibré

On considère une courbe sur la sphère décrite par les vecteurs  $\mathbf{r}(t)$  reliant l'origine à un point d'une sphère, ainsi que les vecteurs  $\mathbf{u}, \mathbf{v}$  du plan tangent, tel que  $\{\mathbf{r}(t), \mathbf{u}(t), \mathbf{v}(t)\}$  est un trièdre direct. Ce problème peut être vu comme l'évolution dans un fibré vectoriel constitué de

- la sphère comme espace de base, paramétré par le vecteur  $\mathbf{r}$ ,
  - pour tout point  $\mathbf{r}$  du plan tangent auquel appartiennent les deux vecteurs  $\mathbf{u}, \mathbf{v}$ .
- Considérons une variation  $\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r} + d\mathbf{r}$  du vecteur de base, le trièdre  $\{\mathbf{r}, \mathbf{u}, \mathbf{v}\}$  tourne suivant le vecteur de rotation  $\boldsymbol{\Omega}$  tel que

$$d\mathbf{r} = \boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{r} \quad ; \quad d\mathbf{u} = \boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{u} \quad ; \quad d\mathbf{v} = \boldsymbol{\Omega} \times \mathbf{v}. \quad (3.47)$$

La condition de transport parallèle naturel revient à imposer que les vecteurs  $\{\mathbf{u}, \mathbf{v}\}$  ne tournent pas dans le plan tangent durant la variation de  $\mathbf{r}$ , c'est-à-dire que le trièdre  $\{\mathbf{r}, \mathbf{u}, \mathbf{v}\}$  ne tourne pas autour de l'axe  $\mathbf{r}$ . c'est-à-dire

$$d\mathbf{u} \cdot \mathbf{v} = d\mathbf{v} \cdot \mathbf{u} = 0 \Leftrightarrow \boldsymbol{\Omega} \cdot \mathbf{r} = 0. \quad (3.48)$$

Dérivons maintenant cette condition de transport parallèle sous une forme plus proche de celle rencontrée pour la phase de Berry. A partir des deux vecteurs réels il est possible de définir un vecteur complexe équivalent  $\Psi = \mathbf{u} + i\mathbf{v}$ . La condition de transport parallèle (3.48) se traduit en la relation

$$\overline{\Psi} \cdot d\Psi = (\mathbf{u} - i\mathbf{v})(d\mathbf{u} + i d\mathbf{v}) = (\mathbf{u} d\mathbf{u} + \mathbf{v} d\mathbf{v}) + i(\mathbf{u} d\mathbf{v} - \mathbf{v} d\mathbf{u}) = 0 \quad (3.49)$$

$$\Rightarrow \mathbf{u} d\mathbf{v} - \mathbf{v} d\mathbf{u} = 0 \quad (3.50)$$

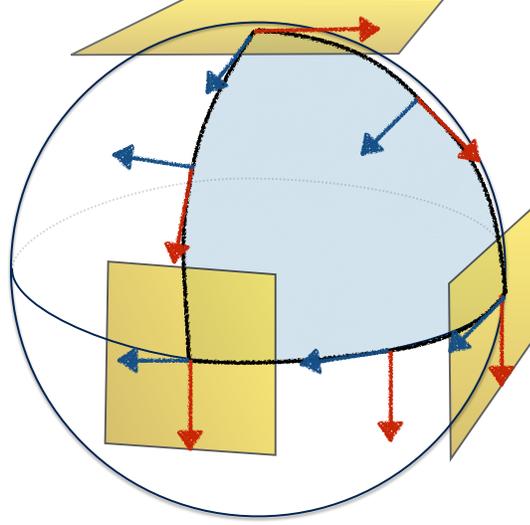


FIGURE 3.2 – Transport parallèle de vecteurs tangents à la surface de la sphère.

où nous avons utilisé  $\mathbf{u} \cdot \mathbf{u} = 1 \Rightarrow \mathbf{u} \, d\mathbf{u} = 0$ . De façon analogue au cas du transport d'état propre d'un Hamiltonien, nous décomposons  $\Psi$  dans une base de vecteurs propres continus du plan tangent. Il est suffisant, comme pour le monopole magnétique, que cette base de vecteurs propres soit continue par morceaux. Un choix naturel sur la sphère est donné par les deux vecteurs  $\hat{e}_\theta, \hat{e}_\phi$  définis en coordonnées cartésiennes par

$$\hat{e}_r = (\sin \theta \cos \phi, \sin \theta \sin \phi, \cos \theta) \quad ; \quad (3.51)$$

$$\hat{e}_\phi = (-\sin \phi, \cos \phi, 0) \quad ; \quad \hat{e}_\theta = (-\cos \theta \cos \phi, -\cos \theta \sin \phi, \sin \theta). \quad (3.52)$$

En définissant le vecteur complexe  $\mathbf{e} = (\hat{e}_\theta + i\hat{e}_\phi)/\sqrt{2}$ , nous décomposons en tout point  $\mathbf{r}$  de la sphère le vecteur tangent  $\Psi$  sur cette base :  $\Psi = \exp(-i\alpha)\mathbf{e}$  à l'aide de l'angle  $\alpha$  entre les deux bases :

$$\begin{pmatrix} \mathbf{u} \\ \mathbf{v} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \alpha & \sin \alpha \\ -\sin \alpha & \cos \alpha \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \hat{e}_\theta \\ \hat{e}_\phi \end{pmatrix} \Leftrightarrow \Psi = e^{-i\alpha}\mathbf{e} \quad (3.53)$$

La condition de transport parallèle s'écrit alors

$$\bar{\Psi} \cdot d\Psi = e^{i\alpha} \bar{\mathbf{e}} \cdot (e^{-i\alpha} d\mathbf{e} - i d\alpha e^{-i\alpha} \mathbf{e}) = \bar{\mathbf{e}} \cdot d\mathbf{e} - i d\alpha = 0 \quad (3.54)$$

$$\Rightarrow d\alpha = \frac{1}{i} \bar{\mathbf{e}} \cdot d\mathbf{e} \quad (3.55)$$

where we used  $\bar{\mathbf{e}} \cdot \mathbf{e} = 1$ . Cette expression est bien indépendante du choix de la base initiale  $\mathbf{e}$  : un choix différent se déduit par une rotation  $\mathbf{e} \rightarrow \mathbf{e}' = \mathbf{e} \exp(i\phi(\mathbf{r}))$  qui laisse bien invariant  $d\alpha$ .

La rotation  $\Psi_f = \exp(-i\alpha(C)) \Psi_i$  des vecteurs  $\mathbf{u}, \mathbf{v}$  lors de l'évolution de  $\mathbf{r}$  le long d'un chemin fermé  $C = \partial\mathcal{S}$ , appelée holonomie, s'exprime donc selon

$$\alpha(C) = \oint_C d\alpha = \frac{1}{i} \oint_C \bar{\mathbf{e}} \cdot d\mathbf{e} = \frac{1}{i} \int_S d\bar{\mathbf{e}} \wedge d\mathbf{e} \quad (3.56)$$

où la quantité  $\frac{1}{i} d\bar{\mathbf{e}} \wedge d\mathbf{e}$  joue ici un rôle analogue à la courbure de Berry. En utilisant les coordonnées  $\theta, \phi$  pour le point de la sphère  $\mathbf{r}$ , nous obtenons

$$d\bar{\mathbf{e}} \wedge d\mathbf{e} = (\partial_\theta \bar{\mathbf{e}} d\theta + \partial_\phi \bar{\mathbf{e}} d\phi) \wedge (\partial_\theta \mathbf{e} d\theta + \partial_\phi \mathbf{e} d\phi) \quad (3.57)$$

$$= (\partial_\theta \bar{\mathbf{e}} \partial_\phi \mathbf{e} - \partial_\phi \bar{\mathbf{e}} \partial_\theta \mathbf{e}) d\theta \wedge d\phi \quad (3.58)$$

$$= i (\partial_\theta \hat{e}_\theta \partial_\phi \hat{e}_\phi - \partial_\theta \hat{e}_\phi \partial_\phi \hat{e}_\theta) d\theta \wedge d\phi \quad (3.59)$$

$$= i \sin \theta d\theta \wedge d\phi \quad (3.60)$$

où nous avons utilisé les expressions cartésiennes (3.52) de la base pour obtenir l'expression de la dernière ligne. La phase  $\alpha(C)$  (3.56) se trouve ainsi correspondre à l'angle solide de la portion de sphère  $\mathcal{S}$  contenue à l'intérieur du chemin  $C$  parcouru. Pour la situation représenté sur la figure 3.2, on trouve ainsi une rotation de  $\frac{1}{8} \times 4\pi = \pi/2$  des vecteurs lors de ce transport parallèle. L'analyse précédente de la rotation des vecteurs permet en particulier de comprendre la rotation du plan d'oscillation du pendule de Foucault lors d'une rotation complète de la terre.

Le parallèle entre la description des vecteurs tangents à la sphère et l'évolution des états propres d'un Hamiltonien dépendant du temps est frappant. En particulier, nous pouvons esquisser la correspondance suivante

position  $\mathbf{r} \leftrightarrow$  paramètre  $\lambda$

$\Psi(\mathbf{r}) \leftrightarrow |\psi_n(\lambda)\rangle$

transport parallèle :  $\bar{\Psi} \cdot d\Psi = 0 \leftrightarrow \langle \psi_n | \nabla_\lambda \psi_n \rangle = 0$

holonomie : angle  $\alpha(C) \leftrightarrow$  phase géométrique  $\langle \psi_n^{(i)} | \psi_n^{(f)} \rangle = e^{i\phi_{\text{geom}}}$

Parler de géodésiques, et du pendule de Foucault

## 3.6 Phase géométrique dans les cristaux

### 3.6.1 Définition générale

Dans le contexte de la théorie des bandes nous nous intéressons à un ensemble d'états propres sous la forme  $\psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}$  (voir l'éq. (1.1)), indicé par un nombre quantique : le quasi-moment  $\mathbf{k}$  défini sur la première zone de Brillouin qui

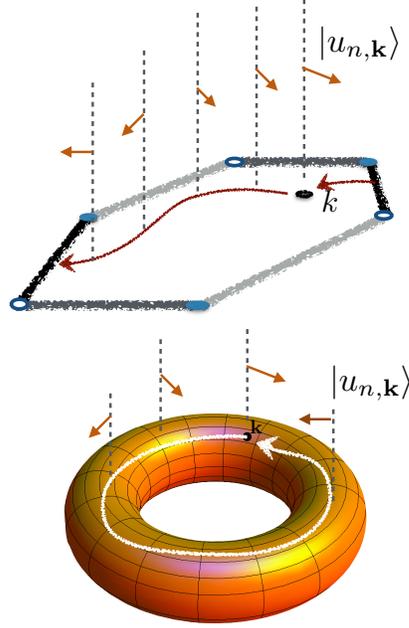


FIGURE 3.3 – Illustration du transport parallèle d'états propres de Bloch au dessus de la zone de Brillouin.

est un tore. Les fonctions de Bloch  $u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  peuvent être considérées comme les états propres d'un Hamiltonien de Bloch dépendant de  $\mathbf{k}$  :

$$\hat{H}(\mathbf{k}) = e^{-i \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} \hat{H} e^{+i \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}. \quad (3.61)$$

Ainsi le problème possède de grandes similitudes avec le problème initialement considéré par M. Berry, si l'on considère  $\mathbf{k}$  comme un paramètre variable extérieur au problème (voir figure 3.3).

Le transport parallèle des fonctions de Bloch au dessus de la zone de Brillouin est associé à la connexion

$$\mathcal{A}^n(\mathbf{k}) = \frac{1}{i} \langle u_{n,\mathbf{k}} | \nabla_{\mathbf{k}} | u_{n,\mathbf{k}} \rangle, \quad (3.62)$$

et une courbure de Berry

$$\mathcal{B}^n(\mathbf{k}) = \frac{1}{i} \langle \nabla_{\mathbf{k}} u_{n,\mathbf{k}} | \times | \nabla_{\mathbf{k}} u_{n,\mathbf{k}} \rangle. \quad (3.63)$$

De même que pour la courbure de Berry d'un Hamiltonien dépendant d'un paramètre extérieur, nous nous attendons à ce que cette courbure ait comme source les points

de croisement de bande. Il est donc naturel d'illustrer son utilisation sur la physique du graphène dans le chapitre suivant.

### 3.6.2 Transport semi-classique et courbure de Berry

Certaines des conséquences physiques de la courbure de Berry en théorie des bandes seront discutées dans les chapitres suivants, notamment dans le contexte de l'effet Hall quantique. Nous illustrons ici son importance dans la physique des électrons dans les cristaux en discutant son lien avec les équations semi-classique du mouvement d'un électron dans un cristal. Ces équations se déduisent de l'évolution d'un paquet d'onde de Bloch. Un tel paquet d'onde, localisé dans l'espace en  $\mathbf{r}_c$  et de quasi-moment  $\mathbf{k}_c$ . Si un tel paquet d'onde est constitué d'états propres appartenant à une bande  $n$ , il s'écrit

$$|\Psi_{n,\mathbf{r}_c,\mathbf{k}_c}\rangle = \int \frac{d^d \mathbf{k}}{(2\pi)^d} f(|\mathbf{k} - \mathbf{k}_c|) e^{-i\frac{e}{\hbar c} \mathbf{A}(\mathbf{r}_c) \cdot \mathbf{r}} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_c} |\psi_{n,\mathbf{k}}\rangle. \quad (3.64)$$

L'enveloppe du paquet d'onde  $f(|\mathbf{k} - \mathbf{k}_c|)$  est une fonction localisée autour de  $\mathbf{k}_c$  et décroissant "rapidement". La normalisation de ce paquet d'onde implique la condition

$$1 = \langle \Psi_{n,\mathbf{r}_c,\mathbf{k}_c} | \Psi_{n,\mathbf{r}_c,\mathbf{k}_c} \rangle \quad (3.65)$$

$$= \int d^d \mathbf{r} \int \frac{d^d \mathbf{k}'}{(2\pi)^d} \bar{f}(|\mathbf{k}' - \mathbf{k}_c|) \int \frac{d^d \mathbf{k}}{(2\pi)^d} f(|\mathbf{k} - \mathbf{k}_c|) \bar{u}_{n,\mathbf{k}'}(\mathbf{r}) u_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) e^{+i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{r}} \quad (3.66)$$

$$= \int \frac{d^d \mathbf{k}'}{(2\pi)^d} \bar{f}(|\mathbf{k}' - \mathbf{k}_c|) \int \frac{d^d \mathbf{k}}{(2\pi)^d} f(|\mathbf{k} - \mathbf{k}_c|) \times \int_{\text{cellule elem.}} d^d \tilde{\mathbf{r}} \sum_{\mathbf{R}_n} \bar{u}_{n,\mathbf{k}'}(\tilde{\mathbf{r}} + \mathbf{R}_n) u_{n,\mathbf{k}}(\tilde{\mathbf{r}} + \mathbf{R}_n) e^{+i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \tilde{\mathbf{r}}} e^{+i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{R}_n} \quad (3.67)$$

$$= \int \frac{d^d \mathbf{k}'}{(2\pi)^d} \bar{f}(|\mathbf{k}' - \mathbf{k}_c|) \int \frac{d^d \mathbf{k}}{(2\pi)^d} f(|\mathbf{k} - \mathbf{k}_c|) \times \int_{\text{cellule elem.}} d^d \tilde{\mathbf{r}} \bar{u}_{n,\mathbf{k}'}(\tilde{\mathbf{r}}) u_{n,\mathbf{k}}(\tilde{\mathbf{r}}) e^{+i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \tilde{\mathbf{r}}} \sum_{\mathbf{R}_n} e^{+i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{R}_n} \quad (3.68)$$

En utilisant l'égalité

$$\sum_{\mathbf{R}_n} e^{+i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{R}_n} = \frac{(2\pi)^d}{v_{\text{cell.}}} \sum_{\mathbf{K}_m} \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}' - \mathbf{K}_m), \quad (3.69)$$

où les  $\mathbf{K}_m$  sont les vecteurs du réseau réciproque et  $v_{\text{cell.}}$  le volume de la cellule élémentaire du réseau, nous en déduisons que le seul vecteur du réseau réciproque possible est  $\mathbf{K} = \mathbf{0}$  puisque  $\mathbf{k}$  et  $\mathbf{k}'$  appartiennent tous deux à la première zone de Brillouin, le seul vecteur du réseau réciproque possible est  $\mathbf{K} = \mathbf{0}$ . L'égalité (3.68) se réécrit

$$1 = v_{\text{cell.}}^{-1} \int \frac{d^d \mathbf{k}}{(2\pi)^d} [f(|\mathbf{k} - \mathbf{k}_c|)]^2 \langle u_{n,\mathbf{k}} | u_{n,\mathbf{k}} \rangle \quad (3.70)$$

Si nos états de Bloch sont normalisés selon  $\langle u_{n,\mathbf{k}} | u_{n,\mathbf{k}} \rangle = 1$ , nous en déduisons la condition de normalisation des paquets d'onde

$$1 = v_{\text{cell.}}^{-1} \int \frac{d^d \mathbf{k}}{(2\pi)^d} [f(|\mathbf{k} - \mathbf{k}_c|)]^2 \quad (3.71)$$

Nous imposons ensuite à ce paquet d'onde d'être localisé en  $\mathbf{r}_c$ , c'est-à-dire

$$\langle \Psi_{\mathbf{r}_c, \mathbf{k}_c} | \hat{\mathbf{r}} | \Psi_{\mathbf{r}_c, \mathbf{k}_c} \rangle = \mathbf{r}_c \quad (3.72)$$

soit

$$\langle \Psi_{\mathbf{r}_c, \mathbf{k}_c} | \hat{\mathbf{r}} - \mathbf{r}_c | \Psi_{\mathbf{r}_c, \mathbf{k}_c} \rangle = \int d^d \mathbf{r} \int \frac{d^2 \mathbf{k}'}{(2\pi)^2} \bar{f}(|\mathbf{k}' - \mathbf{k}_c|) \int \frac{d^2 \mathbf{k}}{(2\pi)^2} f(|\mathbf{k} - \mathbf{k}_c|) \bar{u}_{n, \mathbf{k}'}(\mathbf{r}) u_{n, \mathbf{k}}(\mathbf{r}) (-i \nabla_{\mathbf{k}}) e^{+i(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}_c)} \quad (3.73)$$

Après une intégration par partie, nous obtenons

$$\langle \Psi_{\mathbf{r}_c, \mathbf{k}_c} | \hat{\mathbf{r}} - \mathbf{r}_c | \Psi_{\mathbf{r}_c, \mathbf{k}_c} \rangle = \int d^d \mathbf{r} \int \frac{d^2 \mathbf{k}'}{(2\pi)^2} \bar{f}(|\mathbf{k}' - \mathbf{k}_c|) \int \frac{d^2 \mathbf{k}}{(2\pi)^2} \bar{u}_{n, \mathbf{k}'}(\mathbf{r}) e^{+i(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}_c)} (i \nabla_{\mathbf{k}}) (u_{n, \mathbf{k}}(\mathbf{r}) f(|\mathbf{k} - \mathbf{k}_c|)). \quad (3.74)$$

Nous procédons de façon similaire à l'évaluation de la normale du paquet d'ondes pour obtenir

$$\langle \Psi_{\mathbf{r}_c, \mathbf{k}_c} | \hat{\mathbf{r}} - \mathbf{r}_c | \Psi_{\mathbf{r}_c, \mathbf{k}_c} \rangle = v_{\text{cell.}}^{-1} \int_{\text{cellule elem.}} d^d \mathbf{r} \int \frac{d^2 \mathbf{k}}{(2\pi)^2} |f(|\mathbf{k} - \mathbf{k}_c|)|^2 f^{-1}(|\mathbf{k} - \mathbf{k}_c|) \bar{u}_{n, \mathbf{k}}(\tilde{\mathbf{r}}) (i \nabla_{\mathbf{k}}) (u_{n, \mathbf{k}}(\tilde{\mathbf{r}}) f(|\mathbf{k} - \mathbf{k}_c|)). \quad (3.75)$$

En utilisant la localisation de la fonction  $f(|\mathbf{k} - \mathbf{k}_c|)$  sur une région étroite autour de  $\mathbf{k}_c$ , nous en tirons

$$\begin{aligned} \langle \Psi_{\mathbf{r}_c, \mathbf{k}_c} | \hat{\mathbf{r}} - \mathbf{r}_c | \Psi_{\mathbf{r}_c, \mathbf{k}_c} \rangle &= \int_{\text{cellule elem.}} d^d \mathbf{r} \bar{u}_{n, \mathbf{k}}(\tilde{\mathbf{r}}) (i \nabla_{\mathbf{k}}) u_{n, \mathbf{k}}(\tilde{\mathbf{r}}) + (i \nabla_{\mathbf{k}})|_{\mathbf{k}=\mathbf{k}_c} \ln f(|\mathbf{k} - \mathbf{k}_c|) \quad (3.76) \\ &= \langle u_{n, \mathbf{k}} | (i \nabla_{\mathbf{k}}) | u_{n, \mathbf{k}} \rangle + (i \nabla_{\mathbf{k}})|_{\mathbf{k}=\mathbf{k}_c} \ln f(|\mathbf{k} - \mathbf{k}_c|) \quad (3.77) \\ &= \mathcal{A}^{(n)}(\mathbf{k}) + (i \nabla_{\mathbf{k}})|_{\mathbf{k}=\mathbf{k}_c} \ln f(|\mathbf{k} - \mathbf{k}_c|). \quad (3.78) \end{aligned}$$

La phase de l'enveloppe du paquet d'onde dépend donc linéairement de la connexion de Berry :

$$|\Psi_{n, \mathbf{r}_c, \mathbf{k}_c}\rangle = \int \frac{d^2 \mathbf{k}}{(2\pi)^2} |f(|\mathbf{k} - \mathbf{k}_c|)| e^{-i \frac{\mathcal{A}}{\hbar}(\mathbf{r}_c, \mathbf{r})} e^{i \mathcal{A}_{\mathbf{k}_c}^{(n)} \cdot (\mathbf{k} - \mathbf{k}_c)} e^{-i \mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_c} |\psi_{n, \mathbf{k}}\rangle. \quad (3.79)$$

La dérivation des équations du mouvement qui découle de cette forme de paquet d'onde est assez fastidieuse et longue. Nous ne donnerons ici que le résultat final

$$\hbar \frac{d\mathbf{k}_c}{dt} = -e\mathbf{E} - e \frac{d\mathbf{r}_c}{dt} \wedge \mathbf{B} \quad (3.80)$$

$$\frac{d\mathbf{r}_c}{dt} = \frac{1}{\hbar} \mathbf{v}_{\mathbf{k} \in \mathbf{n}, \mathbf{k}} - \frac{d\mathbf{k}_c}{dt} \wedge \mathcal{B}^n(\mathbf{k}). \quad (3.81)$$

Ce résultat fait apparaître une symétrie remarquable entre la force de Lorentz proportionnel au champ magnétique, et un terme de dérive de la position de la particule dépendant de la courbure de Berry. Ces équations ont été le point de départ d'une dérivation de contributions anormales à la conductivité de Hall dans différents contextes.

**Dériver les équations du mouvement...**



# Chapitre 4

## Le graphène

### 4.1 Liaisons $sp^2$

La Carbone  $^{12}\text{C}$  possède 2 électrons dans des orbitales  $1s^2$ , et 4 électrons dans les orbitales  $2s^2 2p^2$ . Le premier état excité correspond donc à un état excité d'énergie  $4.2\text{eV}$  correspondant au passage d'un électron de l'orbitale  $2s$  à l'orbitale  $2p$ . La liaison Carbone-Carbone donne lieu à un gain en énergie de l'ordre de  $4\text{eV}$  par délocalisation entre les deux atomes. Ce gain est comparable avec l'énergie du premier état excité, et il convient donc d'inclure les orbitales  $s, p_x, p_y, p_z$  dans une recherche des fonctions d'onde électroniques dans une liaison Carbone-Carbone. On obtient ainsi des liaisons dites  $sp^3$  correspondant aux 4 orbitales qui sont localisés le long des arêtes d'un tétraèdre. Les atomes de Carbone répartis suivant cette géométrie des liens constituent le cristal du Carbone.

Récemment, une autre famille de composés carbonés a attiré l'attention des physiciens, constitués de d'atomes avec des liaisons de type  $sp^2$  : les nanotubes, le graphène, les fullérènes (ainsi que la molécule de Benzène). Dans ces composés, seuls 3 des électrons des couches  $2s, 2p$  participent aux liaisons chimiques. Le troisième restant "spectateur". C'est cette propriété qui autorise un comportement métallique de certains de ces composés, donc le graphène. Les orbitales des liaisons chimiques déterminées à partir des orbitales  $s, p_x, p_y$  et la minimisation de l'énergie d'interaction entre deux atomes donnent les trois orbitales  $sp^2$  :

$$\frac{1}{\sqrt{3}} |s\rangle + \sqrt{\frac{2}{3}} |p_x\rangle, \quad \frac{1}{\sqrt{3}} |s\rangle - \frac{1}{\sqrt{6}} |p_x\rangle \pm \frac{1}{\sqrt{2}} |p_y\rangle, \quad (4.1)$$

qui sont trois orbitales dans le plan  $x, y$  et réparties à  $2\pi/3$  l'une de l'autre. La répartition des atomes de Carbone suivant cette géométrie donne une feuille de graphène représentée sur la figure 4.1. Ce graphène apparaît naturellement sous la forme d'empilements de plans parallèles interagissant faiblement par interaction de Van der Waals qui constituent le graphite.

## 4.2 Réseau de Bravais et réseau réciproque

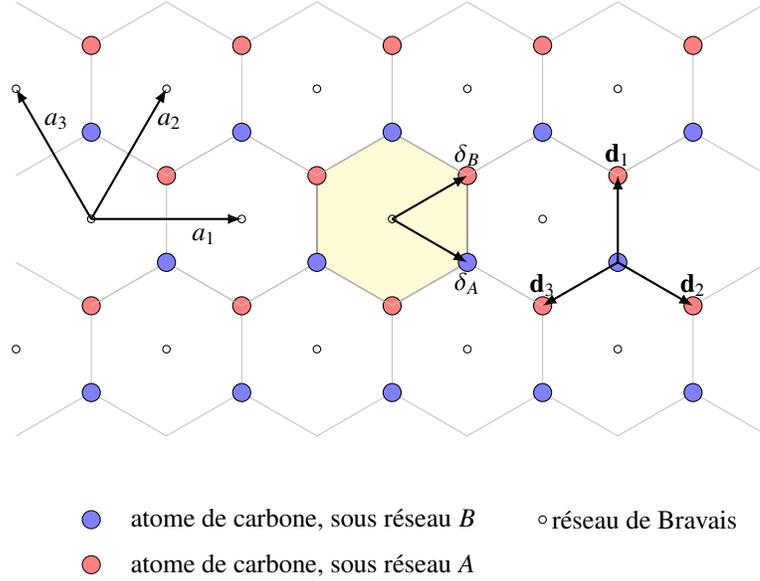


FIGURE 4.1 – Vecteurs primitifs, maille élémentaire et cellule de Wigner-Seitz du graphène.

Le cristal "nid d'abeilles" correspondant à la répartition des atomes de Carbone dans le graphène n'est pas un réseau de Bravais : les translations reliant les sites rouges aux sites bleus dans la figure 4.1 ne laissent pas le cristal invariant. Seuls les translations reliant les sites bleus les uns aux autres (ou de façon équivalente les sites rouges entre eux) laissent le cristal invariant. Elles correspondent donc au cristal de Bravais. Le cristal initial peut être retrouvé par les translations de Bravais d'un motif à deux atomes : un rouge et un bleu, ce qui correspond à une cellule élémentaire à deux atomes, représentée sur la figure 4.1, ou de façon équivalente à l'existence de deux sous-réseaux appelés *A* et *B*. Un modèle défini à partir d'une seule orbitale par atome possèdera donc deux bandes d'énergie (dégénérées de spin) en conséquence de l'existence de ces deux sous-réseaux. Le réseau de Bravais est un réseau triangulaire. Les coordonnées des vecteurs le définissant sont alors données par les  $\mathbf{R}_{m,n} = m\mathbf{a}_1 + n\mathbf{a}_2$  où  $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2$  sont deux vecteurs de base du réseau de Bravais donnés par

$$\mathbf{a}_1 = a\hat{\mathbf{e}}_x \quad \text{et} \quad \mathbf{a}_2 = \frac{a}{2}\hat{\mathbf{e}}_x + \frac{\sqrt{3}a}{2}\hat{\mathbf{e}}_y, \quad (4.2)$$

où  $a$  est le pas du réseau, défini en fonction de la distance entre atomes de Carbone voisins par  $a = \sqrt{3}d_{C-C}$  (déduit par exemple de  $|\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2| = 3d_{C-C}$ ).

Si les vecteurs qui constituent le réseau de Bravais sont définis sans ambiguïté, il n'en va pas de même du choix d'origine, arbitraire. Nous choisissons ici comme

origine le centre de la cellule de Wigner-Seitz, correspondant aux hexagones. Les atomes de Carbone du graphène ont donc pour coordonnée  $\mathbf{R}_{n,m} + \delta_A$  et  $\mathbf{R}_{n,m} + \delta_B$  où  $\delta_{A/B}$  sont les deux vecteurs qui relient l'origine de la cellule élémentaire à ses deux atomes  $A$  et  $B$ . Avec notre choix d'origine, ces deux vecteurs sont définis par (voir la figure 4.1) :

$$\delta_1 = \frac{1}{3}(\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2) \quad ; \quad \delta_2 = \frac{1}{3}(2\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2). \quad (4.3)$$

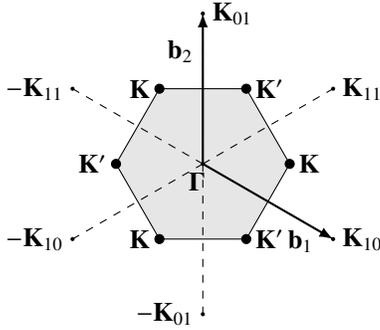


FIGURE 4.2 – On note  $\mathbf{K}_{hk} = h\mathbf{b}_1 + k\mathbf{b}_2$  les vecteurs du réseau réciproque. La première zone de Brillouin est représentée en grisé. Elle est obtenue en traçant les médianes des segments joignant l'origine  $\Gamma$  à ses plus proches voisins.

Le réseau réciproque est défini comme l'ensemble des vecteurs (ici bidimensionnels)  $\mathbf{K}_{h,k}$  qui satisfont la condition

$$\mathbf{K}_{h,k} \cdot \mathbf{R}_{m,n} \in 2\pi\mathbb{Z} \quad \forall m, n \in \mathbb{Z}. \quad (4.4)$$

Cette condition définit un réseau de vecteurs  $\mathbf{K}_{h,k} = h\mathbf{b}_1 + k\mathbf{b}_2$  où les vecteurs de base satisfont  $\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{b}_j = 2\pi\delta_{ij}$  et sont donc définis par

$$\mathbf{b}_1 = b \left( \cos \frac{\pi}{6} \hat{\mathbf{x}} - \sin \frac{\pi}{6} \hat{\mathbf{y}} \right) = b \left( \frac{\sqrt{3}}{2} \hat{\mathbf{x}} - \frac{1}{2} \hat{\mathbf{y}} \right) \quad ; \quad \mathbf{b}_2 = b\hat{\mathbf{y}} \quad ; \quad b = \frac{4\pi}{a\sqrt{3}} \quad (4.5)$$

Le réseau réciproque est également un réseau triangulaire, tourné de  $\pi/6$  par rapport au réseau de Bravais, et de pas  $b$ . Sa cellule de Wigner-Seitz, appelée première zone de Brillouin est représentée sur la figure 4.2. Les sommets du bord de cette zone de Brillouin sont au nombre de deux (les 4 autres sont reliés par des translations du réseau réciproque) :  $\mathbf{K}$  et  $\mathbf{K}'$  de coordonnées. Le point  $\mathbf{K}$  satisfait  $b/|\mathbf{K}| = 2 \cos(\pi/6) = \sqrt{3}$ , ce qui nous permet de déterminer les expressions de ces deux points qui joueront un rôle particulier dans la suite :

$$\mathbf{K} = \frac{b}{\sqrt{3}} \hat{\mathbf{e}}_x = \frac{1}{3} (2\mathbf{b}_1 + \mathbf{b}_2) \quad ; \quad \mathbf{K}' = -\mathbf{K}. \quad (4.6)$$

### 4.3 Approche de liaisons fortes

Dans une approche de basse énergie, nous nous focalisons sur les états électroniques les plus délocalisés dans le cristal. Les électrons de plus basse énergie

sont soit liés fortement aux noyaux atomiques, soit comme dans le cas du graphène participent aux liaisons chimiques et sont donc fortement localisés autour de ces liens. Dans le cas du graphène, d'après la discussion précédente des liaisons  $sp^2$  il reste un électron dans une orbitale  $p_z$  où  $z$  est la direction normale au plan de Carbone. Le Hamiltonien (à 1 corps) décrivant le comportement de ces électrons dans le cristal de graphène s'écrit donc

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + \sum_{m,n} \left( V^{(A)}(\hat{\mathbf{r}} - \mathbf{R}_{m,n} - \delta_A) + V^{(B)}(\hat{\mathbf{r}} - \mathbf{R}_{m,n} - \delta_B) \right). \quad (4.7)$$

où  $V(\hat{\mathbf{r}} - \mathbf{r}_n)$  décrit le potentiel d'interaction induit par le noyaux atomique et les électrons des orbitales  $sp^2$  situé en  $\mathbf{r}_n$ .

Dans une approche de liaisons fortes, nous recherchons les fonctions propres sous la forme de combinaisons linéaires des orbitales atomiques. Nous considérons ici une seule orbitale  $p_z$  par atome. Cette orbitale est dégénérée de spin, mais aucune interaction ne dépendant du spin nous considérerons dans un premier temps la structure de bande dégénérée de spin dans un modèle parfois appelé de particule sans spin. Nous utilisons la notation  $|\mathbf{R}_{m,n}, A/B\rangle$  pour désigner l'état propre correspondant à l'orbitale  $p_z$  au point  $\mathbf{R}_{m,n} + \delta_{A/B}$  du cristal. Par définition, cet état est un état propre du Hamiltonien atomique

$$\hat{H}_{(m,n),A} |\mathbf{R}_{m,n}, A\rangle = \left( \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V^{(A)}(\hat{\mathbf{r}} - \mathbf{R}_{m,n} - \delta_A) \right) |\mathbf{R}_{m,n}, A\rangle = \epsilon^{(0)} |\mathbf{R}_{m,n}, A\rangle \quad (4.8)$$

$$\hat{H}_{(m,n),B} |\mathbf{R}_{m,n}, B\rangle = \left( \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V^{(B)}(\hat{\mathbf{r}} - \mathbf{R}_{m,n} - \delta_B) \right) |\mathbf{R}_{m,n}, B\rangle = \epsilon^{(0)} |\mathbf{R}_{m,n}, B\rangle, \quad (4.9)$$

où les deux énergies atomiques aux sites  $A$  et  $B$  sont identiques, les Hamiltoniens étant reliés l'un à l'autre par rotation de  $2\pi/3$ . Vu que nous considérons un modèle avec deux orbitales dans la cellule élémentaire, le nombre de bandes est 2, indicées par  $n = \pm$ . Nous recherchons les états propres du Hamiltonien (4.7) sous la forme de combinaisons linéaires des orbitales atomiques  $|\mathbf{R}_{m,n}, A/B\rangle$ . Ces orbitales doivent également être états propres des opérateurs de translations par des vecteurs  $\mathbf{R}_{n,m}$  du réseau de Bravais, ce qui nous impose la forme générale suivante

$$|\psi_{n,\mathbf{k}}\rangle = a_{n,\mathbf{k}} |\psi_{\mathbf{k}}^{(A)}\rangle + b_{n,\mathbf{k}} |\psi_{\mathbf{k}}^{(B)}\rangle, \quad (4.10)$$

où

$$|\psi_{\mathbf{k}}^{(A)}\rangle = \sum_{m,n} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_{m,n}} |\mathbf{R}_{m,n}, A\rangle \quad ; \quad |\psi_{\mathbf{k}}^{(B)}\rangle = \sum_{m,n} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_{m,n}} |\mathbf{R}_{m,n}, B\rangle. \quad (4.11)$$

On vérifie que

$$\hat{T}_{\mathbf{R}_{p,q}} \psi_{\mathbf{k}}^{(A/B)}(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} + \mathbf{R}_{p,q} | \psi_{\mathbf{k}}^{(A/B)} \rangle = \sum_{m,n} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_{m,n}} \langle \mathbf{r} + \mathbf{R}_{p,q} | \mathbf{R}_{m,n}, A/B \rangle \quad (4.12)$$

$$= \sum_{m,n} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_{m,n}} \langle \mathbf{r} | \mathbf{R}_{m,n} - \mathbf{R}_{p,q}, A/B \rangle \quad (4.13)$$

$$= e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_{p,q}} \psi_{\mathbf{k}}^{(A/B)}(\mathbf{r}). \quad (4.14)$$

Ainsi,  $\psi_{\mathbf{k}}^{(A)}, \psi_{\mathbf{k}}^{(B)}$  et donc les combinaisons linéaires (4.10)  $\psi_{n,\mathbf{k}}$  sont bien états propres des translations  $\hat{T}_{\mathbf{R}}$  associées à la même valeur propre, et donc des ondes de Bloch.

Le problème variationnel de minimisation de l'énergie dans l'espace des combinaisons linéaires d'orbitales considérées (4.10) se ramène alors à la résolution de l'équation

$$\langle \psi_{n,\mathbf{k}} | \hat{H} | \psi_{n,\mathbf{k}} \rangle = \epsilon_{n,\mathbf{k}} \langle \psi_{n,\mathbf{k}} | \psi_{n,\mathbf{k}} \rangle. \quad (4.15)$$

En utilisant la décomposition (4.10), cette équation s'écrit sous forme matricielle

$$\begin{pmatrix} \bar{a}_{n,\mathbf{k}} & \bar{b}_{n,\mathbf{k}} \end{pmatrix} \cdot \mathbf{H}_{\mathbf{k}} \cdot \begin{pmatrix} a_{n,\mathbf{k}} \\ b_{n,\mathbf{k}} \end{pmatrix} = \epsilon_{n,\mathbf{k}} \begin{pmatrix} \bar{a}_{n,\mathbf{k}} & \bar{b}_{n,\mathbf{k}} \end{pmatrix} \cdot \mathbf{S}_{\mathbf{k}} \cdot \begin{pmatrix} a_{n,\mathbf{k}} \\ b_{n,\mathbf{k}} \end{pmatrix} \quad (4.16)$$

où la matrice Hamiltonienne s'écrit

$$\mathbf{H}_{\mathbf{k}} = \begin{pmatrix} \langle \psi_{\mathbf{k}}^{(A)} | \hat{H} | \psi_{\mathbf{k}}^{(A)} \rangle & \langle \psi_{\mathbf{k}}^{(A)} | \hat{H} | \psi_{\mathbf{k}}^{(B)} \rangle \\ \langle \psi_{\mathbf{k}}^{(B)} | \hat{H} | \psi_{\mathbf{k}}^{(A)} \rangle & \langle \psi_{\mathbf{k}}^{(B)} | \hat{H} | \psi_{\mathbf{k}}^{(B)} \rangle \end{pmatrix} \quad (4.17)$$

et la matrice des recouvrements entre orbitales

$$\mathbf{S}_{\mathbf{k}} = \begin{pmatrix} \langle \psi_{\mathbf{k}}^{(A)} | \psi_{\mathbf{k}}^{(A)} \rangle & \langle \psi_{\mathbf{k}}^{(A)} | \psi_{\mathbf{k}}^{(B)} \rangle \\ \langle \psi_{\mathbf{k}}^{(B)} | \psi_{\mathbf{k}}^{(A)} \rangle & \langle \psi_{\mathbf{k}}^{(B)} | \psi_{\mathbf{k}}^{(B)} \rangle \end{pmatrix}. \quad (4.18)$$

Considérons un élément de la matrice de recouvrement donné pour  $\alpha, \beta = A/B$  par

$$S_{\mathbf{k}}^{\alpha\beta} = \sum_{m,n} \sum_{p,q} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_{p,q} - \mathbf{R}_{m,n})} \langle \mathbf{R}_{m,n}, \alpha | \mathbf{R}_{p,q}, \beta \rangle \quad (4.19)$$

Une approximation courante (quoique sans doute un peu osée) revient à négliger les recouvrements entre orbitales associés à des sites différents du cristal initial, et considérer que les orbitales constituent une base orthonormée, ce qui fournit une forme simplifiée de cette matrice :

$$\langle \mathbf{R}_{m,n}, \alpha | \mathbf{R}_{p,q}, \beta \rangle = \delta_{m,p} \delta_{n,q} \delta_{\alpha,\beta} \Rightarrow S_{\mathbf{k}}^{\alpha\beta} = N \delta_{\alpha,\beta} \quad (4.20)$$

dans laquelle  $N$  correspond au nombre de cellule élémentaire dans le cristal.

Considérons maintenant les éléments de matrice du Hamiltonien

$$H_{\mathbf{k}}^{\alpha\beta} = \sum_{m,n,p,q} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_{p,q} - \mathbf{R}_{m,n})} \langle \mathbf{R}_{m,n}, \alpha | \hat{H} | \mathbf{R}_{p,q}, \beta \rangle. \quad (4.21)$$

Une notation plus concise et adaptée à la discussion qui suit revient à considérer les sites  $\mathbf{r}_i$  du cristal et la position de la cellule du réseau de Bravais correspondant par  $[\mathbf{r}_i]$ . Avec cette notation, l'expression ci-dessus s'écrit

$$H_{\mathbf{k}}^{\alpha\beta} = \sum_{\mathbf{r}_i \in \{\alpha\}, \mathbf{r}_j \in \{\beta\}} e^{i\mathbf{k} \cdot ([\mathbf{r}_j] - [\mathbf{r}_i])} \langle \mathbf{r}_i | \hat{H} | \mathbf{r}_j \rangle. \quad (4.22)$$

Il est naturel de décomposer le Hamiltonien (4.7) en la partie atomique du site  $\mathbf{r}_j$ , et une partie  $\Delta H_j$  provenant des potentiels induits par les atomes des autres sites :

$$\hat{H} = \hat{H}_j + \Delta H_j \quad \text{avec} \quad \hat{H}_j = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V(\hat{r} - \mathbf{r}_j) \quad \text{et} \quad \Delta H_j = \sum_{\mathbf{r}_k \neq \mathbf{r}_j} V(\hat{r} - \mathbf{r}_k). \quad (4.23)$$

Avec cette décomposition, l'élément de matrice (4.26) se décompose en

$$H_{\mathbf{k}}^{\alpha\beta} = \epsilon^{(0)} S_{\mathbf{k}}^{\alpha\beta} + T_{\mathbf{k}}^{\alpha\beta} \quad (4.24)$$

où la matrice  $T_{\mathbf{k}}$  est appelée matrice des amplitudes de saut. Nous pouvons réécrire ses éléments de matrice sous une forme simplifiée en utilisant la notation  $\mathbf{r}_i$  pour les sites du cristal nid d'abeilles :

$$T_{\mathbf{k}}^{\alpha\beta} = \sum_{\mathbf{r}_i \in \{\alpha\}, \mathbf{r}_j \in \{\beta\}} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i)} \langle \mathbf{r}_i | \Delta H_j | \mathbf{r}_j \rangle. \quad (4.25)$$

En faisant usage des symétries de translation et rotation du cristal initial, nous réalisons que l'élément de matrice qui apparaît dans cette expression ne dépend que de la distance entre atomes  $|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i|$  (et non pas de la distance entre les sites du réseau de Bravais). De plus, cet élément de matrice est une fonction décroissante de la distance : nous pouvons exprimer cette matrice des recouvrement en une série de termes décroissants :

$$T_{\mathbf{k}}^{\alpha\beta} = N \sum_p [T_{\mathbf{k}}^{(p)}]^{\alpha\beta} \quad ; \quad [T_{\mathbf{k}}^{(p)}]^{\alpha\beta} = \sum_{\substack{\mathbf{r}_j \in \{\beta\} \\ p\text{-voisin de } \mathbf{r}_i}} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i)} \langle \mathbf{r}_i | \Delta H_j | \mathbf{r}_j \rangle. \quad (4.26)$$

où  $\mathbf{r}_i \in \{\alpha\}$  est un site choisi aléatoirement dans le réseau  $\alpha$ . Dans la pratique, on se limite souvent aux premiers et seconds voisins. Dans le cas du graphène : les proches voisins d'un site du sous-réseau  $A$  sont sur le sous-réseau  $B$  et vice-versa. Les trois voisins d'un site  $B$  appartiennent soit à la même cellule que lui, soit aux cellules situées en  $-\mathbf{a}_2$  et  $-\mathbf{a}_3 = -\mathbf{a}_2 + \mathbf{a}_1$ . **Faire Schéma.** Nous obtenons ainsi une matrice de plus proches voisins

$$[T_{\mathbf{k}}^{(1)}]^{AB} = \overline{[T_{\mathbf{k}}^{(1)}]^{BA}} (1 + e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_2} + e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_3}) t = \overline{\gamma_{\mathbf{k}}} t \quad (4.27)$$

où l'intégrale d'échange entre plus proches voisins s'écrit

$$t = \langle \mathbf{0} + \delta_A | \Delta V | \mathbf{0} + \delta_B \rangle. \quad (4.28)$$

Nous procédons de même pour les seconds voisins, qui sont sur le même sous-réseau que le site considéré, et distants de  $\pm \mathbf{a}_1, \pm \mathbf{a}_2, \pm(\mathbf{a}_2 - \mathbf{a}_1)$ . La matrice de saut correspondante a comme élément de matrice

$$\begin{aligned} [T_{\mathbf{k}}^{(2)}]^{AA} &= [T_{\mathbf{k}}^{(2)}]^{BB} = (e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_1} + e^{+i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_1} + e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_2} + e^{+i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_2} + e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_3} + e^{+i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_3}) t' \\ &= (|\gamma_{\mathbf{k}}|^2 - 3) t' \end{aligned} \quad (4.29)$$

avec

$$t' = \langle \mathbf{0} + \delta_A | \Delta V | \mathbf{a}_1 + \delta_A \rangle \quad (4.30)$$

De la même façon, nous pouvons décomposer la matrice des recouvrement en fonction de la distance entre les sites porteurs des orbitales :

$$[S_{\mathbf{k}}^{(0)}]^{AA} = [S_{\mathbf{k}}^{(0)}]^{BB} = 1 \quad ; \quad [S_{\mathbf{k}}^{(0)}]^{AB} = [S_{\mathbf{k}}^{(0)}]^{BA} = \overline{\gamma_{\mathbf{k}}} \langle \mathbf{0} + \delta_A | \mathbf{0} + \delta_B \rangle \quad (4.31)$$

Revenons maintenant à notre équation aux valeurs propres (4.18) :

$$\det [T_{\mathbf{k}} + (\epsilon^{(0)} - \epsilon_{n,\mathbf{k}})S_{\mathbf{k}}] = 0 \quad (4.32)$$

*s devrait être diagonale dans cette équation : A VERIFIER.* Dans l'approximation où l'on ne garde que les premiers et seconds voisins, cette équation se réécrit en redéfinissant les énergies  $\tilde{\epsilon}_{n,\mathbf{k}} = \epsilon_{n,\mathbf{k}} - \epsilon^{(0)}$  :

$$\det \begin{pmatrix} (|\gamma_{\mathbf{k}}|^2 - 3)t' - \tilde{\epsilon}_{n,\mathbf{k}} & \overline{\gamma_{\mathbf{k}}}(t - s\tilde{\epsilon}_{n,\mathbf{k}}) \\ \gamma_{\mathbf{k}}(t - s\tilde{\epsilon}_{n,\mathbf{k}}) & (|\gamma_{\mathbf{k}}|^2 - 3)t' - \tilde{\epsilon}_{n,\mathbf{k}} \end{pmatrix} = 0 \quad (4.33)$$

$$\Rightarrow (|\gamma_{\mathbf{k}}|^2 - 3)t' + \epsilon^{(0)} - \epsilon_{n,\mathbf{k}} = -n \overline{\gamma_{\mathbf{k}}}(t - s\tilde{\epsilon}_{n,\mathbf{k}}) \quad (4.34)$$

Au premier ordre en  $s$  et  $t'/t$ , nous trouvons les deux valeurs propres

$$\epsilon_{n,\mathbf{k}} = \epsilon^{(0)} + \frac{(|\gamma_{\mathbf{k}}|^2 - 3)t' + n|\gamma_{\mathbf{k}}|t}{1 + ns|\gamma_{\mathbf{k}}|} \quad (4.35)$$

$$\simeq \epsilon^{(0)} + n|\gamma_{\mathbf{k}}|t - st|\gamma_{\mathbf{k}}|^2 + (|\gamma_{\mathbf{k}}|^2 - 3)t' \quad (4.36)$$

$$\simeq (\epsilon^{(0)} - 3t') + n|\gamma_{\mathbf{k}}|t + |\gamma_{\mathbf{k}}|^2(t' - st) \quad \text{avec } n = \pm 1. \quad (4.37)$$

avec

$$|\gamma_{\mathbf{k}}|^2 = \left(1 + e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_2} + e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_3}\right)\left(1 + e^{+i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_2} + e^{+i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_3}\right) = 3 + 2 \sum_{i=1}^3 \cos \mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_i. \quad (4.38)$$

Le terme constant peut être  $\epsilon^{(0)} - 3t'$  absorbé dans une redéfinition des énergies. Les paramètres  $t$  et  $t' - st$  peuvent être soit évalués par un calcul direct soit de façon plus réaliste identifiés en comparant le spectre de basse énergie ainsi obtenu avec les résultats d'expériences ou d'approche numérique ab-initio. Une telle comparaison donne des valeurs  $t \simeq -3eV$  et  $(t' - st) \simeq 0.1t$ . La relation de dispersion correspondante est représentée sur la figure 4.3. Sur cette figure, nous nous apercevons que les bandes  $\epsilon_{+,\mathbf{k}}$  et  $\epsilon_{-,\mathbf{k}}$  se touchent en exactement 6 points sur les bords de la zone de Brillouin. Cependant, certains de ces points sont reliés par des vecteurs du réseau réciproque : il n'existe que deux points inéquivalents : les points  $\mathbf{K}$  et  $\mathbf{K}'$  définis dans l'équation (4.6). De plus, chaque atome étant associé à un seul électron dans une orbitale  $p_z$ , la dégénérescence de spin implique un demi remplissage de ces bandes : à température nulle le potentiel chimique se trouvera exactement au niveau des points

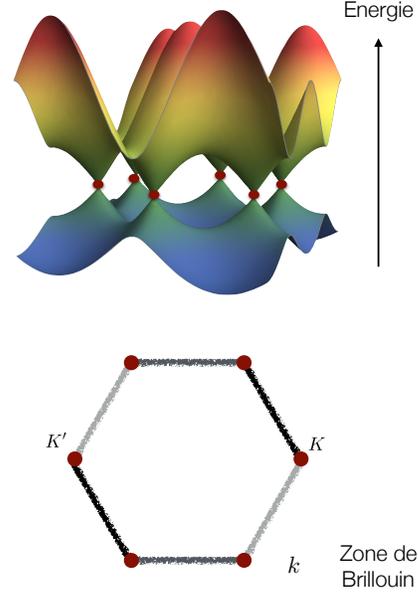


FIGURE 4.3 – Représentation de la relation de dispersion du graphène au dessus de la zone de Brillouin, obtenue dans une approche de liaisons fortes.

de croisement entre les bandes  $\epsilon_{+,k}$  et  $\epsilon_{-,k}$ . Une telle phase est appelée semi-métal : il correspond à la situation extrême pour un métal où la surface de Fermi se ramène à un nombre fini de points. Nous allons maintenant étudier plus en détails la relation de dispersion du graphène autour de ces points de croisement, dans une région qui va déterminer les propriétés électroniques du graphène à basse énergie.

**Remarque 4.1.** Il est utile à ce stade de résumer la description par l'approche des liaisons fortes de la physique de basse énergie du graphène : nous avons réalisé que cette physique pouvait être décrite en ne considérant que les intégrales de saut  $t$  entre plus proches voisins, et en négligeant à la fois les intégrales de recouvrement  $s$  entre plus proches voisins et les intégrales de saut  $t'$  entre second plus proches voisins. Ces approximations reviennent à considérer un Hamiltonien de liaisons fortes

$$\hat{H}^{\text{app}} = \sum_{\langle i,j \rangle} t (|i\rangle\langle j| + |j\rangle\langle i|) \quad ; \quad \langle i|j\rangle = \delta_{i,j} \quad (4.39)$$

où  $\langle i,j \rangle$  correspond à une somme sur les plus proches voisins du cristal de graphène et l'orthonormalisation des états  $|i\rangle$  associés aux sites du cristal vient de l'approximation  $s = 0$ . Ce Hamiltonien est diagonalisé en considérant les états de la forme (4.10). Dans le cadre de nos approximations, cela revient à résoudre le problème aux valeurs propres suivant :

$$H^{\text{app}} \begin{pmatrix} a_{n,\mathbf{k}} \\ b_{n,\mathbf{k}} \end{pmatrix} = \epsilon_{n,\mathbf{k}} \begin{pmatrix} a_{n,\mathbf{k}} \\ b_{n,\mathbf{k}} \end{pmatrix} \quad \text{avec} \quad H^{\text{app}} = t \begin{pmatrix} 0 & \overline{\gamma_{\mathbf{k}}} \\ \gamma_{\mathbf{k}} & 0 \end{pmatrix}. \quad (4.40)$$

Le spectre de cet Hamiltonien est  $\epsilon_{\pm, \mathbf{k}} = \pm |\gamma_{\mathbf{k}}| t$ , ce qui correspond bien à l'approximation de basse énergie du spectre (4.37).

**Remarque 4.2.** Il existe une seconde base naturelle des états de Bloch sur un cristal constitué de deux sous-réseaux. **A FAIRE**

## 4.4 Limite de basse énergie : fermions de Dirac

Les seules régions de la zone de Brillouin où les énergies sont proches l'une de l'autre sont les régions autour de  $\mathbf{K}$  et  $\mathbf{K}'$  : on parle alors de vallées d'énergie. La physique des électrons dans le graphène se déduit du comportement des électrons dans ces vallées. Il est donc commode d'introduire un nouveau nombre quantique, appelée indice de vallée, qui indique si un état électronique correspond à un quasi-moment proche de  $\mathbf{K}$  ou de  $\mathbf{K}'$ . Dans le cas présent avec seulement 2 vallées, ce nombre quantique peut être associé à un spin  $\frac{1}{2}$  fictif, appelé spin de vallée. Commençons par vérifier l'existence de ces deux vallées : de la relation de dispersion (4.37), nous déduisons que la condition  $\epsilon_{+, \mathbf{k}} = \epsilon_{-, \mathbf{k}}$  correspond à

$$\gamma_{\mathbf{k}} = 1 + e^{+i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_2} + e^{+i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_3} = 0. \quad (4.41)$$

Il est aisé de vérifier que les solutions correspondent aux deux vecteurs  $\mathbf{K}$  et  $\mathbf{K}'$  qui satisfont

$$\mathbf{K}\cdot\mathbf{a}_2 = -\mathbf{K}\cdot\mathbf{a}_3 = \frac{2\pi}{3} \quad ; \quad \mathbf{K}'\cdot\mathbf{a}_2 = -\mathbf{K}'\cdot\mathbf{a}_3 = -\frac{2\pi}{3}. \quad (4.42)$$

Un développement de basse énergie, c'est-à-dire autour des points  $\mathbf{K}$  et  $\mathbf{K}'$  revient à développer la fonction  $\gamma_{\mathbf{k}}$  :

$$\gamma_{\mathbf{K}+\mathbf{q}} = 1 + e^{+i\frac{2\pi}{3}} e^{+i\mathbf{q}\cdot\mathbf{a}_2} + e^{-i\frac{2\pi}{3}} e^{+i\mathbf{q}\cdot\mathbf{a}_3} \simeq \mathbf{q} \cdot \left( i e^{+i\frac{2\pi}{3}} \mathbf{a}_2 + i e^{-i\frac{2\pi}{3}} \mathbf{a}_3 \right) \quad (4.43)$$

$$= -\frac{a\sqrt{3}}{2} (q_x + iq_y), \quad (4.44)$$

et de même

$$\gamma_{-\mathbf{K}+\mathbf{q}} = -\frac{a\sqrt{3}}{2} (-q_x + iq_y). \quad (4.45)$$

Ces deux développements nous indiquent que nous pouvons négliger dans le Hamiltonien (4.17) le terme de second voisins, proportionnel à  $|\gamma_{\mathbf{k}}|^2$  et donc d'ordre  $q^2$ . Le développement au premier ordre en  $q$  de ce Hamiltonien s'écrit donc (en choisissant comme origine des énergies le point de croisement des deux bandes) :

$$H_{\mathbf{K}+\mathbf{q}}^{\text{eff}} = \begin{pmatrix} 0 & \overline{\gamma_{\mathbf{k}}} t \\ \gamma_{\mathbf{k}} t & 0 \end{pmatrix} = -\frac{at\sqrt{3}}{2} \begin{pmatrix} 0 & (q_x - iq_y) \\ (q_x + iq_y) & 0 \end{pmatrix} \quad (4.46)$$

$$= \hbar v_F (q_x \sigma_x + q_y \sigma_y), \quad (4.47)$$

où nous avons introduit la grandeur  $v_F = -at\sqrt{3}/(2\hbar)$  homogène à une vitesse (nous rappelons ici que  $t$  est négatif), ainsi que deux des matrices de Pauli  $\sigma_\alpha$ . Le développement similaire à l'autre point de croisement nous conduit au résultat

$$H_{\mathbf{k}^*+\mathbf{q}}^{\text{eff}} = \hbar v_F \begin{pmatrix} 0 & (-q_x - iq_y) \\ (-q_x - iq_y) & 0 \end{pmatrix} = \hbar v_F (-q_x \sigma_x + q_y \sigma_y). \quad (4.48)$$

Notons que ces Hamiltoniens agissent sur des vecteurs d'amplitudes  $a_{\mathbf{k}}, b_{\mathbf{k}}$  des fonctions d'ondes sur les sous réseaux  $A$  et  $B$ , introduits dans l'éq. (4.10). Les deux matrices de Pauli  $\sigma_x$  et  $\sigma_y$  agissent donc également sur ces mêmes vecteurs.

Les deux Hamiltoniens (4.47) et (4.48) correspondent à des Hamiltoniens de Dirac décrivant des particules relativistes sans masse, mais avec une vitesse  $c$  de la lumière remplacée par la vitesse  $v_F \simeq c/300$ . En effet, avec comme objectif de reproduire un spectre relativiste  $E = \sqrt{p^2 c^2 + m^2 c^4}$ , Dirac a introduit un Hamiltonien de la forme

$$\hat{H} = \beta mc^2 + c \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} \quad (4.49)$$

dans lequel  $\beta$  et les  $d$   $\alpha_i$  sont des matrices. Ces matrices sont hermitiennes afin d'assurer que le Hamiltonien (4.49) le soit. Le carré de cet opérateur s'exprime de façon générale selon

$$\hat{H}^2 = \beta^2 m^2 c^4 + c^2 (\boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p})^2 + mc^3 (\beta \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} + \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} \beta). \quad (4.50)$$

Il reproduit le spectre relativiste ci-dessus en imposant les conditions sur les matrices

$$\beta^2 = \mathbb{I} \quad ; \quad \{\alpha_i, \beta\} = 0 \quad ; \quad \{\alpha_i, \alpha_j\} = 2\delta_{ij} \quad \forall i, j = 1, \dots, d. \quad (4.51)$$

Ces conditions définissent une algèbre de Clifford. Elles imposent en particulier une relation entre la taille  $N$  des matrices  $\alpha_i, \beta$  et la dimension, c'est-à-dire le nombre de matrice  $\alpha_i$ . En particulier, la relation  $\det(\alpha_i \alpha_j) = (-1)^N \det(\alpha_j \alpha_i)$  implique que la taille  $N$  est paire. Alors qu'en dimension  $d = 3$  la taille minimale des matrices est  $N = 4$ , en dimension 2, le choix de  $\alpha_x = \sigma_x, \alpha_y = \sigma_y, \beta = \sigma_z$  où les  $\sigma_i$  sont les matrices de Pauli permet de satisfaire les contraintes (4.51). Le Hamiltonien de Dirac (4.49) prend alors la forme

$$\hat{H} = c (\sigma_x \cdot \mathbf{p}_x + \sigma_y \cdot \mathbf{p}_y) + mc^2 \sigma_z. \quad (4.52)$$

Les Hamiltoniens de basse énergie du graphène (4.47) et (4.48) sont bien de cette forme, avec  $m = 0$ . Les excitations électroniques de basse énergie du graphène sont donc décrit par une équation du mouvement de particules relativistes sans masse. Cette propriété a de nombreuses conséquences en particulier sur le transport électronique dans le graphène.

**Remarque 4.3.** L'équation de Dirac est souvent écrite sous une forme covariante qui rend explicite son invariance par les transformations de Lorentz. Cette forme n'est pas pertinente dans le contexte de la théorie des bandes du graphène. Il est cependant utile de la rappeler, en particulier dans le cas pertinent pour le graphène

de la dimension 2. Afin d'introduire un produit scalaire adapté à la grandeur scalaire invariante de Lorentz  $c^2t^2 - \mathbf{r}^2$ , on introduit le vecteur de coordonnées d'espace-temps  $x_\mu = (ct, -\mathbf{r})$  et le vecteur  $x^\mu = (ct, \mathbf{r}) = g^{\mu\nu} x_\nu$  où la métrique  $g^{\mu\nu}$  est donnée en  $d = 2$  par

$$g^{\mu\nu} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (4.53)$$

Cette écriture permet d'exprimer  $c^2t^2 - \mathbf{r}^2 = x^\mu x_\mu$ . L'équation aux valeurs propres correspondant au Hamiltonien (4.52) s'écrit

$$\left[ c (\sigma_x \cdot \mathbf{p}_x + \sigma_y \cdot \mathbf{p}_y) + mc^2 \sigma_z \right] |\psi\rangle = E |\psi\rangle \quad (4.54)$$

$$\Rightarrow \left( (\sigma_z \sigma_x) p_x + (\sigma_z \sigma_y) p_y + mc - \frac{E}{c} \sigma_z \right) |\psi\rangle = 0 \quad (4.55)$$

$$\Rightarrow \gamma^\mu p_\mu = 0 \quad (4.56)$$

avec  $p_\mu = (E/c, -\mathbf{p})$  et les matrices de Dirac  $\gamma^\mu$  sont définies par

$$\gamma^0 = \beta = \sigma_z \quad ; \quad \gamma^x = \beta \alpha_x = i\sigma_y \quad ; \quad \gamma^y = \beta \alpha_y = -i\sigma_x. \quad (4.57)$$

**Symétrie de l'équation de Dirac : P/T ?**

## 4.5 Etats propres et chiralité

### 4.5.1 Etats propres du Hamiltonien complet

Les états propres du Hamiltonien du graphène peuvent se déduire de la forme générale du Hamiltonien (4.40) en utilisant la décomposition  $\gamma_{\mathbf{k}} = |\gamma_{\mathbf{k}}| \exp(i\phi_{\mathbf{k}})$  :

$$\mathbf{H}^{\text{app}} \begin{pmatrix} a_{n,\mathbf{k}} \\ b_{n,\mathbf{k}} \end{pmatrix} = t|\gamma_{\mathbf{k}}| \begin{pmatrix} 0 & e^{-i\phi_{\mathbf{k}}} \\ e^{+i\phi_{\mathbf{k}}} & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{n,\mathbf{k}} \\ b_{n,\mathbf{k}} \end{pmatrix} = \epsilon_{n,\mathbf{k}} \begin{pmatrix} a_{n,\mathbf{k}} \\ b_{n,\mathbf{k}} \end{pmatrix}. \quad (4.58)$$

Nous obtenons la forme des deux états propres associées aux énergies  $\epsilon_{\pm,\mathbf{k}}$  :

$$\psi_{+,\mathbf{k}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ e^{+i\phi_{\mathbf{k}}} \end{pmatrix} \quad ; \quad \psi_{-,\mathbf{k}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -e^{+i\phi_{\mathbf{k}}} \end{pmatrix} \quad (4.59)$$

Les corrections provenant des seconds voisins et des recouvrements étant proportionnelle à l'identité, ces vecteurs restent états propres au delà de l'approximation des plus proches voisins. Ces deux états ont des amplitudes égales sur les deux sous réseaux  $A$  et  $B$ , ce qui est naturel (nous discuterons plus loin les propriétés de symétrie).

**Remarque 4.4.** Un autre choix de phase possible est :

$$\psi_{+,\mathbf{k}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{-i\frac{1}{2}\phi_{\mathbf{k}}} \\ e^{+i\frac{1}{2}\phi_{\mathbf{k}}} \end{pmatrix} \quad ; \quad \psi_{-,\mathbf{k}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} e^{-i\frac{1}{2}\phi_{\mathbf{k}}} \\ -e^{+i\frac{1}{2}\phi_{\mathbf{k}}} \end{pmatrix} \quad (4.60)$$

Intéressons nous maintenant à la nature des états autour des deux points de Dirac  $\mathbf{K}$  et  $\mathbf{K}'$ . Si nous notons  $\mathbf{q} = q \exp(i\theta)$ , les états propres autour des deux points de Dirac se déduisent de la phase de  $\gamma_{\mathbf{k}}$  :  $\arg \gamma_{\mathbf{K}+\mathbf{q}} = \theta$  et  $\arg \gamma_{\mathbf{K}'+\mathbf{q}} = \pi - \theta$ , ce qui nous donne

$$\psi_{+,\mathbf{K}+\mathbf{q}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ e^{+i\theta} \end{pmatrix} \quad ; \quad \psi_{-,\mathbf{K}+\mathbf{q}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -e^{+i\theta} \end{pmatrix} \quad (4.61)$$

et

$$\psi_{+,\mathbf{K}'+\mathbf{q}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ e^{+i(\pi-\theta)} \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -e^{-i\theta} \end{pmatrix} \quad ; \quad \psi_{-,\mathbf{K}'+\mathbf{q}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ e^{-i\theta} \end{pmatrix}. \quad (4.62)$$

### 4.5.2 États propres de basse énergie et Chiralité

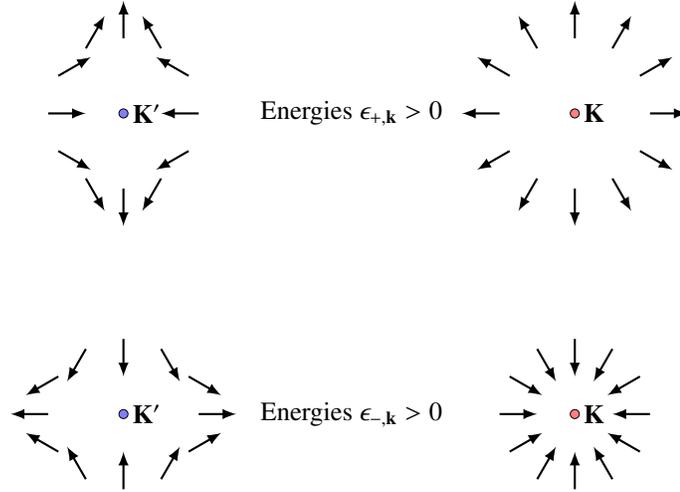


FIGURE 4.4 – Rotation du pseudo-spin des vecteurs propres autour des points de Dirac  $\mathbf{K}$  et  $\mathbf{K}'$  du graphène pour les états propres d'énergie positive et négative.

Il est souvent commode de traiter simultanément les deux Hamiltoniens de Dirac (4.47) et (4.48). Pour ce faire, nous changeons de base pour décrire les états autour du point  $\mathbf{K}'$  et introduisons la base  $\mathbf{K}', B, \mathbf{K}', A$ , ce qui revient à transposer le Hamiltonien. Dans la base complète  $\mathbf{K}, A; \mathbf{K}, B, \mathbf{K}', B, \mathbf{K}', A$  des vallées et sous réseau, le Hamiltonien de basse énergie s'écrit

$$H_{\mathbf{q}}^{\text{eff}} = \hbar v_F \begin{pmatrix} 0 & q_x - iq_y & 0 & 0 \\ q_x + iq_y & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -q_x - iq_y \\ 0 & 0 & -q_x + iq_y & 0 \end{pmatrix} \quad (4.63)$$

$$= \hbar v_F \tau_z \otimes \boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{q} \quad (4.64)$$

dans laquelle nous avons introduit la notation  $\sigma = (\sigma_x, \sigma_y)$ . Avec cette écriture, autour de chaque point de Dirac, le Hamiltonien se met localement sous la forme

$$H_{\pm\mathbf{K}+\mathbf{q}}^{\text{eff}} = \pm\hbar v_F q h_{\hat{q}} \quad \text{avec} \quad h_{\hat{q}} = \sigma \cdot \hat{q}. \quad (4.65)$$

$h_{\hat{q}}$  est un opérateur hermitien unitaire, et dont le carré est donné par l'identité :  $h_{\hat{q}}^2 = \mathbb{1}$ . Ses valeurs propres sont donc  $\pm 1$ . Cet opérateur est appelé opérateur de chiralité dans le contexte du graphène, et hélicité en physique relativiste. Ses valeurs propres nous indiquent si le pseudo-spin  $A/B$  tourne dans le sens de  $\hat{q}$  ou en sens inverse lorsque  $\hat{q}$  encercle le point de Dirac  $\mathbf{q} = \mathbf{0}$ . Le sens de rotation du vecteur de spin  $\langle \psi_{n,\mathbf{k}} | \sigma_x | \psi_{n,\mathbf{k}} \rangle, \langle \psi_{n,\mathbf{k}} | \sigma_y | \psi_{n,\mathbf{k}} \rangle$  est représenté autour des deux points  $\mathbf{K}$  et  $\mathbf{K}'$  sur la figure 4.4, dans la base  $A, B$  pour les deux points.

## 4.6 Phase de Berry

**Attention : il y a un facteur de phase constant à virer :  $\psi_{+,k} \neq e^{ik \cdot \hat{r}}$ . La forme**

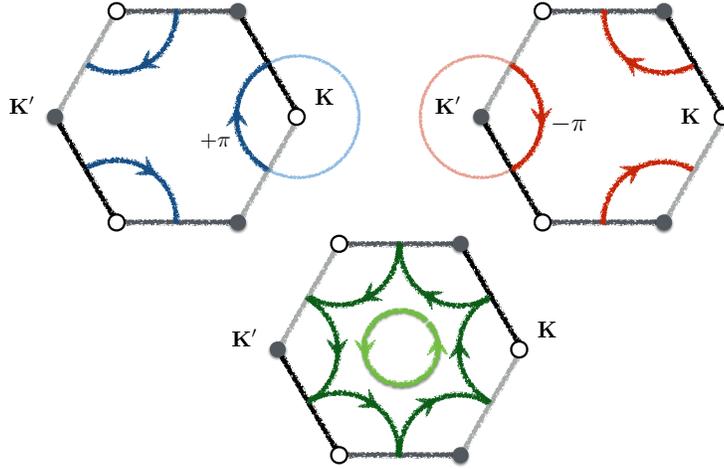


FIGURE 4.5 – Représentation schématique de deux phases de Berry  $\pm\pi$  acquises lors de l'évolution d'un état propre autour des points de Dirac  $\mathbf{K}$  et  $\mathbf{K}'$ .

(4.65) des Hamiltonien de basse énergie du graphène est similaire à celle d'un spin  $\frac{1}{2}$  dans un champ magnétique rencontré au paragraphe 3.4. Cependant notre problème étant restreint à la dimension deux, nous ne pouvons utiliser les résultats obtenus dans cette précédente étude. Nous nous en remettons donc à un calcul direct à partir

des états propres (4.59) :

$$\mathcal{A}^{(+)}(\mathbf{k}) = \frac{1}{i} \langle u_{+, \mathbf{k}} | \nabla_{\mathbf{k}} | u_{+, \mathbf{k}} \rangle, = \frac{1}{2i} \begin{pmatrix} 1 & e^{-i\phi_{\mathbf{k}}} \end{pmatrix} (i \nabla_{\mathbf{k}} \phi_{\mathbf{k}}) \begin{pmatrix} 1 \\ e^{+i\phi_{\mathbf{k}}} \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \nabla_{\mathbf{k}} \phi_{\mathbf{k}}. \quad (4.66)$$

De même pour la bande  $-$  :

$$\mathcal{A}^{(-)}(\mathbf{k}) = -\frac{1}{2} \nabla_{\mathbf{k}} \phi_{\mathbf{k}}. \quad (4.67)$$

Il est aisé de réaliser que l'intégrale le long d'un chemin fermé de cette connexion  $\mathcal{A}^{(+)}(\mathbf{k})$  s'annule, sauf autour des deux points de Dirac qui sont exclus de la zone de Brillouin pour chaque bande. Nous nous retrouvons donc dans une situation analogue à celle rencontrée lors de l'expérience de pensée de Aharonov-Bohm. Autour de chaque cône de Dirac, il est suffisant de considérer l'approximation linéaire du Hamiltonien vu que cette intégrale ne dépend pas du chemin choisi une fois le nombre de tours fixé. Dans cette approximation de basse énergie, les équations (4.44, 4.45) nous indiquent que la phase  $\phi_{\pm \mathbf{k} + \mathbf{q}}$  est donnée par  $\pm$  la phase de  $\mathbf{q}$  : nous obtenons une phase de Berry

$$\theta_{\mathbf{K}}^{(+)} = \oint_{\mathbf{K}} \mathcal{A}^{(+)}(\mathbf{k}) \cdot d\mathbf{k} = +\pi \quad ; \quad \theta_{\mathbf{K}'}^{(+)} = \oint_{\mathbf{K}'} \mathcal{A}^{(+)}(\mathbf{k}) \cdot d\mathbf{k} = -\pi \quad (4.68)$$

et  $\theta_{\mathbf{K}/\mathbf{K}'}^{(-)} = -\theta_{\mathbf{K}/\mathbf{K}'}^{(+)}$ . Ainsi les points de Dirac jouent le rôle de tube de flux de Berry de flux  $\pm\pi$ . Il s'agit de l'analogue en dimension deux des monopoles de Berry rencontré pour le problème des spins. De plus, nous vérifions que la somme des deux flux s'annule, le chemin entourant deux points de Dirac étant déformable en un point (voir la figure 4.5).

## 4.7 Symétrie et stabilité des points de Dirac

### 4.7.1 Symétries cristalline

Le cristal nid d'abeille du graphène est invariant par parité ou inversion  $\mathbf{r} \rightarrow -\mathbf{r}$ . Cette invariance correspond à une symétrie du Hamiltonien de Bloch qui se manifeste par la transformation  $\mathbf{k} \rightarrow -\mathbf{k}$  et l'échange des sous-réseaux  $A \leftrightarrow B$  soit encore

$$P \psi_{n, \mathbf{k}} = \sigma_x \psi_{n, -\mathbf{k}}. \quad (4.69)$$

La symétrie du Hamiltonien par inversion correspond à la relation

$$\sigma_x H_{-\mathbf{k}} \sigma_x = H_{\mathbf{k}}. \quad (4.70)$$

qui est bien vérifiée car la transformation  $\mathbf{k} \rightarrow -\mathbf{k}$  se traduit par  $\gamma_{-\mathbf{k}} = 1 + e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_2} + e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_3} = \overline{\gamma_{\mathbf{k}}}$ . Cette inversion se décompose en deux symétries miroirs qui sont elles-mêmes des symétries du cristal. La première est la symétrie miroir  $R_x$  par rapport au plan  $y = 0$  :  $x \rightarrow -x$  qui se manifeste ici par  $(k_x, k_y) \rightarrow (-k_x, k_y)$ . Cette symétrie

n'échange pas les sous réseaux  $A$  et  $B$  et correspond donc à l'identité dans l'espace des sous-réseaux.

$$H_{-k_x, k_y} = H_{k_x, k_y} \quad \text{car} \quad \gamma_{-k_x, k_y} = 1 + e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_3} + e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_2} = \gamma_{k_x, k_y}. \quad (4.71)$$

Cette symétrie échange les points de Dirac  $\mathbf{K}$  et  $\mathbf{K}'$ . En particulier, elle ne contraint pas la forme des Hamiltoniens de basse énergie autour de ces points mais impose la relation

$$H_{\mathbf{K}+(q_x, q_y)}^{\text{eff}} = H_{\mathbf{K}'+(-q_x, q_y)}^{\text{eff}} \quad (4.72)$$

La symétrie miroir  $R_y$  par rapport au plan  $x = 0 : y \rightarrow -y$  qui se manifeste ici par  $(k_x, k_y) \rightarrow (k_x, -k_y)$ . Cette symétrie échange les sous réseaux  $A$  et  $B$  et correspond donc à l'opérateur  $\sigma_x$  dans l'espace des sous-réseaux. Le Hamiltonien de Bloch satisfait à la relation

$$\sigma_x H_{k_x, -k_y} \sigma_x = H_{k_x, k_y} \quad \text{car} \quad \gamma_{k_x, -k_y} = 1 + e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_3} + e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_2} = \bar{\gamma}_{k_x, k_y}. \quad (4.73)$$

Cette symétrie n'échange pas les points de Dirac  $\mathbf{K}$  et  $\mathbf{K}'$  dans la zone de Brillouin. Elle contraint donc la forme de chaque Hamiltonien effectif autour de ces points. En particulier, la relation

$$\sigma_x H_{\mathbf{K}+(q_x, q_y)}^{\text{eff}} \sigma_x = H_{\mathbf{K}+(q_x, -q_y)}^{\text{eff}} \quad (4.74)$$

interdit la présence dans ce Hamiltonien d'un terme de masse  $m\sigma_z$  qui ouvrirait un gap. Plus précisément, la relation (4.74) implique qu'un terme de la forme  $f(q_x, q_y) \sigma_z$  ne peut être invariant par  $R_y$  qu'à la condition que  $f(q_x, q_y)$  soit une fonction impaire de  $q_y$ , qui s'annule donc pour  $q_y = 0$ . Le croisement des deux bandes aux points de Dirac, ou stabilité des points vis-à-vis de l'ouverture d'un gap, est donc assuré par la symétrie miroir par rapport au plan  $x = 0$ . Nous allons dans un instant la relier à une seconde paire de symétrie qui vont jouer un rôle important dans la suite.

#### 4.7.2 Extension de la notion de symétrie : symétrie chirale

A basse énergie les Hamiltoniens autour des points de Dirac  $\mathbf{K}$  et  $\mathbf{K}'$  prennent les formes (4.47) et (4.48). Leur forme hors-diagonale est une conséquence directe de la nature bipartite du cristal de graphène : les couplages entre plus proches voisins n'existent qu'entre les deux sous-réseaux  $A$  et  $B$ . Cette propriété implique que ces Hamiltoniens *anticommutent* avec l'opérateur  $C = \sigma_z$  :

$$C H_{\mathbf{K}+\mathbf{q}}^{\text{eff}} C = -H_{\mathbf{K}+\mathbf{q}}^{\text{eff}}. \quad (4.75)$$

Cette propriété établit une relation entre états propres d'énergies opposées autour du point de Dirac, par opposition à une symétrie habituelle qui établit une relation entre états propres de même énergie. Dans notre cas, si  $\psi_{\mathbf{K}+\mathbf{q}}$  est un état propre d'énergie  $\epsilon_{\mathbf{k}}$ , alors  $C\psi_{\mathbf{K}+\mathbf{q}}$  est un état propre d'énergie  $-\epsilon_{\mathbf{k}}$ . Cette symétrie réapparaîtra lors de la discussion des propriétés topologiques des phases isolantes.

## 4.8 Une symétrie particulière : le renversement du temps

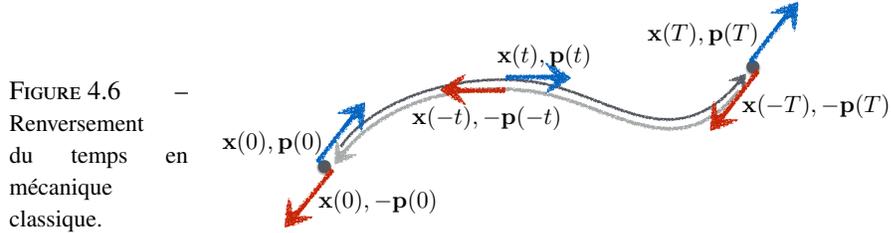
La symétrie par renversement du temps va jouer un rôle particulier dans la suite de ce cours. Nous commençons par une discussion générale de ses propriétés avant de la spécifier dans le cas du graphène.

### 4.8.1 Renversement du temps en mécanique classique

En mécanique classique, l'état d'une particule est décrit par une paire de variables conjuguées  $\mathbf{x}(t), \mathbf{p}(t)$ . L'évolution de ces deux variables dans l'espace des phases est décrite en formalisme Hamiltonien par les équations

$$\dot{\mathbf{x}}(t) = -\nabla_{\mathbf{x}}H \quad ; \quad \dot{\mathbf{p}}(t) = \nabla_{\mathbf{p}}H, \quad (4.76)$$

où  $H(\mathbf{x}, \mathbf{p})$  est le Hamiltonien du problème. Son évolution est dite invariante par



renversement du temps si, pour une évolution  $\mathbf{x}(t), \mathbf{p}(t)$  de  $\mathbf{x}(0), \mathbf{p}(0)$  à  $\mathbf{x}(T), \mathbf{p}(T)$ , l'évolution  $\mathbf{x}(-t), \mathbf{p}(-t)$  de la date  $t = -T$  à  $t = 0$  est aussi une évolution possible avec le même Hamiltonien. Notons qu'il s'agit toujours d'une évolution à temps croissant, mais en sens opposé dans l'espace des phases. Cette évolution agit également par rapport à une origine des temps  $t = 0$  qui peut être unique ou non. Finalement, par ce renversement du sens de propagation, nous avons agit différemment sur la variable de position, qui est paire en temps, et sur la quantité de mouvement qui est impaire en temps. L'évolution de la date  $t = -T$  à  $t = 0$  est une évolution suivant le même Hamiltonien si celui-ci satisfait la condition d'invariance par renversement du temps

$$H(\mathbf{x}, \mathbf{p}) = H(\mathbf{x}, -\mathbf{p}). \quad (4.77)$$

En particulier, si le Hamiltonien d'une particule dans un potentiel  $V(\mathbf{x})$  est bien invariante par renversement du temps, la présence d'un champ magnétique extérieur brise celle-ci :

$$H(\mathbf{x}, \mathbf{p}) = \frac{(\mathbf{p} - q\mathbf{A}(\mathbf{r}))^2}{2m} + V(\mathbf{r}) \neq H(\mathbf{x}, -\mathbf{p}) = \frac{(-\mathbf{p} - q\mathbf{A}(\mathbf{r}))^2}{2m} + V(\mathbf{r}). \quad (4.78)$$

### 4.8.2 Renversement du temps en mécanique quantique

En mécanique quantique, il convient de remplacer les équations de Hamilton (4.76) par l'équation de Schrödinger :

$$i\hbar\partial_t\psi(\mathbf{x}, t) = \hat{H}\psi(\mathbf{x}, t). \quad (4.79)$$

Nous notons de suite un souci : cette équation étant linéaire en temps,  $\psi(\mathbf{x}, t)$  et  $\psi(\mathbf{x}, -t)$  ne peuvent être simultanément solution de cette équation. Mais  $\psi(\mathbf{x}, t)$  et  $\overline{\psi}(\mathbf{x}, -t)$  peuvent l'être : l'opération de renversement du temps et la conjugaison complexe sont intimement liées en mécanique quantique. Poursuivons cette idée et considérons l'évolution d'un état entre les dates  $t$  et  $t + dt$  :

$$|\psi(t + dt)\rangle = \left(\mathbb{I} - \frac{i}{\hbar}\hat{H}dt\right)|\psi(t)\rangle. \quad (4.80)$$

Si nous définissons l'opération de renversement du temps par l'opérateur  $\hat{T}$ , l'invariance par cette transformation de la dynamique de Schrödinger s'écrit

$$\left(\mathbb{I} - \frac{i}{\hbar}\hat{H}dt\right)\hat{T}|\psi(t)\rangle = \hat{T}\left(\mathbb{I} - \frac{i}{\hbar}\hat{H}dt\right)|\psi(t)\rangle \quad \forall |\psi(t)\rangle \quad (4.81)$$

$$\Rightarrow -i\hat{T}\hat{H} = \hat{T}i\hat{H}. \quad (4.82)$$

Cette équation implique que  $\hat{T}$  ne peut être un opérateur unitaire. En effet si  $\hat{T}$  était unitaire, cela impliquerait que  $-\hat{T}\hat{H} = \hat{T}\hat{H}$  et donc pour tout Hamiltonien invariant par renversement du temps un spectre non borné inférieurement : pour un état propre  $|n\rangle$ , nous aurions  $\hat{H}\hat{T}|n\rangle = -\hat{T}E_n|n\rangle = -E_n\hat{T}|n\rangle$ . Ce résultat n'est pas acceptable. Ainsi  $\hat{T}$  est un opérateur anti-unitaire<sup>1</sup> : il satisfait

$$\langle \hat{T}\psi_2 | \hat{T}\psi_1 \rangle = \overline{\langle \psi_2 | \psi_1 \rangle} = \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle, \quad (4.83)$$

$$\hat{T}(\lambda_1|\psi_1\rangle + \lambda_2|\psi_2\rangle) = \overline{\lambda_1}\hat{T}|\psi_1\rangle + \overline{\lambda_2}\hat{T}|\psi_2\rangle. \quad (4.84)$$

La symétrie par renversement du temps s'exprime donc comme la condition habituelle

$$[\hat{T}, \hat{H}] = 0. \quad (4.85)$$

Nous verrons par la suite qu'il existe deux types de symétries associées à des opérateurs anti-unitaires : la symétrie de renversement du temps, et la symétrie particule-trou ou de conjugaison de charge. Toute opérateur anti-unitaire peut être représenté comme  $\hat{T} = \hat{U}K$  où  $\hat{U}$  est un opérateur unitaire et  $K$  la conjugaison complexe. Cette conjugaison complexe agit sur les coefficients complexes des vecteurs dans une base fixée, et dépend donc de cette base. Nous vérifions en utilisant une base  $\{|e_i\rangle\}_i$  que

$$\langle \hat{T}\psi_2 | \hat{T}\psi_1 \rangle = \sum_{i,j} \langle e_j | \psi_2 \rangle \overline{\langle e_i | \psi_1 \rangle} \langle e_j | \hat{U}^\dagger \hat{U} | e_i \rangle \quad (4.86)$$

$$= \sum_i \langle \psi_1 | e_i \rangle \langle e_i | \psi_2 \rangle = \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle. \quad (4.87)$$

1. Les symétries en mécanique quantique correspondent à des opérateurs soit unitaires, soit anti-unitaires qui préservent également les amplitudes des éléments de matrices.

Considérons maintenant un opérateur  $\hat{O}$  hermitien :

$$\langle \psi_2 | \hat{O} | \psi_1 \rangle = \langle \hat{O}^\dagger \psi_2 | \psi_1 \rangle = \langle \hat{T} \psi_1 | \hat{T} \hat{O} \psi_2 \rangle = \langle \hat{T} \psi_1 | \hat{T} \hat{O} \hat{T}^{-1} | \hat{T} \psi_2 \rangle. \quad (4.88)$$

Ces observables sont classées selon leur parité vis-à-vis du renversement du temps, définie selon

$$\hat{T} \hat{O} \hat{T}^{-1} = \pm \hat{O}. \quad (4.89)$$

Par extension des résultats de la mécanique classique, la position  $\hat{\mathbf{r}}$  sera un opérateur pair, alors que la quantité de mouvement  $\hat{\mathbf{p}}$  ou le moment angulaire  $\hat{\mathbf{J}}$  seront des opérateurs impairs.

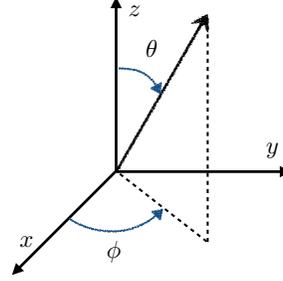
**Remarque 4.5.** Le caractère impair de la quantité de mouvement peut être relié à la préservation des relations de commutation canoniques par ce renversement du temps :

$$[x_j, -p_k] = i\hbar\delta_{jk} \Rightarrow [\hat{T} \hat{x}_j \hat{T}^{-1}, \hat{T} \hat{p}_k \hat{T}^{-1}] = i\hbar\delta_{jk} = [x_j, -p_k]. \quad (4.90)$$

De même les relations de commutation entre composantes du moment cinétique  $[\hat{J}_j, \hat{J}_k] = i\hbar\epsilon_{jkl}\hat{J}_l$  sont cohérentes avec la nature impaire par renversement du temps de cet opérateur.

### 4.8.3 Renversement du temps et spin

FIGURE 4.7 – Conventions de coordonnées sphériques pour un vecteur de quantification de spin.



L'action du renversement du temps sur le nombre quantique de spin joue un rôle particulier en physique quantique et en particulier en matière condensée. La nature impaire du spin par renversement du temps nous permet d'écrire, pour des états de spin associés à un axe de quantification de spin  $\hat{n}$  quelconque :

$$(\hat{\mathbf{S}} \cdot \hat{\mathbf{n}}) \hat{T} |\hat{n}, s\rangle = -\hat{T} (\hat{\mathbf{S}} \cdot \hat{\mathbf{n}}) |\hat{n}, s\rangle = -\hbar s \hat{T} |\hat{n}, s\rangle. \quad (4.91)$$

Ainsi nous pouvons identifier  $\hat{T} |\hat{n}, s\rangle$  avec  $|\hat{n}, -s\rangle$  à une phase près :

$$\hat{T} |\hat{n}, s\rangle = e^{i\alpha_{\hat{n},s}} |\hat{n}, -s\rangle. \quad (4.92)$$

Repérons  $\hat{n}$  en coordonnées sphériques par les angles  $\theta, \phi$  selon les conventions de la figure 4.7. Le spin selon cet axe de quantification se déduit des spins quantifiés selon l'axe  $z$  selon

$$|\hat{n}, s\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\phi\hat{S}_z} e^{-\frac{i}{\hbar}\theta\hat{S}_y} |\hat{e}_z, s\rangle. \quad (4.93)$$

Cette expression nous permet de traduire l'équation (4.92), en décomposant  $\hat{T} = \hat{U}K$ , sous la forme :

$$\hat{T} |\hat{n}, s\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}\phi\hat{S}_z} e^{-\frac{i}{\hbar}\theta\hat{S}_y} \hat{U} |\hat{e}_z, s\rangle = e^{i\alpha_{n,s}} e^{-\frac{i}{\hbar}\phi\hat{S}_z} e^{-\frac{i}{\hbar}(\pi+\theta)\hat{S}_y} |\hat{e}_z, s\rangle \quad (4.94)$$

où nous avons utilisé  $\hat{T}i\hat{S}_\beta = i\hat{S}_\beta\hat{T}$ . Cette relation étant valable pour tout état de spin, elle implique la forme suivante de l'opérateur de renversement du temps :

$$\hat{T} = e^{-\frac{i}{\hbar}\pi\hat{S}_y} K. \quad (4.95)$$

En particulier, cette définition implique que

$$\hat{T}^2 = e^{-\frac{i}{\hbar}2\pi\hat{S}_y} = (-1)^{2S} \mathbb{I}. \quad (4.96)$$

$\hat{T}^2$  correspond à une rotation de  $2\pi$  des spins : pour des spins demi-entiers, nous en déduisons que  $\hat{T}^2 = -\mathbb{I}$ . Cette propriété a comme conséquence la dégénérescence double du spectre de tout Hamiltonien de spin demi-entier, ce qui est le cas pour les électrons. En effet, à tout état propre  $|\psi_n\rangle$  est associé l'état  $\hat{T}|\psi_n\rangle$  de même énergie d'après la condition (4.85). Ces deux états ne peuvent être égaux pour des spins demi-entiers, en effet

$$\text{si } \hat{T}|\psi_n\rangle = \lambda|\psi_n\rangle \quad \text{alors} \quad \hat{T}^2|\psi_n\rangle = \hat{T}\lambda|\psi_n\rangle = \bar{\lambda}\hat{T}|\psi_n\rangle = \bar{\lambda}\lambda|\psi_n\rangle = |\psi_n\rangle, \quad (4.97)$$

ce qui contredit la relation (4.96). Cette double dégénérescence s'appelle dégénérescence de Kramers. Dans le contexte de la théorie des bandes, l'équation aux valeurs propres sur des fonctions d'onde de Bloch peut être réécrite comme une équation dépendant du quasi-moment  $\mathbf{k}$  :

$$\hat{H}(e^{i\mathbf{k}\cdot\hat{\mathbf{x}}}|u_{n,\mathbf{k}}\rangle) = E_{n,\mathbf{k}}(e^{i\mathbf{k}\cdot\hat{\mathbf{x}}}|u_{n,\mathbf{k}}\rangle) \quad (4.98)$$

$$\Rightarrow \hat{H}_{\mathbf{k}}|u_{n,\mathbf{k}}\rangle = E_{n,\mathbf{k}}|u_{n,\mathbf{k}}\rangle \quad \text{avec} \quad \hat{H}_{\mathbf{k}} = e^{-i\mathbf{k}\cdot\hat{\mathbf{x}}}\hat{H}e^{i\mathbf{k}\cdot\hat{\mathbf{x}}}. \quad (4.99)$$

La condition (4.85) d'invariance du Hamiltonien se traduit pour le Hamiltonien de Bloch par la condition <sup>2</sup>

$$\hat{T}\hat{H}_{\mathbf{k}}\hat{T}^{-1} = e^{+i\mathbf{k}\cdot\hat{\mathbf{x}}}\hat{H}e^{-i\mathbf{k}\cdot\hat{\mathbf{x}}} = \hat{H}_{-\mathbf{k}}. \quad (4.100)$$

Ainsi, si  $|u_{n,\mathbf{k}}\rangle$  est un état propre de  $\hat{H}_{\mathbf{k}}$ ,  $\hat{T}|u_{n,\mathbf{k}}\rangle$  est un état propre de  $\hat{H}_{-\mathbf{k}}$ . La dégénérescence de Kramers contraint les bandes d'énergies de façon non-locale dans la zone de Brillouin.

#### 4.8.4 Le renversement du temps dans le graphène

Dans le cas du graphène, le Hamiltonien ne dépend pas explicitement du spin. Il est possible de déterminer les états propres en considérant des particules sans spins

2. Attention,  $\mathbf{k}$  est ici un paramètre réel, qui n'est donc pas affecté par le renversement du temps contrairement aux valeurs propres de l'impulsion.

(ou de spin 0) comme nous l'avons fait précédemment. La base pour les états de Bloch que nous avons considéré satisfait

$$T |\psi_{\mathbf{k}}^{(A)}\rangle = \sum_{m,n} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_{m,n}} |\mathbf{R}_{m,n}, A\rangle = |\psi_{-\mathbf{k}}^{(A)}\rangle \quad (4.101)$$

$$T |\psi_{\mathbf{k}}^{(B)}\rangle = \sum_{m,n} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_{m,n}} |\mathbf{R}_{m,n}, B\rangle = |\psi_{-\mathbf{k}}^{(B)}\rangle. \quad (4.102)$$

Dans la base  $\mathbf{K}, A; \mathbf{K}, B, \mathbf{K}', A, \mathbf{K}', B$ , un état peut être représenté à base énergie par un vecteur d'amplitudes

$$\psi_{\mathbf{q}} = \begin{pmatrix} a_{\mathbf{K},\mathbf{q}} \\ b_{\mathbf{K},\mathbf{q}} \\ b_{\mathbf{K}',\mathbf{q}} \\ a_{\mathbf{K}',\mathbf{q}} \end{pmatrix}; \quad T\psi_{\mathbf{q}} = \begin{pmatrix} \bar{a}_{\mathbf{K}',-\mathbf{q}} \\ \bar{b}_{\mathbf{K},-\mathbf{q}} \\ \bar{b}_{\mathbf{K}',-\mathbf{q}} \\ \bar{a}_{\mathbf{K},-\mathbf{q}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} K \begin{pmatrix} a_{\mathbf{K},-\mathbf{q}} \\ b_{\mathbf{K},-\mathbf{q}} \\ b_{\mathbf{K}',-\mathbf{q}} \\ a_{\mathbf{K}',-\mathbf{q}} \end{pmatrix}. \quad (4.103)$$

La renversement du temps s'exprime donc comme  $T = (\tau_x \otimes \sigma_x)K$ . En particulier le Hamiltonien de basse énergie (4.64) satisfait la contrainte de symétrie

$$TH_{\mathbf{q}}^{\text{eff}}T^{-1} = \hbar v_F(\tau_x \otimes \sigma_x) \left[ \tau_z \otimes (\sigma_x q_x - \sigma_y q_y) \right] (\tau_x \otimes \sigma_x) \quad (4.104)$$

$$= \hbar v_F \left[ -\tau_z \otimes (\sigma_x q_x + \sigma_y q_y) \right] \quad (4.105)$$

$$= H_{-\mathbf{q}}^{\text{eff}}. \quad (4.106)$$

Cette opérateur de renversement du temps vérifie naturellement  $T^2 = \mathbb{I}$  car il est associé à des particules de spin 0 (le spin ne joue aucun rôle dans la nature des états propres). Il est intéressant de réaliser qu'une seconde symétrie de renversement du temps existe à basse énergie : en effet, un pseudo-spin  $\frac{1}{2}$  apparaît, qui détermine la nature des états propres. Un renversement du temps qui agit localement autour d'un cône est donc envisageable, associé à ce spin  $\frac{1}{2}$ . Il doit effectuer une rotation de  $\pi$  sur les spins, et correspond donc à l'opérateur

$$\tilde{T} = \mathbb{I} \otimes (i\sigma_y).K. \quad (4.107)$$

Cet opérateur est bien anti-unitaire et est une symétrie du Hamiltonien :

$$\tilde{T}H_{\mathbf{q}}^{\text{eff}}\tilde{T}^{-1} = \hbar v_F(\mathbb{I} \otimes (i\sigma_y)) \left[ \tau_z \otimes (\sigma_x q_x - \sigma_y q_y) \right] (\mathbb{I} \otimes (-i\sigma_y)) \quad (4.108)$$

$$= \hbar v_F \left[ \tau_z \otimes (-\sigma_x q_x - \sigma_y q_y) \right] \quad (4.109)$$

$$= H_{-\mathbf{q}}^{\text{eff}}. \quad (4.110)$$

Il est donc tout à fait légitime de l'appeler symétrie de renversement du temps du Hamiltonien. Cependant il vérifie la relation  $\tilde{T}^2 = -\mathbb{I}$  pour les particules de spin  $\frac{1}{2}$  : nous voyons le premier exemple où la nature du renversement du temps n'est pas déterminée par la nature des particules du Hamiltonien initial. Le renversement du temps se détermine sur le Hamiltonien effectif qui décrit les bandes de basse

énergie. Nous appellerons donc symétrie de renversement du temps tout opérateur anti-unitaire  $T$  qui est une symétrie du Hamiltonien. Un hamiltonien peut donc être associé à plusieurs opérateurs de renversement du temps qui diffèrent entre eux par des symétries usuelles, c'est-à-dire des opérateurs unitaires  $U$  qui commutent avec le Hamiltonien. Dans notre cas,

$$\tilde{T} = U\hat{T} \quad \text{avec} \quad U = \tau_x \otimes \sigma_z = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (4.111)$$

Il s'agit bien d'une symétrie du Hamiltonien de basse énergie (4.64), mais non d'une symétrie du modèle initial : ce n'est pas une symétrie cristalline. Sa présence suppose l'existence des deux vallées d'énergie associée à deux pseudo-spins opposés.

**Remarque 4.6.** L'existence de ces deux renversements du temps dans le graphène est à l'origine du cross-over entre anti-localisation et localisation faible en fonction de la portée du désordre, selon que celui-ci couple les deux vallées de Dirac ou non. **A creuser !**

#### 4.8.5 Retour sur la stabilité des points de Dirac

La symétrie d'inversion ou parité du Hamiltonien du graphène s'exprime selon la condition (4.70). Dans la base  $\mathbf{K}, A; \mathbf{K}, B, \mathbf{K}', B, \mathbf{K}', A$ , nous pouvons l'exprimer sous la forme

$$\hat{P} \begin{pmatrix} a_{\mathbf{K},\mathbf{q}} \\ b_{\mathbf{K},\mathbf{q}} \\ b_{\mathbf{K}',\mathbf{q}} \\ a_{\mathbf{K}',\mathbf{q}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b_{\mathbf{K}',-\mathbf{q}} \\ a_{\mathbf{K}',-\mathbf{q}} \\ a_{\mathbf{K},-\mathbf{q}} \\ b_{\mathbf{K},-\mathbf{q}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{\mathbf{K},-\mathbf{q}} \\ b_{\mathbf{K},-\mathbf{q}} \\ b_{\mathbf{K}',-\mathbf{q}} \\ a_{\mathbf{K}',-\mathbf{q}} \end{pmatrix}, \quad (4.112)$$

soit  $\hat{P}\psi_{\mathbf{q}} = (\tau_x \otimes \mathbb{I})\psi_{\mathbf{q}}$ . La combinaison  $\hat{P}\hat{T}$  correspond donc à une symétrie agissant localement dans la zone de Brillouin, selon  $\hat{P}\hat{T} = (\tau_x \otimes \mathbb{I})(\tau_x \otimes \sigma_x)K = (\mathbb{I} \otimes \sigma_x)K$ . Cette symétrie interdit également l'apparition d'un gap à chaque point de Dirac :

$$\sigma_x K [m(\mathbf{K}) \sigma_z] \sigma_x K = -m(\mathbf{K}) \sigma_z, \quad (4.113)$$

ce qui implique que  $m(\mathbf{K}) = 0$ .

#### 4.8.6 Symétrie et courbure de Berry

La relation (3.36) se transpose dans le contexte de la théorie des bandes sous la forme :

$$\mathcal{B}_{\mathbf{k}}^{(n)} = \frac{1}{i} \sum_{m \neq n} \frac{\langle u_{n,\mathbf{k}} | \nabla_{k_i} H_{\mathbf{k}} | u_{m,\mathbf{k}} \rangle \langle u_{m,\mathbf{k}} | \nabla_{k_j} H_{\mathbf{k}} | u_{n,\mathbf{k}} \rangle}{(E_{n,\mathbf{k}} - E_{m,\mathbf{k}})^2} dk_i \wedge dk_j. \quad (4.114)$$

Si le Hamiltonien est invariant par renversement du temps, nous pouvons écrire d'après (4.83)

$$\mathcal{B}_{\mathbf{k}}^{(n)} = \frac{1}{i} \sum_{m \neq n} \frac{\langle u_{m,-\mathbf{k}} | \hat{T} \nabla_{k_i} H_{\mathbf{k}} \hat{T}^{-1} | u_{n,-\mathbf{k}} \rangle \langle u_{n,-\mathbf{k}} | \hat{T} \nabla_{k_j} H_{\mathbf{k}} \hat{T}^{-1} | u_{m,-\mathbf{k}} \rangle}{(E_{n,-\mathbf{k}} - E_{m,-\mathbf{k}})^2} dk_i \wedge dk_j. \quad (4.115)$$

La définition du Hamiltonien de Bloch nous permet d'obtenir

$$\nabla_{k_i} \hat{T} H_{\mathbf{k}} \hat{T}^{-1} = \nabla_{k_i} H_{-\mathbf{k}} = -\nabla_{-k_i} H_{-\mathbf{k}}. \quad (4.116)$$

L'équation (4.119) s'exprime ainsi selon

$$\mathcal{B}_{\mathbf{k}}^{(n)} = \frac{1}{i} \sum_{m \neq n} \frac{\langle u_{m,-\mathbf{k}} | \nabla_{-k_i} H_{\mathbf{k}} | u_{n,-\mathbf{k}} \rangle \langle u_{n,-\mathbf{k}} | \nabla_{-k_j} H_{\mathbf{k}} | u_{m,-\mathbf{k}} \rangle}{(E_{n,-\mathbf{k}} - E_{m,-\mathbf{k}})^2} dk_i \wedge dk_j \quad (4.117)$$

$$= -\frac{1}{i} \sum_{m \neq n} \frac{\langle u_{n,-\mathbf{k}} | \nabla_{-k_j} H_{\mathbf{k}} | u_{m,-\mathbf{k}} \rangle \langle u_{m,-\mathbf{k}} | \nabla_{-k_i} H_{\mathbf{k}} | u_{n,-\mathbf{k}} \rangle}{(E_{n,-\mathbf{k}} - E_{m,-\mathbf{k}})^2} dk_j \wedge dk_i \quad (4.118)$$

$$= -\mathcal{B}_{-\mathbf{k}}^{(n)}. \quad (4.119)$$

Ainsi en présence d'une symétrie de renversement du temps, la courbure de Berry par bande est une fonction impaire du quasi-moment dans la zone de Brillouin. Le calcul précédent peut se répéter si l'on considère la symétrie d'inversion (ou parité) en lieu et place du renversement du temps :  $\hat{P} | u_{n,\mathbf{k}} \rangle = | u_{n,-\mathbf{k}} \rangle$ . L'opérateur  $\hat{P}$  étant unitaire, nous obtenons cette fois-ci une condition de parité de la courbure de Berry :

$$\mathcal{B}_{\mathbf{k}}^{(n)} = +\mathcal{B}_{-\mathbf{k}}^{(n)}. \quad (4.120)$$

Ces contraintes ont une conséquence cruciale lorsqu'inversion et renversement du temps sont simultanément présents. Dans ce cas, la courbure  $\mathcal{B}_{\mathbf{k}}^{(n)}$  s'annule en tout point. Il s'agit en particulier du cas du graphène, où la courbure de chaque bande est partout nulle en dehors du point de croisement des deux bandes où elle n'est pas définie.

**Deuxième partie**

**Caractérisation Topologique  
d'une Phase de la Matière**



## Chapitre 5

# Effet Hall Quantique

L'effet Hall Quantique est une des phases les plus remarquables de matière condensée, manifestant à l'échelle macroscopique des propriétés quantiques. L'effet Hall quantique dit entier a été découvert en 1980 par von Klitzing à Grenoble. Cette phase est obtenue lorsque des électrons sont piégés à une interface planaire et soumis à un fort champ magnétique transverse. Elle requiert également une grande mobilité des électrons dans ce plan, et donc un faible désordre d'interface. Une telle interface peut être obtenue dans des systèmes analogues aux transistors, obtenus en particulier dans des puits quantiques de semi-conducteurs, traditionnellement GaAs et AlGaAs, ou encore dans le graphène. Dans le cas d'une hétérojonction, représentée schématiquement sur la figure 5.1, la densité d'électrons du plan de l'interface peut être contrôlée par la tension d'une grille parallèle au plan de l'interface. Lorsqu'on soumet cette interface à un fort champ magnétique, des plateaux de résistivité de Hall apparaissent, correspondant à une annulation de la résistivité longitudinale, représentés sur la figure 5.2. Ces plateaux correspondent aux valeurs de conductivité

$$\sigma_{xx} = 0 \quad ; \quad \sigma_{xy} = \nu \frac{e^2}{h}. \quad (5.1)$$

Dans cette expression,  $\nu$  est un entier, déterminé expérimentalement avec une précision relative de l'ordre de  $10^{-10}$  inhabituelle en matière condensée : elle est telle que ces plateaux servent maintenant de référence en métrologie pour le standard de résistance. Comprendre cette quantification requiert une description quantique du comportement des électrons en dimension 2 et sous un fort champ magnétique transverse, que nous allons maintenant aborder.

En 1982, Tsui, Störmer et Gossard découvrent que dans des échantillons avec peu de désordre, des plateaux apparaissent pour des valeurs fractionnaires de  $\nu$ . Il s'agit de la phase d'effet Hall quantique fractionnaire. Cette phase est induite par les effets combinés du champ magnétique et des interactions coulombiennes entre électrons. Elles possèdent des propriétés remarquables : en particulier des excitations de basse énergie qui portent une charge fractionnaire, et dont la statistique n'est ni bosonique ni fermionique.

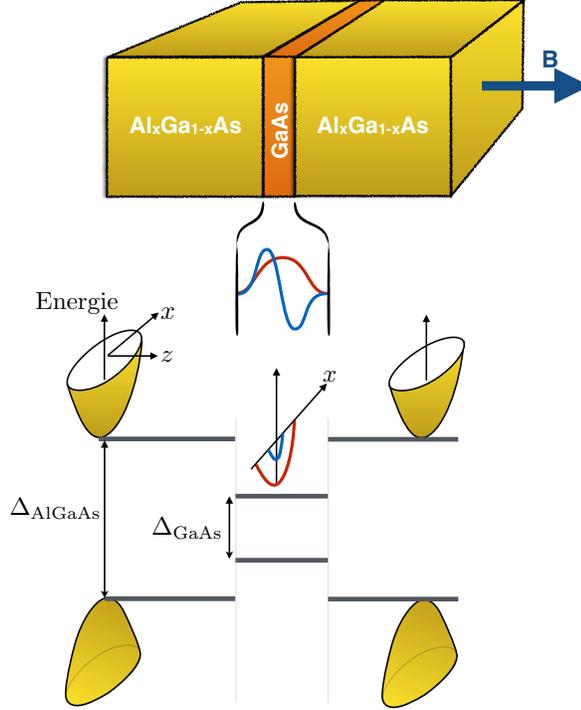


FIGURE 5.1 – Représentation schématique d’une hétérojonction entre deux semi-conducteurs. Les électrons sont confinés dans la direction  $z$  transverse à la jonction. A suffisamment basse densité, ils peuplent l’état fondamental du puits de potentiel dans la direction transverse.

## 5.1 Effet Hall classique

### 5.1.1 Mouvement d’une particule

Les équations du mouvement d’une particule de charge  $q = -e$  évoluant dans un plan et soumise à une force de Lorentz  $\mathbf{F} = (-e)\mathbf{v} \times \mathbf{B}$  résultant d’un champ magnétique transverse dirigé selon l’axe  $z$  :  $\mathbf{B} = B\hat{z}$  s’écrivent

$$\begin{pmatrix} \ddot{x} \\ \ddot{y} \end{pmatrix} = -\frac{eB}{m} \begin{pmatrix} \dot{y} \\ -\dot{x} \end{pmatrix} \Leftrightarrow \ddot{z}(t) = i\omega_c \dot{z} \quad \text{avec} \quad z = x + iy; \quad \omega_c = \frac{eB}{m}. \quad (5.2)$$

qui se résout en

$$z(t) = z_0 + de^{+i\omega_c t}. \quad (5.3)$$

Il s’agit d’un mouvement circulaire, de pulsation  $\omega_c$  fixée par le champ magnétique, et tel que diamètre et vitesse sont reliées par la relation  $v_c = \omega_c d$ . La présence d’un

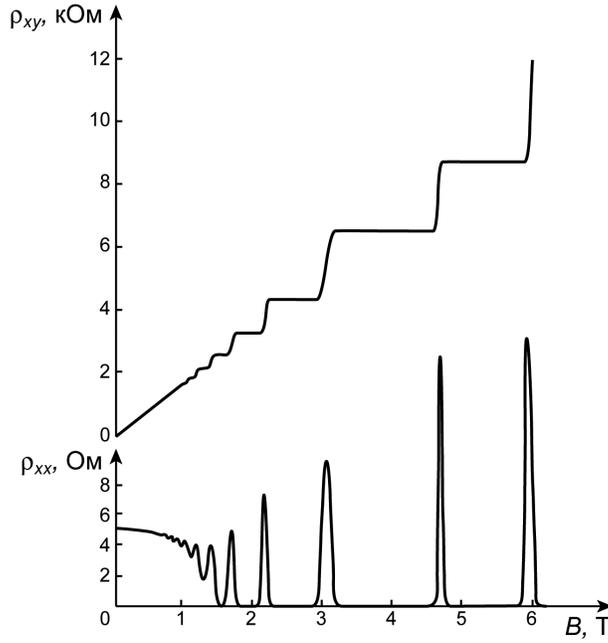


FIGURE 5.2 – Conductivité longitudinale et transverse d'une hétérojonction en fonction du champ magnétique transverse  $B$ . Les phases d'Effet Hall Quantique correspondent aux plateaux de résistivité transverse  $\rho_{xy}$ , pour lesquels la résistivité longitudinale  $\rho_{xx}$  s'annule.

champ électrique additionnel conduit à une équation du mouvement modifiée, avec la notation  $\mathcal{E} = E_x + iE_y$  :

$$\ddot{z}(t) = i\omega_c \dot{z} - \frac{e}{m} \mathcal{E}. \quad (5.4)$$

La présence de ce champ électrique peut être absorbée par un changement de référentiel galiléen : le changement de variable

$$\tilde{z} = z + \frac{i}{B} \mathcal{E} t \quad (5.5)$$

permet de se ramener à l'équation du mouvement et donc la solution précédente. Cette solution correspond à une translation  $(x, y) = (\tilde{x}, \tilde{y} + \mathbf{v}t)$  où la vitesse de dérive  $\mathbf{v}$  est définie par

$$\mathbf{v} = \mathbf{E} \times \frac{\mathbf{B}}{B^2}. \quad (5.6)$$

Le mouvement de dérive du centre de masse se fait le long d'équipotentielle à une vitesse  $v \propto E/B$ , alors que le mouvement cyclotron autour de ce centre de masse

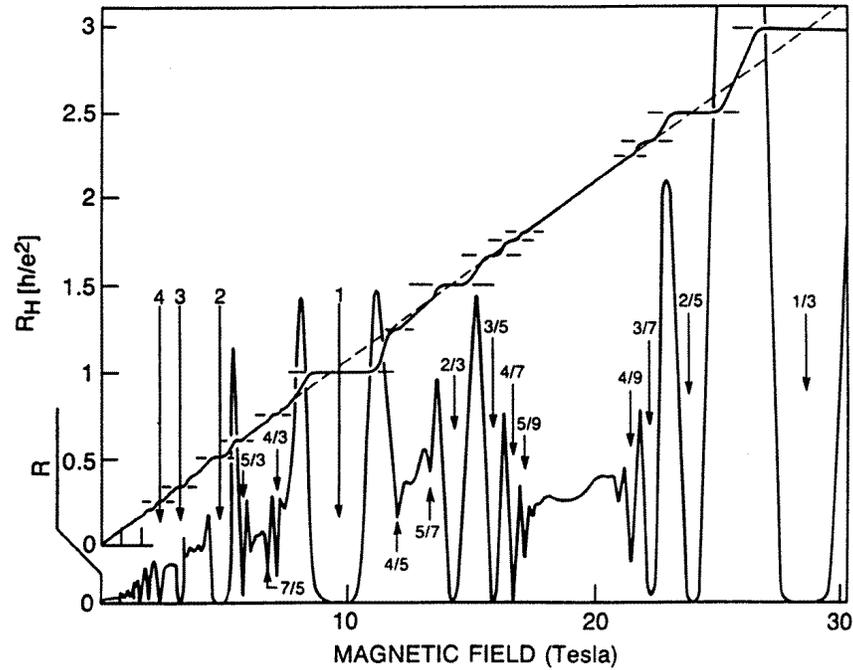
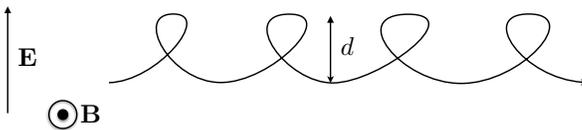


FIGURE 5.3 – Courbes de résistance en fonction du champ magnétique montrant les plateaux de résistance de Hall  $R_H$  et de résistance longitudinale  $R$ . Des plateaux sont observés pour des valeurs entières et fractionnaires du facteur de remplissage, indiquées sur la figure, et correspondant aux régimes d'effet Hall quantique entier et fractionnaire. Courbe extraite de H. L. Störmer, *Physica* **B177**, 401 (1992) .

FIGURE 5.4 – Mouvement classique d'une particule soumise à un champ électrique et un champ magnétique orthogonale au plan.



se fait à une fréquence  $\omega_c = eB/m$ . Lorsque le champ magnétique augmente, cette fréquence augmente alors que la vitesse de dérive baisse : nous attendons donc à un découplage des dynamiques dans la limite des fortes champs magnétiques. Dans la limite des très fort champs, le mouvement cyclotron nécessitera une description quantique lorsque associée à une échelle que l'on peut évaluer d'après le principe d'incertitude de Heisenberg :  $\Delta d m \Delta v_c \approx \hbar$  où la taille  $d$  et la vitesse  $v_c$  de l'orbite

cyclotron sont reliées par la relation  $v_c = \omega_c d$ . Nous en tirons l'échelle, appelée longueur magnétique  $l_B$  pertinente pour la description des effets quantiques :

$$l_B^2 = \frac{\hbar}{eB}. \quad (5.7)$$

En fort champ magnétique, nous nous attendons donc à des orbitales semi-classiques de taille caractéristique  $l_B$  dérivant le long des équipotentielles, et d'une dynamique quantique associée à l'échelle  $l_B$ . Les valeurs numériques de cette longueur sont données par  $l_B \simeq 257 \text{Å} / \sqrt{B}$  où  $B$  est exprimé en Tesla.

### 5.1.2 Formalisme Hamiltonien classique

La décomposition en variables lentes et rapides apparait naturellement en formalisme Hamiltonien.

$$H = \frac{\mathbf{\Pi}^2}{2m} \quad ; \quad \mathbf{\Pi} = \mathbf{p} - q\mathbf{A}(\mathbf{r}) = m\dot{\mathbf{r}}. \quad (5.8)$$

avec les crochets de Poisson <sup>1</sup> entre variables canoniquement conjuguées

$$\{p_j, p_k\} = 0 \quad ; \quad \{r_j, r_k\} = 0 \quad ; \quad \{p_j, r_k\} = \delta_{jk}. \quad (5.9)$$

Le moment dynamique  $\mathbf{\Pi}$  satisfait

$$\{\Pi_j, \Pi_k\} = q\epsilon_{jk}B \quad ; \quad \{\Pi_j, r_k\} = \delta_{jk}. \quad (5.10)$$

On définit de nouvelles coordonnées  $R_x = x - \frac{1}{eB}\Pi_y$  et  $R_y = y + \frac{1}{eB}\Pi_x$  telles que

$$\{R_j, R_k\} = -\frac{1}{qB}\epsilon_{jk} \quad ; \quad \{\Pi_j, R_k\} = 0. \quad (5.11)$$

Ces coordonnées correspondent au centre de la trajectoire. Les coordonnées relatives correspondent au mouvement cyclotron rapide. On retrouve la limite semi-classique inhabituelle obtenue à fort champ magnétique.

### 5.1.3 Résistivité de Hall et invariance galiléenne

#### 5.1.4 Résistivité de Hall

Nous considérons par simplification des électrons dans un plan de taille  $L_x \times L_y$ , soumis à un champ magnétique transverse selon la direction  $z$ . L'équation du mouvement classique pour chaque électron est

$$m \frac{d\mathbf{v}}{dt} = (-e)(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}) - \frac{m}{\tau_e} \mathbf{v}. \quad (5.12)$$

1. Ces crochets sont définis par

$$\{F, G\} \sum_j \left( \frac{\partial F}{\partial r_j} \frac{\partial G}{\partial p_j} - \frac{\partial F}{\partial p_j} \frac{\partial G}{\partial r_j} \right)$$

où nous avons introduit une force d'amortissement rendant compte de la diffusion des électrons, caractérisée par le temps élastique  $\tau_e$ . En régime stationnaire, ces équations se résolvent en

$$\begin{cases} v_x = \frac{(-e)\tau_e}{m} (E_x + v_y B) \\ v_y = \frac{(-e)\tau_e}{m} (E_y - v_x B) \end{cases} . \quad (5.13)$$

Nous considérons la situation où le courant circule dans la direction  $x$ , ce qui permet d'imposer  $v_y = 0$ . Nous en déduisons

$$v_x = \frac{(-e)\tau_e}{m} E_x \quad ; \quad E_y = v_x B. \quad (5.14)$$

La densité de courant  $j_x$  dans la direction  $x$  s'écrit alors en fonction de la densité électronique  $n_e$

$$j_x = (-e)n_e v_x \Rightarrow E_x = \rho_{xx} j_x \quad \text{avec} \quad \rho_{xx} = \frac{m}{e^2 \tau_e n_e}. \quad (5.15)$$

Notons ici qu'en dimension deux, résistance et résistivité s'identifie, ce qui n'est pas le cas en dimension trois (de façon générale  $R = \rho L^{2-d}$ ). De façon analogue dans la direction  $y$ , la second équation de (5.14) nous permet d'identifier la résistivité transverse :

$$E_y = v_x B = \rho_{yx} j_x \quad \text{avec} \quad \rho_{yx} = -\frac{B}{en_e} = -\rho_{xy}. \quad (5.16)$$

Le comportement classique correspond à une résistivité finie, donnée par la formule de Drude habituelle, et une résistivité transverse linéaire en champ magnétique. L'apparition de plateau de  $\rho_{xy}$  accompagnée de l'annulation de  $\rho_{xx}$  requiert d'aller au delà de cette description semi-classique.

## 5.2 Hamiltonien quantique : les niveaux de Landau

### 5.2.1 Approche algébrique

On quantifie les crochets de Poisson précédent ( $\{A, B\} \rightarrow (\hbar/i)[\hat{A}, \hat{B}]$ ) en

$$[\Pi_j, \Pi_k] = i\hbar(-e)B\epsilon_{jk} \quad ; \quad [R_j, R_k] = i\frac{\hbar}{eB}\epsilon_{jk} \quad ; \quad [\Pi_j, R_k] = 0. \quad (5.17)$$

Ainsi  $B$  grand correspond également à une limite classique, correspondant à un mouvement cyclotron gelé ! Nous introduisons les deux opérateurs d'échelle suivant

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2\hbar eB}} (\Pi_x - i\Pi_y) = \frac{l_B}{\sqrt{2}\hbar} (\Pi_x - i\Pi_y) \quad (5.18)$$

$$\hat{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2\hbar eB}} (\Pi_x + i\Pi_y) = \frac{l_B}{\sqrt{2}\hbar} (\Pi_x + i\Pi_y) \quad (5.19)$$

qui satisfont les relations de commutation canoniques  $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = \mathbb{I}$ . Le Hamiltonien s'écrit alors simplement en termes de l'opérateur nombre de quanta :

$$H = \frac{1}{2m} \mathbf{\Pi}^2 = \hbar\omega_c \left( \hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right) \Rightarrow E_n = \left( n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega. \quad (5.20)$$

Les niveaux d'énergie  $E_n$  de ce Hamiltonien sont appelés *niveaux de Landau*. Ce sont des états d'énergie macroscopiquement dégénérés. En effet, la relation de commutation  $[H, R_j] = 0$  : dégénérescence par rapport à la position du centre des orbites, ce qui donne une dégénérescence macroscopique de chaque état propre du Hamiltonien. Cependant les  $\hat{\mathbf{R}}$  ne correspondent pas à des opérateurs positions classiques, en effet ils satisfont une relation d'incertitude (analogue à la relation d'incertitude de Heisenberg)

$$[\hat{R}_j, \hat{R}_k] = i \frac{\hbar}{eB} = i l_B^2, \quad \Rightarrow \quad \Delta R_x \Delta R_y = l_B^2 \quad (5.21)$$

qui implique que les positions (valeurs moyennes) des orbites semi-classiques sont associées chacune à une aire  $2\pi l_B^2$ . Nous nous attendons donc à une dégénérescence de chaque niveau de Landau de  $L_x L_y / 2\pi l_B^2$ .

Pour aller plus loin et déterminer les états propres de  $\hat{H}$ , il faut faire un choix de potentiel vecteur  $\mathbf{A}$ , c'est-à-dire un choix de jauge. La forme précise des états propres du Hamiltonien dépend de ce choix de jauge, ce qui n'est pas le cas des éléments de matrice d'observables physiques. Cependant, les niveaux de Landau étant formellement infiniment dégénérés, un changement *a posteriori* de bases d'états propres n'est pas aisé. Il convient plutôt de choisir dès le départ une jauge adaptée à la géométrie du problème considéré. Nous allons étudier dans la suite de ce chapitre deux choix de jauge naturel, adapté à des géométrie avec soit invariance par translation dans une direction, soit invariance par rotation.

## 5.2.2 Etats propres dans la jauge de Landau

Nous choisissons d'écrire le Hamiltonien à un électron de notre problème pour le choix de jauge de Landau :  $\mathbf{A}(\hat{\mathbf{r}}) = B(0, x, 0)$ . Le Hamiltonien s'écrit alors

$$\hat{H} = \frac{(\hat{\mathbf{p}} + e\mathbf{A}(\hat{\mathbf{r}}))^2}{2m} = \frac{1}{2m} \left( \hat{p}_x^2 + (\hat{p}_y + eB\hat{x})^2 \right). \quad (5.22)$$

$\hat{H}$  commute donc avec  $p_y$ , et ne brise donc pas la symétrie de translation selon  $y$  : ce choix de jauge est particulièrement adapté pour préserver cette symétrie de translation (notons que les deux symétries de translation dans les directions  $x$  et  $y$  ne peuvent être simultanément préservées). Cette propriété nous autorise à chercher les états propres sous la forme d'onde plane dans la direction  $y$  :

$$\psi_{k,n}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{L_y}} e^{iky} \phi_n(x). \quad (5.23)$$

La fonction  $\phi_n(x)$  satisfait l'équation aux valeurs propres réduite

$$\left[ \frac{1}{2m} \hat{p}_x^2 + \frac{1}{2} m\omega_c^2 (x - x_k^{(0)})^2 \right] \phi_n(x) = E_n \phi_n(x) \quad \text{avec} \quad x_k^{(0)} = -\frac{\hbar k}{eB} = -k l_B^2. \quad (5.24)$$

Il s'agit là d'une équation de Schrödinger pour un Hamiltonien d'un oscillateur harmonique unidimensionnel dans la direction  $x$ . Ses énergies propres et donc le spectre des états de Landau est donné par

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega_c \quad \text{avec} \quad \omega_c = \frac{eB}{m}. \quad (5.25)$$

En prenant pour  $\phi_n(x)$  les fonctions propres de l'oscillateur harmonique 1D (reliés aux polynômes de Hermite  $H_n$ ), nous obtenons les états propres de Landau

$$\psi_{k,n}(\mathbf{r}) = \frac{e^{iky}}{\sqrt{L_y}} \exp\left[-\frac{(x - x_k^{(0)})^2}{2l_B^2}\right] H_n\left(\frac{(x - x_k^{(0)})}{l_B}\right) \quad (5.26)$$

avec  $l_B^2 = \hbar/(m\omega_c)$ . En particulier, les fonctions d'onde du premier niveau de Landau sont dans cette jauge

$$\psi_{k,0}(\mathbf{r}) = \frac{e^{iky}}{\sqrt{L_y}} \exp\left[-\frac{(x - x_k^{(0)})^2}{2l_B^2}\right] \quad (5.27)$$

La densité d'états s'exprime selon

$$n(E) = \frac{1}{L_x L_y} \sum_{n,k} \delta(E - E_n) \quad (5.28)$$

La dégénérescence de chaque niveau de Landau  $E_n$  provient donc des choix de moment  $k$  ou encore des position  $x_k^{(0)}$  des états de Landau. Avec des conditions aux limites périodiques selon la direction  $y$  et des coordonnées selon  $x$  s'étendant de  $-L_x$  à  $0$ , nous obtenons

$$0 \leq x_k^{(0)} \leq L_x \Leftrightarrow 0 \leq k = m \frac{2\pi}{L_y} \leq \frac{L_x}{l_B^2} \quad (5.29)$$

$$\Rightarrow n(E_n) = n_B = \frac{1}{2\pi l_B^2}. \quad (5.30)$$

Ainsi pour chaque niveau de Landau  $n$ , à chaque état d'indice  $m$  est attribué une aire  $2\pi l_B^2$  qui correspond à l'aire située entre les centres de deux orbitales voisines (voir la figure 5.5).

On peut alors définir le facteur de remplissage des niveaux de Landau en fonction de la densité électronique du puits :

$$\nu = \frac{n_e}{n_B} = \frac{N_e}{B_B} \quad \text{avec} \quad N_B = \frac{BL_x L_y}{h/e} = \frac{\Phi}{\phi_0}. \quad (5.31)$$

Ainsi le nombre d'électrons par niveaux de Landau correspond au nombre de quantum de flux  $\phi_0 = h/e$  traversant l'échantillon. L'effet Hall quantique entier correspond à l'apparition de plateaux de conductivité de Hall autour des niveaux de Landau entièrement remplis, c'est-à-dire pour des valeurs entières de  $\nu$ . Par opposition,

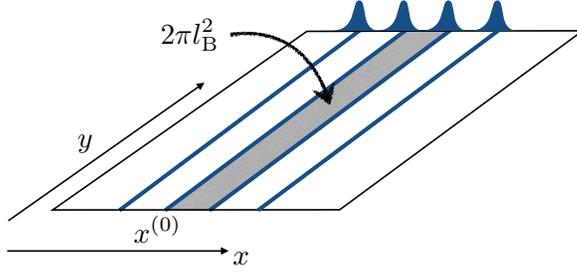


FIGURE 5.5 – Représentation des états propres d'un niveau de Landau dans la jauge de Landau.

l'effet Hall quantique fractionnaire correspond à des plateaux de conductivité apparaissant autour de valeur fractionnaire du remplissage  $\nu$ . La densité typique dans un puits de GaAs / AlGaAs est de l'ordre de  $10^{15}m^{-2}$ , ce qui donne un premier niveau de Landau rempli pour des champs magnétiques de l'ordre de  $B \simeq 4T$ . La valeur classique de la résistivité de Hall (5.16) peut se réécrire en terme du facteur de remplissage  $\rho_{xy} = (B/en_e) = (h/e^2)\nu^{-1}$  où  $h/e^2 \simeq 25\Omega$  est le quantum de résistivité. La quantification de la résistivité peut donc s'expliquer par une quantification du facteur de remplissage  $\nu$ , conséquence du spectre de Landau.

## 5.3 Réponse à un champ électrique

### 5.3.1 Invariance galiléenne

En présence d'invariance galiléenne, le tenseur de résistivité est le même qu'en physique classique. En effet, le changement de référentiel  $\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r}' = \mathbf{r} - \mathbf{v}t$  avec  $\mathbf{v} = \mathbf{E} \times \mathbf{B}/B^2$  se traduit sur la fonction d'onde à  $N$  électrons par le changement de jauge

$$\Psi(\{\mathbf{r}'_i\}; t) \rightarrow \Psi'(\{\mathbf{r}_i\}; t) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \sum_{j=1}^N \theta(\mathbf{r}_j, t)\right) \Psi(\{\mathbf{r}_i\}; t) \quad (5.32)$$

où pour le choix de jauge symétrique  $\mathbf{A} = \frac{1}{2}\mathbf{B} \times \mathbf{r}$  le changement de phase s'écrit

$$\theta(\mathbf{r}_j, t) = m\mathbf{v} \cdot \mathbf{r}_j - \frac{1}{2}(m\mathbf{v}^2 + e\mathbf{E} \cdot \mathbf{r}_j)t. \quad (5.33)$$

Dans le référentiel évoluant à la vitesse  $\mathbf{v}$ ,  $\Psi'$  satisfait une équation de Schrödinger sans champ électrique qui a été absorbé dans le changement de référentiel. Si  $\hat{\mathbf{J}}$  est l'opérateur courant, cette invariance de jauge nous ramène à un problème sans champ électrique et implique

$$\langle \Psi | \hat{\mathbf{J}} | \Psi \rangle = \langle \Psi' | \hat{\mathbf{J}} | \Psi' \rangle + n_e(-e)\mathbf{v} = n_e(-e)\mathbf{v}. \quad (5.34)$$

Nous retrouvons donc le résultat de l'effet Hall classique. La brisure de l'invariance galiléenne est donc nécessaire pour l'obtention d'une quantification de la conductivité de Hall.

### 5.3.2 Calcul explicite dans le premier niveau de Landau

Pour simplifier notre étude, nous considérons l'évolution des états propres du premier niveau de Landau suite à l'application d'un champ électrique. Afin de préserver l'invariance par translation dans la direction  $y$  utilisée dans le paragraphe 5.2.2, nous choisissons un champ électrique dirigé dans la direction  $x$ , soit un potentiel  $V(x) = +eEx$ . Nous pouvons toujours chercher nos états propres sous la forme d'onde plane dans la direction  $y$ , mais avec un équation aux valeurs propres (5.24) modifiée selon

$$\left[ \frac{1}{2m} \hat{p}_x^2 + \frac{1}{2} m \omega_c^2 (x - x_k^{(0)})^2 + eEx \right] \phi_n(x) = E_0 \phi_0(x) \quad (5.35)$$

$$\Rightarrow \left[ \frac{1}{2m} \hat{p}_x^2 + \frac{1}{2} m \omega_c^2 (x - \tilde{x}_k^{(0)})^2 + eE \tilde{x}_k^{(0)} + \frac{1}{2} m v_0^2 \right] \phi_n(x) = E_0 \phi_0(x). \quad (5.36)$$

La position des fonctions d'onde est donc modifiée par le champ électrique dans la direction  $x$  selon

$$\tilde{x}_k^{(0)} = x_k^{(0)} - \frac{eE}{m\omega_c^2} \quad (5.37)$$

et l'énergie des états propres dépend maintenant de la position des états propres :

$$E_{0,k} = \frac{1}{2} \hbar \omega_c + eE \tilde{x}_k^{(0)} + \frac{1}{2} m v_0^2 \quad \text{avec} \quad v_0 = -\frac{E}{B}. \quad (5.38)$$

En l'absence de champ électrique, les énergies sont indépendantes de la position des fonctions propres et donc du moment  $k$  selon  $y$  : la vitesse de groupe est nulle et il n'y a pas de courant. La variation d'énergie induite par le champ électrique donne lieu à une vitesse de groupe selon  $y$  modifiée :

$$v_y = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E_{0,k}}{\partial k} = \frac{eE}{\hbar} \frac{\partial x_k^{(0)}}{\partial k} = \frac{eE}{\hbar} (-l_B^2) = -\frac{E}{B} = v_0. \quad (5.39)$$

Tous les états propres acquièrent donc la même vitesse de groupe indépendante de  $k$  en présence d'un champ électrique, ce qui nous permet bien de retrouver le résultat de l'invariance galiléenne (5.34).

## 5.4 Argument de Laughlin et géométrie de Corbino

A la suite de R. Laughlin, nous considérons maintenant la géométrie dite de Corbino correspondant à un disque percé représentée sur la partie gauche de la figure 5.6. Cette géométrie peut être décrite à partir d'un échantillon rectangulaire sur lequel on applique des conditions aux limites périodiques dans la direction  $y$ . L'application d'un flux  $\delta\Phi$  à l'intérieur de l'échantillon ne modifie donc pas la facteur de remplissage des niveaux de Landau. Il induit cependant un déphasage sur l'ensemble des électrons, suivant le principe rencontré lors de l'effet Aharonov-Bohm au chapitre 2. Ce flux peut être pris en considération à l'aide d'une variation particulière du

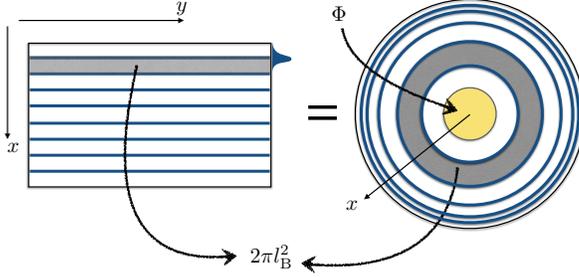


FIGURE 5.6 – Géométrie de Corbino (à droite) obtenue en appliquant des conditions aux limites périodiques dans la direction  $y$  dans la géométrie correspondant à la jauge de Landau précédemment décrite.

potentiel  $\mathbf{A}$

$$\mathbf{A} = (0, Bx) \rightarrow (0, Bx + \delta A_y) \quad \text{avec} \quad \delta A_y = \frac{\delta\Phi}{L_y}. \quad (5.40)$$

Nous supposons que lors de l'application lente de ce flux magnétique, l'ensemble d'électrons demeure dans son état fondamental  $|\Psi_0\rangle$ .

Revenons maintenant aux états propres à une particule obtenue dans la jauge de Landau. Les conditions aux limites périodiques dans la direction  $y$  nous imposent une quantification du moment dans cette direction  $k_y = m2\pi/L_y$  où  $m$  est un entier compris entre 0 et  $L_x L_y / (2\pi l_B^2)$ . Cette quantification localise les centres des états propres de Landau sur les sites  $x^{(0)}(m) = 2\pi m l_B^2 / L_y$ . D'après la jauge (5.40), l'application d'un flux  $\delta\Phi$  à l'intérieur du disque peut être absorbée par un translation radiale  $x \rightarrow x + \delta\Phi / (BL_y)$ . Ainsi l'application d'un flux  $\delta\Phi$  translate les états propres selon

$$x^{(0)}(m) = 2\pi m \frac{l_B^2}{L_y} \rightarrow 2\pi \frac{l_B^2}{L_y} m + \frac{\delta\Phi}{BL_y} = 2\pi \frac{l_B^2}{L_y} \left( m + \frac{\delta\Phi}{\phi_0} \right) \quad (5.41)$$

où nous avons introduit le quantum de flux  $\phi_0 = h/e$ . Ainsi lors de l'application d'un quantum de flux  $\phi_0 = h/e$  à l'intérieur du disque, tous les états propres sont tradlatés de  $m$  à  $m + 1$  : le spectre à un électron est donc bien invariant par l'application de ce quantum de flux en accord avec l'invariance de jauge de la mécanique quantique (voir le paragraphe 2.1.2). L'état fondamental est donc inchangé lors de l'application de ce quantum de flux. Cependant, lors de l'application du flux,  $\nu = n$  charges ont été transférées du bord intérieur au bord extérieur du disque : un état par niveau de Landau rempli. Ce transfert de charge correspond bien à un courant transverse. En effet, la variation du potentiel vecteur induit l'apparition d'un courant de charge dont la densité se déduit du couplage minimal au potentiel électromagnétique

$$j_y = -\frac{\delta \langle \Psi_0 | \hat{H} | \Psi_0 \rangle}{\delta A_y(\mathbf{r})} = -\frac{1}{L_y} \frac{\delta \langle \Psi_0 | \hat{H} | \Psi_0 \rangle}{\delta\Phi}. \quad (5.42)$$

Après l'application d'un quantum de flux nous avons

$$\Delta \langle \Psi_0 | \hat{H} | \Psi_0 \rangle = \nu(-e)(V(L_x) - V(0)), \quad (5.43)$$

soit un courant

$$I_y = L_y j_y = -\frac{\Delta \langle \Psi_0 | \hat{H} | \Psi_0 \rangle}{\phi_0} = v \frac{e^2}{h} (V(L_x) - V(0)), \quad (5.44)$$

qui correspond bien à une conductivité de Hall quantifiée

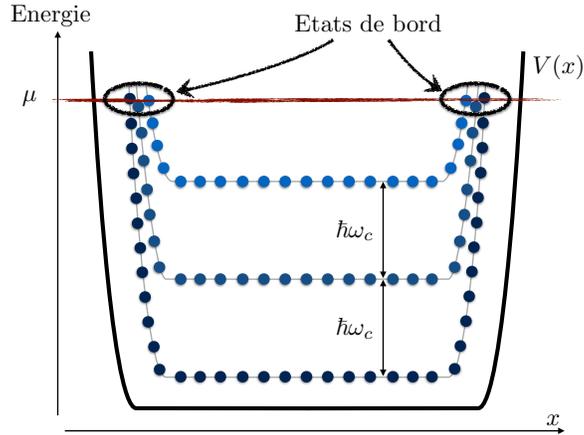
$$\sigma_{xy} = v \frac{e^2}{h}. \quad (5.45)$$

L'intérêt de cet argument vient de sa généralité : il repose de façon fondamentale sur l'invariance de jauge, et s'applique si des perturbations telles que du désordre ou des interactions entre électrons sont envisagées.

## 5.5 Etats de Bord et formalisme de Landauer

### 5.5.1 Notion d'état de bord

FIGURE 5.7 – Représentation de l'évolution des niveaux de Landau dans la jauge de Landau en présence d'un potentiel de confinement dans la direction  $x$ . Ce confinement donne naissance au niveau du potentiel chimique à des états confinés sur les bords.



En présence d'un potentiel de confinement  $V(x)$  lentement variable à l'échelle de  $l_B$  dans la direction  $x$ , les états de Landau précédemment déterminés ont une énergie modifiée de  $V(x_{k_y}^{(0)})$ . Lorsque le potentiel chimique  $\mu$  se trouve entre deux niveaux de Landau  $E_n$  et  $E_{n+1}$ , chaque niveau de Landau  $E_{m \leq n}$  donne donc naissance à un état électronique au niveau du potentiel chimique. Ces états sont localisés sur les bords de l'échantillon. Leur vitesse de groupe  $\mathbf{v} \simeq \nabla V \times \mathbf{B}$  est dirigée dans la direction  $y$ .

Plus précisément l'équation de Schrödinger (5.24) devient

$$\left[ \frac{1}{2m} \hat{p}_x^2 + \frac{1}{2} m \omega_c^2 (x - x_{k_y}^{(0)})^2 + V(x) \right] \phi_n(x) = E_n \phi_n(x). \quad (5.46)$$

Le développement de  $V(x)$  au voisinage du centre de la fonction d'onde non perturbé  $x_{k_y}^{(0)}$

$$V(x) \simeq V(x_{k_y}^{(0)}) + (x - x_{k_y}^{(0)})V'(x_{k_y}^{(0)}) \quad (5.47)$$

conduit au décalage de la position des états propres

$$\delta x_{k_y}^{(0)} = \frac{1}{m\omega_c^2} V'(x_{k_y}^{(0)}) \quad (5.48)$$

et un décalage des énergie

$$E = V(x_{k_y}^{(0)}) - \frac{1}{2} m\omega_c^2 (\delta x_{k_y}^{(0)})^2 \quad (5.49)$$

### 5.5.2 Formalisme de Landauer-Büttiker

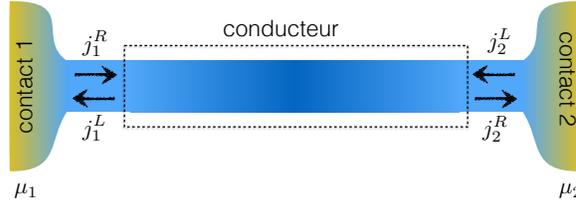


FIGURE 5.8 – Représentation schématique d'un conducteur idéal ne comportant qu'un seul mode de conduction. Les deux contacts électriques sont modélisés comme des réservoirs d'électrons à l'équilibre, aux potentiels chimiques  $\mu_1$  et  $\mu_2$ . Dans l'approche de Landauer, le conducteur est décrit par sa matrice de coefficient de transmission reliant les amplitudes de courant sortant aux entrants.

Il s'agit d'un formalisme adapté au transport quasi-unidimensionnel, ce qui est le cas des canaux de bord de l'effet Hall quantique. L'idée générale de cette approche est de relier la conductance à la matrice de diffusion du conducteur. Nous considérons un conducteur idéal ne possédant qu'un seul mode de transmission, non dégénéré (par exemple complètement polarisé en spin).

La matrice qui relie les courants de probabilité (ou de charge si tous les porteurs sont de même nature) s'exprime selon

$$\begin{pmatrix} j_1^L \\ j_2^R \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} R & T \\ T & R \end{pmatrix} \begin{pmatrix} j_1^R \\ j_2^L \end{pmatrix} ; \quad T = |t|^2 ; \quad R = 1 - T. \quad (5.50)$$

Le courant qui sort d'un des deux réservoirs est à l'équilibre, et satisfait donc

$$j_1^R = (-e) \int \frac{dk}{(2\pi)} v_k f_{\mu_1}(E_{\mathbf{k}}) = (-e) \int \frac{dk}{(2\pi)} \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E_{\mathbf{k}}}{\partial k} f_{\mu_1}(E_{\mathbf{k}}) \quad (5.51)$$

$$= \frac{(-e)}{h} \int dE f_{\mu_1}(E) \quad (5.52)$$

où  $f_{\mu}(E) = (1 + \exp((E - \mu)/(k_B T)))^{-1}$  est le facteur de remplissage de Fermi-Dirac, sans facteur de dégénérescence de spin. En utilisant la relation  $j_2^R = T j_1^R + (1 - T) j_2^L$  issue de (5.50), nous en déduisons le courant net circulant à travers le fil

$$I = j_2^R - j_2^L = T(j_1^R - j_2^L) = T \frac{(-e)}{h} \int dE [f_{\mu_1}(E) - f_{\mu_2}(E)]. \quad (5.53)$$

A température nulle ou suffisamment basse (devant la température de Fermi  $T_F$ ), cette dernière intégrale se simplifie

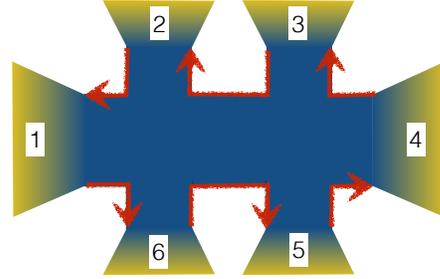
$$I = T \frac{(-e)}{h} (\mu_1 - \mu_2) = T \frac{e^2}{h} (V_1 - V_2). \quad (5.54)$$

Cette expression nous donne une conductance

$$G = \frac{I}{\Delta V} = T \frac{e^2}{h} = T G_0, \quad (5.55)$$

dans laquelle nous avons défini le quantum de conductance  $G_0 = e^2/h$ . Si le fil comporte plusieurs modes électroniques, cette formule se généralise en  $G = \sum_{n,n'} T_{n',n} G_0$  avec  $T_{n',n}$  le coefficient de transmission d'un courant du mode  $n$  vers le mode  $n'$ .

FIGURE 5.9 – Géométrie de barre de Hall servant à mesurer les propriétés de transport en régime d'effet Hall quantique. Chaque contact est caractérisé par le potentiel chimique du gaz d'électrons, ainsi que le courant venant du contact et entrant dans l'échantillon.



Cette approche se généralise aux géométries expérimentales dans lesquelles des contacts électriques séparés sont utilisés pour mesurer les tensions et les courants. La théorie de la réponse linéaire nous permet alors d'écrire le courant venant du contact  $\alpha$  comme la somme des contributions des différences de potentiel chimiques entre  $\alpha$  et les  $p-1$  autres contacts  $\beta \neq \alpha$ . Pour chaque paire de contact l'approche précédente reste valide et nous obtenons une équation qui généralise (5.54) :

$$I_{\alpha} = \frac{(-e)}{h} \sum_{\beta \neq \alpha} T_{\alpha\beta} (\mu_{\beta} - \mu_{\alpha}). \quad (5.56)$$

La situation d'équilibre correspond à tous les potentiels chimiques  $\mu_{\alpha}$  égaux : dans ce cas, les différents courants sont nuls. Nous ne nous intéressons donc qu'aux écarts de potentiels chimiques par rapport à l'équilibre, ou de façon équivalente aux différences des potentiels chimiques par rapport à une origine choisie par exemple en

$\mu_6$ . De même, la conservation de la charge nous impose que la somme des courants  $I_\alpha$  est nulle : il est suffisant de ne considérer que  $p - 1$  courants.

Dans le cas d'une phase d'effet Hall quantique, nous savons que pour un niveau de remplissage  $\nu = n$  entier nous avons  $n$  états de bord qui circulent entre les contacts, dans un sens imposé par le champ magnétique, comme représenté sur la figure 5.9. Dans cette situation, la matrice des transmissions de courant s'écrit

$$\begin{pmatrix} I_1 \\ I_2 \\ I_3 \\ I_4 \\ I_5 \\ I_6 \end{pmatrix} = \frac{(-e)}{h} \begin{pmatrix} -n & n & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -n & n & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -n & n & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -n & n & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -n & n \\ n & 0 & 0 & 0 & 0 & -n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mu_1 \\ \mu_2 \\ \mu_3 \\ \mu_4 \\ \mu_5 \\ \mu_6 \end{pmatrix}. \quad (5.57)$$

D'après ce qui précède, nous pouvons en déduire un système d'équation avec une matrice inversible en considérant les différences de potentiel chimique  $\mu_\alpha - \mu_6$  et les courants  $I_1, \dots, I_5$  qui définissent complètement le problème :

$$\begin{pmatrix} I_1 \\ I_2 \\ I_3 \\ I_4 \\ I_5 \end{pmatrix} = \frac{n(-e)}{h} \begin{pmatrix} -1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mu_1 - \mu_6 \\ \mu_2 - \mu_6 \\ \mu_3 - \mu_6 \\ \mu_4 - \mu_6 \\ \mu_5 - \mu_6 \end{pmatrix} \quad (5.58)$$

qui s'inverse en

$$\begin{pmatrix} \mu_1 - \mu_6 \\ \mu_2 - \mu_6 \\ \mu_3 - \mu_6 \\ \mu_4 - \mu_6 \\ \mu_5 - \mu_6 \end{pmatrix} = \frac{h}{n(-e)} \begin{pmatrix} -1 & -1 & -1 & -1 & -1 \\ 0 & -1 & -1 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I_1 \\ I_2 \\ I_3 \\ I_4 \\ I_5 \end{pmatrix}. \quad (5.59)$$

Nous pouvons maintenant spécifier les conditions expérimentales choisies : dans la

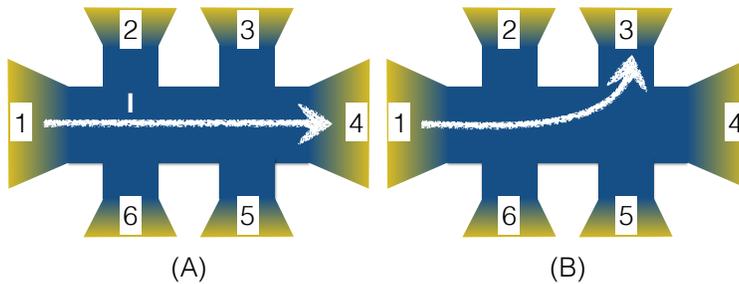


FIGURE 5.10 – Deux configurations de mesures des conductivités dans une barre de Hall.

configuration (A) de la figure 6.1, le courant est mesuré entre les contacts 1 et 4. Il est donc choisi nul aux autres contacts :  $I_2 = I_3 = I_5 = I_6 = 0$ . En reportant dans l'équation (5.59) nous en déduisons

$$\begin{pmatrix} \mu_1 - \mu_6 \\ \mu_2 - \mu_6 \\ \mu_3 - \mu_6 \\ \mu_4 - \mu_6 \\ \mu_5 - \mu_6 \end{pmatrix} = \frac{h}{n(-e)} \begin{pmatrix} -1 & -1 & -1 & -1 & -1 \\ 0 & -1 & -1 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -I \\ 0 \\ 0 \\ +I \\ 0 \end{pmatrix} = -\frac{hI}{ne} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (5.60)$$

Nous en déduisons donc que les bords de l'échantillon se scindent en deux équipotentielles :  $\mu_1 = \mu_5 = \mu_6$  et  $\mu_2 = \mu_3 = \mu_4$ . Seules deux mesures sont ainsi possibles :

$$G_{\text{Hall}} = \frac{I}{V_6 - V_2} = n G_0 \quad (5.61)$$

et

$$G_{14,23} = G_{14,56} = \frac{I}{V_2 - V_3} = 0. \quad (5.62)$$

Dans la configuration (B) : nous posons  $I = I_3 = -I_1$  et tous les autres courants nuls, ce qui conduit à

$$\begin{pmatrix} \mu_1 - \mu_6 \\ \mu_2 - \mu_6 \\ \mu_3 - \mu_6 \\ \mu_4 - \mu_6 \\ \mu_5 - \mu_6 \end{pmatrix} = \frac{h}{n(-e)} \begin{pmatrix} -1 & -1 & -1 & -1 & -1 \\ 0 & -1 & -1 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -I \\ 0 \\ +I \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = -\frac{hI}{ne} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (5.63)$$

Nous retrouvons à nouveau deux équipotentielles de part et d'autre de la ligne de courant, et les deux valeurs précédemment identifiés pour la conductance longitudinale et transverse. De façon plus générale, ce formalisme de Landauer-Büttiker nous indique que les contacts situés de part et d'autre de la "ligne de courant"  $\mu_{\text{in}} \rightarrow \mu_{\text{out}}$  s'équilibrent aux deux potentiels chimiques  $\mu_{\text{in}}$  et  $\mu_{\text{out}}$  : seuls deux conductances sont possibles.

## 5.6 Transition entre états d'effet Hall quantique et percolation quantique

### 5.7 Niveaux de Landau de Fermions de Dirac

#### 5.7.1 Niveaux de Landau anormaux

On s'intéresse à l'effet Hall quantique dans le graphène. Nous avons vu qu'à basse énergie, les excitation du graphène étaient décrites par des équations du mouvement relativistes, correspondant dans une des deux vallées au Hamiltonien de Dirac (4.47). En présence d'un champ magnétique, ce Hamiltonien devient **Il s'agit**

d'un abus de notation :  $\hbar k$  et  $\Pi$  ne s'identifient pas en général dans un cristal. Sauf si la connexion de Berry est nulle...

$$H(\mathbf{q}) = v_F \left[ \hat{\sigma}_x \otimes \hat{\Pi}_x + \hat{\sigma}_y \otimes \hat{\Pi}_y \right] \quad \text{avec} \quad \hat{\Pi}_i = \hbar k_i + eA_i(\mathbf{r}) \quad (5.64)$$

$[\Pi_x, \Pi_y] = i\hbar(-e)B$ . On introduit les opérateurs d'échelle

$$\hat{a} = \frac{l_B}{\sqrt{2}\hbar} (\hat{\Pi}_x - i\hat{\Pi}_y) \quad ; \quad \hat{a}^\dagger = \frac{l_B}{\sqrt{2}\hbar} (\hat{\Pi}_x + i\hat{\Pi}_y) \quad (5.65)$$

qui satisfont

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = i \frac{l_B^2}{\hbar^2} [\hat{\Pi}_x, \hat{\Pi}_y] = \mathbb{I}, \quad (5.66)$$

pour obtenir le Hamiltonien

$$\hat{H} = \hbar\omega_0 \begin{pmatrix} 0 & \hat{a} \\ \hat{a}^\dagger & 0 \end{pmatrix} \quad \text{avec} \quad \hbar\omega_0 = \hbar v_F \frac{\sqrt{2}}{l_B}. \quad (5.67)$$

On considère les états

$$|\psi_{\eta,n}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} |n-1\rangle \\ \eta |n\rangle \end{pmatrix} \quad (5.68)$$

où  $\eta = \pm 1$  et les états  $|n\rangle$  sont les quanta associés aux opérateurs d'échelle :  $\sqrt{n!} |n\rangle = (\hat{a}^\dagger)^n |0\rangle$ , soit  $\hat{a}^\dagger |n\rangle = \sqrt{n+1} |n+1\rangle$  et  $\hat{a} |n\rangle = \sqrt{n} |n-1\rangle$ . L'équation aux valeurs propres s'écrit alors

$$\hat{H} |\psi_{\eta,n}\rangle = \frac{\hbar\omega_0}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \eta \hat{a} |n\rangle \\ \hat{a}^\dagger |n-1\rangle \end{pmatrix} = \sqrt{n} \frac{\hbar\omega_0}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \eta |n-1\rangle \\ |n\rangle \end{pmatrix} = \eta \sqrt{n} \hbar\omega_0 |\psi_{\eta,n}\rangle. \quad (5.69)$$

On obtient donc le spectre

$$E_n = \pm \sqrt{n} \hbar\omega_0 \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (5.70)$$

Dégénérescence 2 vallées  $\times$  2 spins. Sauf pour  $n = 0$  Pour  $n = 0$ , état propre

$$|\psi_{\eta,0}\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ \eta |0\rangle \end{pmatrix} \quad ; \quad \hat{H} |\psi_{\eta,0}\rangle = \hbar\omega_0 \begin{pmatrix} \eta \hat{a} |0\rangle \\ 0 \end{pmatrix} = 0. \quad (5.71)$$

Le niveau de Landau est remarquable : il est entièrement localisé sur un des deux sous-réseaux (ici  $B$ ). Au point  $\mathbf{K}'$  il se trouve localisé sur le sous-réseau  $A$ . En conséquence, il n'y a pas dégénérescence de vallée pour le niveau de Landau : la décomposition des fonctions d'onde sur les deux sous-réseau est une décomposition sur les vallées. Cet état n'est que 2 fois dégénéré (de spin).

Ainsi niveau de Landau entièrement rempli si  $n_e = (4n + 2)n_B$  où  $n$  est un entier de signe quelconque. L'étude précédente de l'effet Hall quantique entier nous donne

$$\sigma_{xy} = \nu \frac{e^2}{h} = (4n + 2) \frac{e^2}{h}. \quad (5.72)$$

### 5.7.2 Relation en phase de Berry et niveaux de Landau

**Electrons non relativistes.** La relation de quantification à la Bohr-Sommerfeld utilise le caractère monovaluée des fonctions d'onde en mécanique quantique. Dans le cas d'une onde plane, cela revient à imposer que la variation de phase le long d'un chemin fermé  $C$  est un multiple demi-entier de  $2\pi$  :

$$\int_C d\mathbf{r} \cdot \frac{1}{\hbar} \mathbf{p} = 2\pi n \quad ; \quad n \in \mathbb{Z}. \quad (5.73)$$

En présence d'un champ magnétique,  $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k} - e\mathbf{A}$  et cette relation est modifiée en

$$\int_C d\mathbf{r} \cdot \mathbf{k} - \frac{e}{\hbar} \int_C d\mathbf{r} \cdot \mathbf{A} = 2\pi n \quad ; \quad n \in \mathbb{Z}. \quad (5.74)$$

Les équations du mouvement semi-classiques nous donnent les orbites cyclotron :

$$\hbar \dot{\mathbf{k}} = (-e)\dot{\mathbf{r}} \times \mathbf{B} \quad \Rightarrow \quad \hbar \mathbf{k} = (-e) \mathbf{r} \times \mathbf{B} + \hbar \mathbf{k}_0. \quad (5.75)$$

Nous en déduisons

$$\int_C d\mathbf{r} \cdot \mathbf{k} = \frac{(-e)}{\hbar} \int_C d\mathbf{r} \cdot (\mathbf{r} \times \mathbf{B}) = \frac{2e}{\hbar} \Phi \quad (5.76)$$

où nous avons reconnu le potentiel vecteur en jauge symétrique  $\mathbf{A}_s = \mathbf{B} \times \mathbf{r}/2$ , et  $\Phi$  est le flux magnétique contenu à l'intérieur de l'orbite cyclotron. Au total, l'équation (5.74) se réécrit

$$\Phi = n \frac{h}{e} = n \phi_0 \quad (5.77)$$

Cette condition est bien en accord avec la détermination de la dégénérescence des niveaux de Landau précédemment identifiée. Nous en déduisons la géométrie des orbites semi-classiques, et ainsi de l'énergie

$$\pi r^2 B = n \frac{h}{e} \quad \Rightarrow \quad \pi \frac{\hbar^2 k^2}{(eB)^2} B = n \frac{h}{e} \quad \Rightarrow \quad E_n = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = n \frac{heB}{2\pi m} = n \hbar \omega_c. \quad (5.78)$$

Cet argument semi-classique ne capture pas l'énergie de point zéro des niveaux de Landau : afin d'en tenir compte, il convient de rajouter un indice de Maslov dans la condition de quantification de Bohr-Sommerfeld :

$$\int_C d\mathbf{r} \cdot \mathbf{k} - \frac{e}{\hbar} \int_C d\mathbf{r} \cdot \mathbf{A} = 2\pi \left( n + \frac{1}{2} \right) \quad ; \quad n \in \mathbb{Z}. \quad (5.79)$$

Nous retrouvons alors les énergies de Landau correctes par cet argument semi-classique.

**Electrons relativistes.** Dans le graphène, les orbites fermées autour des points de Dirac sont associées à une phase de Berry de  $\pi$  : l'équation (5.79) contient maintenant un terme géométrique additionnel :

$$\int_C d\mathbf{r} \cdot \mathbf{k} - \frac{e}{\hbar} \int_C d\mathbf{r} \cdot \mathbf{A} + \pi = 2\pi \left( n + \frac{1}{2} \right) ; \quad n \in \mathbb{Z}. \quad (5.80)$$

Nous retrouvons alors une relation de quantification (5.78) sans indice de Maslov :  $k = \sqrt{2neB/\hbar}$ . En reportant dans la relation de dispersion des fermions de Dirac, nous obtenons

$$E = \pm \hbar v_F k \quad \Rightarrow \quad E_n = \pm v_F \sqrt{2ne\hbar B} = \hbar v_F \frac{\sqrt{2n}}{l_B} \quad (5.81)$$

qui correspond bien aux niveaux déterminés en (5.70).

## 5.8 Effet Hall quantique fractionnaire

### 5.8.1 Etats propres de Landau dans la jauge symétrique

Dans cette partie, nous choisissons un choix de direction de *champ magnétique*  $\mathbf{B}$  dans la direction  $-\hat{z}$ , contrairement au reste de ce chapitre ! Il s'agit d'un choix conventionnel, qui permet de manipuler des états propres basés sur des fonctions analytiques plutôt qu'anti-analytiques. Nous considérons ici un potentiel vecteur correspondant à la jauge dite symétrique

$$\mathbf{A} = \frac{1}{2} \mathbf{B} \times \mathbf{r} \quad \Rightarrow \quad A_x = +\frac{1}{2} B y ; A_y = -\frac{1}{2} B x. \quad (5.82)$$

De façon manifeste ce choix de jauge préserve l'invariance par rotation. La Hamiltonien

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left( \hat{\mathbf{p}} + \frac{e}{2} \mathbf{B} \times \mathbf{r} \right)^2 \quad (5.83)$$

se réécrit alors

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \hat{\mathbf{p}}^2 + \frac{1}{8} m \omega_c^2 \mathbf{r}^2 - \frac{1}{2} \omega_c \hat{L}_z \equiv \hat{H}_0 - \frac{1}{2} \omega_c \hat{L}_z. \quad (5.84)$$

où  $\hat{L}_z$  est l'opérateur moment cinétique orbital selon  $z$  :  $\hat{L}_z = \hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x$ . Les deux premiers opérateurs de cette expression définissent le Hamiltonien  $\hat{H}_0$  d'un oscillateur harmonique de dimension deux. Son spectre est donc  $(n_x + n_y + 1)(\hbar\omega_c/2)$  correspondant aux états propres  $|n_x, n_y\rangle$  où  $n_x, n_y$  sont les quanta dans les directions  $x$  et  $y$ . Ces états propres s'expriment en fonction de polynômes de Hermite<sup>2</sup> :

$$\langle x, y | n_x, n_y \rangle = H_{n_x}(x) H_{n_y}(y) \exp\left(-\frac{x^2 + y^2}{4l_B^2}\right). \quad (5.85)$$

2.  $H_n(x) = (-1)^n e^{x^2/2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2/2}$ .

Pour déterminer les états propres de  $\hat{H}$ , il nous reste maintenant à déterminer les états propres communs à cet oscillateur harmonique et au moment  $\hat{L}_z$ . En coordonnées polaires, cet opérateur vaut simplement  $\hat{L}_z = -i\hbar\partial/\partial\phi$ . Ses fonctions propres sont donc de la forme  $f(r)\exp(im\phi)$ , de valeur propre  $\hbar m$ .

Considérons maintenant les premiers niveaux de l'oscillateur harmonique :

- L'état fondamental de l'oscillateur harmonique  $|0, 0\rangle$  est bien état propre de  $\hat{L}_z$  de valeur propre 0.
- Les premiers états excités de l'oscillateur harmonique sont composés de  $|1, 0\rangle, |0, 1\rangle$ . Nous identifions deux combinaisons linéaires de ces états qui sont également états propres de  $\hat{L}_z$  :

$$\langle x, y | (|1, 0\rangle - i|0, 1\rangle) = r e^{-i\phi} e^{-\frac{r^2}{4l_B^2}} \quad (5.86)$$

d'énergie totale  $E = \frac{3}{2}\hbar\omega_c$ , et

$$\langle x, y | (|1, 0\rangle + i|0, 1\rangle) = r e^{+i\phi} e^{-\frac{r^2}{4l_B^2}} \quad (5.87)$$

d'énergie totale  $\frac{1}{2}\hbar\omega_c$ .

- Pour une énergie  $n_x + n_y$  fixée, deux combinaisons de moment angulaire facile à déterminer, de moment angulaire  $\pm\hbar m$  avec  $m > 0$  :

$$z^m e^{-\frac{z\bar{z}}{4}} \quad ; \quad \bar{z}^m e^{-\frac{z\bar{z}}{4}} \quad (5.88)$$

où nous avons introduit la variable complexe  $z = (x + iy)/l_B$ .

Les états propres communs à  $\hat{H}_0$  et  $\hat{L}_z$  nous donnent donc des états propres de  $\hat{H}$  d'énergie  $\frac{1}{2}(n_x + n_y + 1 - m)\hbar\omega_c$  et  $m = -n_x - n_y, -n_x - n_y + 2, \dots, n_x + n_y$  soit un indice de niveau de Landau  $n = \frac{1}{2}(n_x + n_y - m)$  entier. En particulier, le niveau de Landau le plus bas correspond à  $n_x + n_y = m$  soit les états propres déterminés plus haut<sup>3</sup> :

$$\psi_{0,m} = z^m e^{-\frac{z\bar{z}}{4}} = r^m e^{im\phi} e^{-\frac{r^2}{4}} \quad (5.89)$$

qui est une fonction d'onde centrée en autour du rayon  $r_m^2 = (2m + 1)l_B^2$ , en accord avec la règle de détermination de la dégénérescence.

Un état propre quelconque du premier niveau de Landau s'écrit donc sous la forme  $f(z)\exp(-z\bar{z}/4)$  où  $f$  est une fonction analytique (combinaison linéaire de puissance de  $z$ ). Cette propriété se retrouve en considérant les opérateurs d'échelle introduit au paragraphe 5.2.1. Suite au changement d'orientation du champ magnétique, l'opérateur d'annihilation de niveau de Landau correspond ici à

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2\hbar eB}} (\Pi_x + i\Pi_y) = \frac{1}{\sqrt{2\hbar eB}} \left[ \hat{p}_x + i\hat{p}_y - \frac{eB}{2} (\hat{y} - i\hat{x}) \right] \quad (5.90)$$

En utilisant  $\partial_z = \frac{l_B}{2}(\partial_x - i\partial_y)$ ;  $\partial_{\bar{z}} = \frac{l_B}{2}(\partial_x + i\partial_y)$ , nous pouvons réécrire cet opérateur sous la forme

$$\hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2\hbar eB}} (\Pi_x + i\Pi_y) = -i\sqrt{2} \left[ \frac{\partial}{\partial\bar{z}} + \frac{z}{4} \right] \quad (5.91)$$

3. En tenant compte de la normalisation :  $\psi_{0,m} = z^m e^{-\frac{z\bar{z}}{4}} / (2\pi l_B^2 2^m m!)^{\frac{1}{2}}$ .

Les états du premier niveau de Landau vérifie donc la propriété

$$\hat{a}\psi(z, \bar{z}) = 0 \Rightarrow \psi(z, \bar{z}) = f(z)e^{-\frac{\bar{z}z}{4}}. \quad (5.92)$$

Nous retrouvons donc la forme précédente des fonctions d'onde du premier niveau de Landau. De façon analogue, les états du second niveau de Landau sont obtenus par action de l'opérateur de création  $\hat{a}^\dagger$  sur les états du premier niveau de Landau.

### 5.8.2 Effet des interactions

Nous considérons ici par simplification le premier niveau de Landau : tout état de la forme

$$\Psi(z, \bar{z}) = f(z) e^{-\frac{z\bar{z}}{4}} \quad (5.93)$$

où  $f(z)$  est une fonction analytique de  $z$  est un état propre du hamiltonien appartenant au premier niveau de Landau. En particulier, nous pouvons considérer les polynômes de degré  $N$  indicés par la position de leurs zéros :

$$f(z) = \prod_{i=1}^N (z - Z_i). \quad (5.94)$$

L'énergie cinétique de l'ensemble de ces états est la même, ce qui conduit à une physique des interactions entre particules inhabituelles. Ainsi, si nous considérons le problème de deux électrons dans le premier niveau de Landau, la fonction d'onde exacte du problème est entièrement déterminée par le moment angulaire relatif  $m$  et le moment angulaire  $M$  du centre de masse :

$$\Psi_{m,M}(z_1, z_2) = (z_1 - z_2)^m (z_1 + z_2)^M e^{-\frac{1}{4}(z_1\bar{z}_1 + z_2\bar{z}_2)}. \quad (5.95)$$

Cet état sera un état propre du Hamiltonien quelque soit l'interaction. Son énergie cinétique est indépendante de  $m$  et  $M$  : seule l'interaction lève la dégénérescence entre ces états. Plus précisément, on considère les "pseudo-potentiels" de Haldane qui ne dépendent que du moment relatif  $m$  :

$$v_m = \frac{\langle \Psi_{m,M} | \hat{V} | \Psi_{m,M} \rangle}{\langle \Psi_{m,M} | \Psi_{m,M} \rangle}. \quad (5.96)$$

De façon générale, ces pseudo-potentiels décroissent avec  $m$ . Ces valeurs discrètes d'énergie décrivent la levée de dégénérescence des états du premier niveau de Landau sous l'effet des interactions, à condition que leur intensité soit faible devant le gap de Landau  $\hbar\omega_c$  afin de rester dans le premier niveau. Pour un potentiel répulsif (positif), ces valeurs sont positivistes : elles décrivent des états liés à 2 corps en présence d'un fort champ magnétique. En effet, en présence d'un gradient de potentiel central, la force de Lorentz est normale au gradient, donc dirigée le long des équipotentielles : les deux particules orbites le long d'équipotentielles déterminées par le le moment angulaire ! Après avoir discuter des spécificités de la physique des niveaux de Landau, retournons à un niveau de Landau complètement rempli.

### 5.8.3 Effet Hall quantique entier

Nous considérons un niveau de Landau rempli dans une géométrie de disque, qui préserve la symétrie de rotation. Dans cette géométrie, les états propres possibles sont de la forme (5.89), avec un moment cinétique  $m$  allant de 0 à  $N-1$ . Un niveau de Landay rempli correspond à  $N$  électrons. La fonction d'onde correspondante s'écrit dont comme un déterminant de Slater (par antisymétrisation du produit des fonctions d'onde) :

$$\Psi(z_1, \dots, z_N) = \begin{vmatrix} z_1^0 & z_2^0 & \dots & z_N^0 \\ z_1^1 & z_2^1 & \dots & z_N^1 \\ z_1^2 & z_2^2 & \dots & z_N^2 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ z_1^{N-1} & z_2^{N-1} & \dots & z_N^{N-1} \end{vmatrix} e^{-\frac{1}{4} \sum_j z_j \bar{z}_j}. \quad (5.97)$$

On peut exprimer ce déterminant (de Vandermonde) comme un polynôme

$$\Psi(z_1, \dots, z_N) = \prod_{\substack{j,k=1 \\ j < k}}^N (z_j - z_k) e^{-\frac{1}{4} \sum_j z_j \bar{z}_j}. \quad (5.98)$$

Afin d'étudier les propriétés de cet état, R. Laughlin a introduit une analogie avec un plasma classique particulièrement utile. Considérons pour cela la normalisation de la fonction d'onde

$$\int dz_1 dz_2 \dots dz_N |\Psi(z_1, \dots, z_N)|^2 = \int dz_1 dz_2 \dots dz_N e^{-\beta U_c} \quad (5.99)$$

avec  $\beta = 2$  et

$$U_c(z_1, \dots, z_N) = - \sum_{k < l} \ln |z_k - z_l| + \frac{1}{4} \sum_k |z_k|^2. \quad (5.100)$$

Nous reconnaissons dans l'équation (5.99) la fonction de partition d'un plasma de charge +1 évoluant dans un plan en présence d'un fond neutralisant. En effet, en dimension deux, la relation entre la circulation du champ électrique le long d'un contour  $C$  et la charge  $Q$  ponctuelle située en  $\mathbf{r} = \mathbf{0}$  à l'intérieur du contour donne une équation de Poisson modifiée

$$\oint d\mathbf{r} \cdot \mathbf{E} = 2\pi Q \quad \Rightarrow \quad \nabla \cdot \mathbf{E} = -\nabla^2 V(\mathbf{r}) = 2\pi Q \delta(\mathbf{r}). \quad (5.101)$$

Une charge ponctuelle en  $\mathbf{r} = \mathbf{0}$  crée donc un champ électrique et un potentiel scalaire

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \frac{Q}{r^2} \mathbf{r} \quad \Rightarrow \quad V(\mathbf{r}) = -Q \ln \frac{r}{r_0}. \quad (5.102)$$

L'interaction Coulombienne en dimension deux correspond donc bien au potentiel logarithmique apparaissant dans l'expression (5.100) avec  $r_0 = l_B$ . Le second terme

de l'équation (5.100) s'interprète comme le couplage des charges ponctuelles au potentiel induit par une distribution de charge continue. En effet

$$-\nabla^2 \left( \frac{1}{4} |z|^2 \right) = -\frac{1}{r} \partial_r \left( r \partial_r \frac{r^2}{4l_B^2} \right) = -\frac{1}{l_B^2} = -2\pi n_B. \quad (5.103)$$

où la densité d'états dans un niveau de Landau  $n_B$  a été définie en (5.30). Cette équation correspond à l'équation de Poisson définissant le potentiel induit par une densité de charge homogène  $-n_B$  neutralisant la collection de charge ponctuelles.

Nous pouvons maintenant utiliser notre connaissance d'un plasma classique de charges : l'interaction Coulombienne entre charges tend à homogénéiser la densité de charges en le rendant localement neutre. Cette neutralité est obtenue si la densité  $n$  de particules satisfait la relation

$$n - n_B = 0. \quad (5.104)$$

Nous retrouvons donc la relation de remplissage du niveau de Landau ! Cette analogie nous indique que la norme de la fonction d'onde à  $N$  particules décroît exponentiellement dès que des fluctuations de positions autour de la situation homogène sont induites : la contribution significative de ces fonctions d'onde correspond une à une à une distribution homogène des particules dans le niveau de Landau.

#### 5.8.4 Effet Hall quantique fractionnaire

**Etat fondamental.** L'effet Hall quantique fractionnaire apparaît dans des échantillons faiblement désordonnés lorsque la densité d'électrons  $n$  est une fraction  $\nu$  de la densité d'états  $n_B$  d'un niveau de Landau. Les premières fractions observées correspondent à  $\nu = 1/m$  où  $m$  est un entier impair. La manifestation de cet effet est similaire à celle de l'effet Hall quantique entier, avec une conductivité longitudinale négligeable et une conductivité transverse quantifiée :

$$\sigma_{xx} \simeq 0 \quad ; \quad \sigma_{xy} = \nu \frac{e^2}{h}. \quad (5.105)$$

Peu de temps après la découverte de cet effet, R. Laughlin a proposé une fonction d'onde décrivant l'état fondamental de cet état de la matière. Les fractions  $\nu = 1/m$  correspondent à un premier niveau de Landau partiellement rempli : elles correspondent donc toujours à des états de la forme (5.93). La fonction d'onde proposée par R. Laughlin est

$$\Psi_{1/m}(z_1, \dots, z_N) = \prod_{\substack{j,k=1 \\ j < k}}^N (z_j - z_k)^m e^{-\frac{1}{4} \sum_j z_j \bar{z}_j}. \quad (5.106)$$

Pour tout entier  $m$  impair, cette fonction d'onde est bien anti-symétrique par échange de deux particules. Il s'agit donc bien d'une fonction d'onde de fermions. Si nous

repreons l'analogie du plasma, nous faisons maintenant intervenir une température inverse  $\beta = 2/m$  et des charges ponctuelles  $m$ . La relation de neutralité du plasma impose maintenant le bon facteur de remplissage

$$n m - n_B = 0 \quad \Rightarrow \quad n = \frac{1}{m} n_B = \nu n_B. \quad (5.107)$$

Cette fonction d'onde est une approximation particulièrement précise du fondamental pour de nombreuses interactions entre particules à ce facteur de remplissage. Elle est la fonction d'onde exacte pour des potentiels approchés construits à partir des pseudo-potentiels de Haldane. Si nous considérons à partir d'une interaction  $\hat{V}$ , les pseudo-potentiels  $v_m$  correspondant et le potentiel approché

$$\tilde{V} = \sum_{m'=0}^{m-1} v_m \sum_{k<l} P_{m'}(k, l), \quad (5.108)$$

où  $P_{m'}(i, j)$  est un projecteur qui sélectionne les états où les particules  $k, l$  ont un moment angulaire relatif égal à  $m'$ .  $\tilde{V}$  est donc obtenu en négligeant les contributions du potentiel initial  $\hat{V}$  correspondant à des moments angulaire élevé. L'état (5.106) est un état propre de ce potentiel : dans cet état, toutes les paires de particules ont un moment relatif au moins égal à  $m$  (exactement égal à  $m$  si les autres particules sont infiniment éloignées). Ainsi  $\tilde{V}\Psi_{1/m} = 0$ . Le moment angulaire de chaque paire d'électrons est entier : les excitations élémentaires de cet état reviennent à diminuer le moment angulaire d'une paire (car ce sont les seuls degrés de liberté dans le premier niveau de Landau), ce qui conduit à une énergie d'excitation discrète, et donc à un gap d'énergie d'excitation. L'écart du potentiel initial à ce potentiel effectif peut être traité comme une perturbation si celle-ci est plus faible que ce gap d'excitation.

**Excitation de basse énergie.** Les excitations de basse énergie de l'état de Laughlin sont obtenues en incrémentant (ou diminuant) le moment angulaire des électrons de la phase. La fonction d'onde correspondante de quasi-trou, qui dépend de la position  $Z$  s'écrit

$$\Psi_{1/m}^+(Z; z_1, \dots, z_N) = \prod_{j=1}^N (z_j - Z) \Psi_{1/m}(z_1, \dots, z_N). \quad (5.109)$$

La fonction de quasi-particule correspondante s'écrit

$$\Psi_{1/m}^-(Z; z_1, \dots, z_N) = \prod_{j=1}^N (2\partial_{z_j} - \bar{Z}) \Psi_{1/m}(z_1, \dots, z_N). \quad (5.110)$$

Repreons l'analogie avec le plasma classique pour analyser la fonction d'onde du quasi-trou :

$$|\Psi_{1/m}^+(Z; z_1, \dots, z_N)|^2 = e^{-\beta(U_c + U^+)}, \quad (5.111)$$

avec un terme additionnel par rapport au fondamental :

$$U^+ = -m \sum_{j=1}^N \ln |z_j - Z|. \quad (5.112)$$

Ce potentiel correspond à l'interaction d'une charge +1 localisée en  $Z$  avec les charges  $+m$  constituant le fondamental. L'excitation élémentaire de l'état fondamental de Laughlin correspond donc à une fraction  $\nu = 1/m$  des particules initiales. En particulier, elle porte une charge  $q^* = \nu e$ . Cette charge a été observée, en particulier dans les expériences de bruits de grenaille dans le transport tunnel entre deux états de bord d'effet Hall quantique fractionnaire.

L'existence de cette charge fractionnaire des excitations élémentaires de l'effet Hall quantique fractionnaire peut se déduire d'un argument de jauge déjà utilisé dans la géométrie de Corbino au paragraphe 5.4 : nous considérons l'évolution du système lors d'un changement adiabatique du flux  $\Phi$  à l'intérieur du disque de  $\phi_0$ . Ce quantum de flux Aharonov-Bohm pouvant être absorbé par un changement de jauge, les fondamentaux avant et après variation du flux sont identiques à une phase près. Nous savons que

$$-\frac{d\Phi}{dt} = \oint_C d\mathbf{r} \cdot \mathbf{E} = \rho_{xy} \oint_C d\mathbf{r} \cdot (\mathbf{J} \times \hat{z}) = \rho_{xy} \oint_C \mathbf{J} \cdot (\hat{z} \times d\mathbf{r}) = \rho_{xy} \frac{dQ}{dt} \quad (5.113)$$

où  $Q$  est la charge comprise à l'intérieur du contour  $C$ . Ainsi, après l'augmentation d'un quantum de flux  $\phi_0$  du flux  $\Phi$ , cette charge a varié de

$$\Delta Q = -\sigma_{xy} \phi_0 = -\nu \frac{e^2 h}{h e} = -\nu e. \quad (5.114)$$

Cet argument nous impose donc un transfert de charge fractionnaire d'un bord à l'autre de l'échantillon lors d'une variation du flux d'une unité. Les bords de l'effet Hall quantique fractionnaire sont donc constitués de particules (excitations collectives) de charge fractionnaire.



# Chapitre 6

## Conductivité de Hall et Nombre de Chern

### 6.1 Conductivité de Hall et Nombre de Chern

#### 6.1.1 Conditions aux limites généralisées

Nous avons vu dans la discussion de l'argument de Laughlin qu'un flux de Aharonov-Bohm pouvait être éliminé par changement de jauge s'il était multiple du quantum de flux  $\phi_0$ .

Un potentiel de jauge constant ne modifie les fonctions d'onde qu'à travers la phase : il peut être éliminé par une transformation de jauge, sauf sur les bords d'un échantillon. C'est ce qui nous a permis de décrire  $\sigma_{xy}$  comme une fonction du transfert de charge entre les deux bords dans une géométrie Corbino. Nous nous intéressons ici à un point de vue alternatif, dans lequel  $\sigma_{xy}$  est exprimé comme une fonction de réponse de la phase dans une géométrie sans bord. La façon la plus naturelle d'obtenir une géométrie sans bord est d'imposer des conditions aux limites périodiques dans les deux directions, ce qui n'est pas possible. Nous généralisons donc ces conditions aux limites précédentes,

$$\oint_{C_1} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{r} = \Phi_x \quad ; \quad \oint_{C_2} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{r} = \Phi_y \quad (6.1)$$

pour tout chemin  $C_1$  allant de  $x = 0$  à  $x = L_x$  et  $C_2$  allant de  $y = 0$  à  $y = L_y$ . L'invariance jauge :

$$(A_x, A_y) \rightarrow \left( A_x + \frac{\Phi_x}{L_x}, A_y + \frac{\Phi_y}{L_y} \right) \quad (6.2)$$

$$\psi(x, y) \rightarrow \psi'(x, y) = e^{i2\pi\left(\frac{\Phi_x}{\phi_0} \frac{x}{L_x} + \frac{\Phi_y}{\phi_0} \frac{y}{L_y}\right)} \psi(x, y) \quad (6.3)$$

implique une invariance de nos états quantiques par variation d'un quantum de flux des flux  $\Phi_i \rightarrow \Phi_i + \phi_0$ ,  $i = 1, 2$ . Cette périodicité en  $\phi_0$  dans chaque direction du

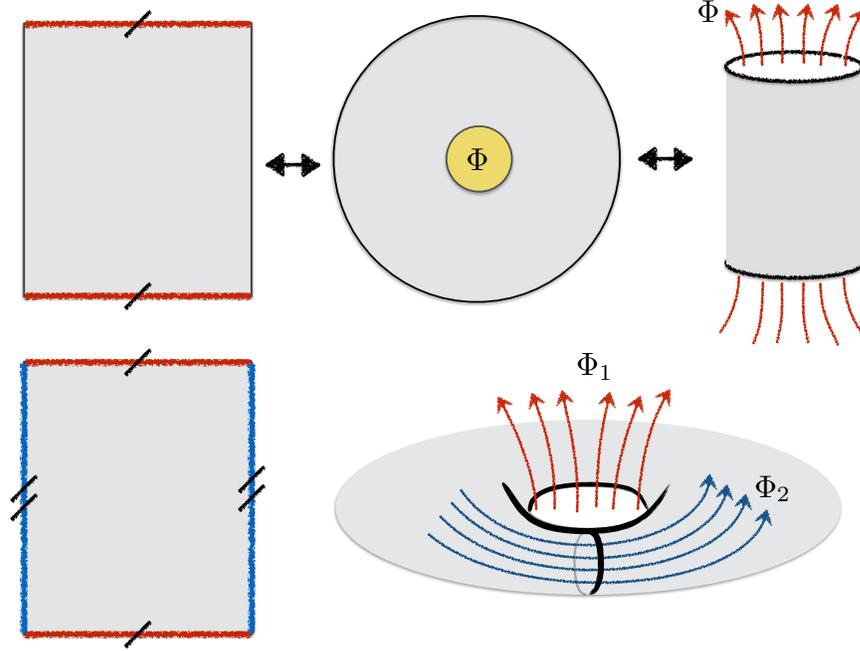


FIGURE 6.1 – Conditions aux limites généralisées pour un échantillon d’effet Hall quantique, faisant intervenir deux flux Aharonov-Bohm  $\Phi_1$  et  $\Phi_2$  dans les deux directions.

flux revient à considérer un ensemble d’états ou un Hamiltonien  $H(\Phi_x, \Phi_y)$  défini sur un tore  $[0, \phi_0] \times [0, \phi_0]$ . La présence des potentiels vecteurs constants provenant des flux externes  $\Phi_\alpha$  sur un système avec une géométrie de tore (conditions aux limites périodiques) peut être également incorporée dans des conditions aux limites généralisées :

$$\psi(x + L_x, y) = e^{i2\pi \frac{\Phi_x}{\phi_0}} \phi(x, y) \quad ; \quad \psi(x, y + L_y) = e^{i2\pi \frac{\Phi_y}{\phi_0}} \phi(x, y) \quad (6.4)$$

### 6.1.2 Conductivité et transport adiabatique

Nous considérons la réponse d’un état fondamental unique  $\Psi_0$  avec un gap d’énergie avec les premiers états excités. Cet état ne peut être modifié que d’une phase après variation d’un des flux  $\Phi_\alpha$  de  $\phi_0$  (cet argument ne s’applique pas à l’effet Hall quantique fractionnaire dont le fondamental est dégénéré sur un tore).

Afin de déterminer la réponse de cet état fondamental à un champ électrique, nous choisissons d'incorporer le champ électrique *via* la jauge <sup>1</sup>

$$V = 0 \quad ; \quad \mathbf{A} = \mathbf{A}^{(0)} + \delta\mathbf{A}(t) \quad ; \quad \delta\mathbf{A}(t) = -\mathbf{E}t. \quad (6.5)$$

Avec ce choix de jauge, la réponse de l'état fondamental  $\Psi_0$  à un champ électrique se ramène à l'étude de l'évolution adiabatique de cet état sous l'effet d'un Hamiltonien  $\hat{H}[\mathbf{A}(t)]$  dépendant lentement du temps, analogue à la situation considérée au paragraphe 3.2. Nous considérons donc une base  $\{|\Psi_n(t)\rangle\}_n$  d'états propres instantanés du Hamiltonien. Au premier ordre en perturbation, nous écrivons

$$|\tilde{\Psi}_n(t)\rangle = |\Psi_n(t)\rangle + i\hbar \sum_{m \neq n} \frac{|\Psi_m(t)\rangle \langle \Psi_m(t) | \partial_t |\Psi_n(t)\rangle}{\epsilon_m(t) - \epsilon_n(t)} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' \epsilon_n(t')}. \quad (6.6)$$

Pour un opérateur  $\hat{O}$ , nous obtenons à l'ordre le plus bas

$$\begin{aligned} \langle \tilde{\Psi}_n(t) | \hat{O} | \tilde{\Psi}_m(t) \rangle &= \langle \Psi_n(t) | \hat{O} | \Psi_m(t) \rangle \\ &\quad - i\hbar \sum_{m \neq n} \frac{1}{\epsilon_m - \epsilon_n} \langle \partial_t \Psi_n(t) | \Psi_m(t) \rangle \langle \Psi_m(t) | \hat{O} | \Psi_n(t) \rangle \\ &\quad + i\hbar \sum_{m \neq n} \frac{1}{\epsilon_m - \epsilon_n} \langle \Psi_n(t) | \hat{O} | \Psi_m(t) \rangle \langle \Psi_m(t) | \partial_t \Psi_n(t) \rangle + \dots \end{aligned} \quad (6.7)$$

Nous cherchons maintenant à variation temporelle sur le Hamiltonien : si nous considérons deux états  $n \neq m$ ,

$$\langle \Psi_n(t) | \Psi_m(t) \rangle = 0 \quad \Rightarrow \quad \langle \partial_t \Psi_n(t) | \Psi_m(t) \rangle = -\langle \Psi_n(t) | \partial_t \Psi_m(t) \rangle. \quad (6.8)$$

De même

$$\langle \Psi_n(t) | \hat{H}(t) | \Psi_m(t) \rangle = 0 \quad (6.9)$$

$$\Rightarrow \quad \epsilon_m(t) \langle \partial_t \Psi_n(t) | \Psi_m(t) \rangle + \epsilon_n(t) \langle \Psi_n(t) | \partial_t \Psi_m(t) \rangle + \langle \Psi_n(t) | \partial_t \hat{H}(t) | \Psi_m(t) \rangle = 0 \quad (6.10)$$

$$\Rightarrow \quad \langle \Psi_n(t) | \partial_t \Psi_m(t) \rangle = \frac{1}{\epsilon_m - \epsilon_n} \langle \Psi_n(t) | \partial_t \hat{H}(t) | \Psi_m(t) \rangle. \quad (6.11)$$

Nous pouvons maintenant écrire l'équation (6.7) restreinte à l'état fondamental sous la forme

$$\begin{aligned} \langle \tilde{\Psi}_0(t) | \hat{O} | \tilde{\Psi}_0(t) \rangle &= \langle \Psi_0(t) | \hat{O} | \Psi_0(t) \rangle \\ &\quad + i\hbar \sum_{n \neq 0} \frac{1}{(\epsilon_n - \epsilon_0)^2} \left[ \langle \Psi_0(t) | \partial_t \hat{H}(t) | \Psi_n(t) \rangle \langle \Psi_n(t) | \hat{O} | \Psi_0(t) \rangle \right. \\ &\quad \left. - \langle \Psi_n(t) | \partial_t \hat{H}(t) | \Psi_0(t) \rangle \langle \Psi_0(t) | \hat{O} | \Psi_n(t) \rangle \right]. \end{aligned} \quad (6.12)$$

1. Rappelons les conditions entre potentiels et champs  $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$  et  $\mathbf{E} = -\nabla V - \partial_t \mathbf{A}$ .

Dans le cas présent,  $\partial_t H = \delta H / \delta A_\alpha E_\alpha$ . Nous cherchons à déterminer le courant moyen dans le fondamental  $J_\alpha = \langle \tilde{\Psi}_0(t) | \hat{J}_\alpha | \tilde{\Psi}_0(t) \rangle$  où l'opérateur courant se déduit du couplage minimal :  $\hat{J}_\alpha(\mathbf{r}) = \delta H / \delta A_\alpha(\mathbf{r})$ . En reportant dans l'expression ci-dessus, nous obtenons

$$J_\alpha = \langle \Psi_0(t) | \frac{\delta H}{\delta A_\alpha} | \Psi_0(t) \rangle + i\hbar \sum_{m \neq 0} \frac{1}{(\epsilon_m - \epsilon_0)^2} \left[ \langle \Psi_0 | \hat{J}_x | \Psi_m \rangle \langle \Psi_m | \hat{J}_x | \Psi_0 \rangle E_x + \langle \Psi_0 | \hat{J}_y | \Psi_m \rangle \langle \Psi_m | \hat{J}_x | \Psi_0 \rangle E_y - \langle \Psi_m | \hat{J}_x | \Psi_0 \rangle \langle \Psi_0 | \hat{J}_x | \Psi_m \rangle E_x - \langle \Psi_m | \hat{J}_y | \Psi_0 \rangle \langle \Psi_0 | \hat{J}_x | \Psi_m \rangle E_y \right] \quad (6.13)$$

$$= + i\hbar \sum_{m \neq 0} \frac{1}{(\epsilon_m - \epsilon_0)^2} \left[ \langle \Psi_0 | \hat{J}_y | \Psi_m \rangle \langle \Psi_m | \hat{J}_x | \Psi_0 \rangle - \langle \Psi_m | \hat{J}_y | \Psi_0 \rangle \langle \Psi_0 | \hat{J}_x | \Psi_m \rangle \right] E_y \quad (6.14)$$

$$= \sigma_{xy} E_y \quad (6.15)$$

soit

$$\sigma_{xy} = -\frac{i\hbar}{L_x L_y} \sum_{m \neq 0} \frac{1}{(\epsilon_m - \epsilon_0)^2} \left[ \langle \Psi_0 | \hat{J}_x | \Psi_m \rangle \langle \Psi_m | \hat{J}_y | 0 \rangle - \langle \Psi_0 | \hat{J}_y | \Psi_m \rangle \langle \Psi_m | \hat{J}_x | 0 \rangle \right]. \quad (6.16)$$

### 6.1.3 Conductivité de Hall et nombre de Chern

$$\sigma_{xy} = -\frac{i\hbar}{L_x L_y} \sum_{n \neq 0} \frac{1}{(\epsilon_0 - \epsilon_n)^2} \left[ \langle \Psi_0 | \hat{J}_x | \Psi_n \rangle \langle \Psi_n | \hat{J}_y | \Psi_0 \rangle - \langle \Psi_0 | \hat{J}_y | \Psi_n \rangle \langle \Psi_n | \hat{J}_x | \Psi_0 \rangle \right] \quad (6.17)$$

$|\Psi_0\rangle$  : état fondamental du système.  $|\Psi_n\rangle$  : états excités du système (avec un gap d'énergie).

Avec nos conditions aux limites :  $A_\alpha = \Phi_\alpha / L_\alpha$  soit un opérateur courant

$$\hat{J}_\alpha(\mathbf{r}) = \frac{\delta H}{\delta A_\alpha(\mathbf{r})} = L_\alpha \frac{\partial H}{\partial \Phi_\alpha} \quad (6.18)$$

Nous en déduisons une conductivité

$$\sigma_{xy} = -i\hbar \sum_{n \neq 0} \frac{1}{(\epsilon_0 - \epsilon_n)^2} \left[ \langle \Psi_0 | \frac{\partial H}{\partial \Phi_x} | \Psi_n \rangle \langle \Psi_n | \frac{\partial H}{\partial \Phi_y} | \Psi_0 \rangle - \langle \Psi_0 | \frac{\partial H}{\partial \Phi_y} | \Psi_n \rangle \langle \Psi_n | \frac{\partial H}{\partial \Phi_x} | \Psi_0 \rangle \right] \quad (6.19)$$

$|\Psi_0\rangle$  et  $|\Psi_n\rangle$  sont états propres du Hamiltonien, donc

$$\langle\Psi_0|\Psi_n\rangle = 0 \Rightarrow (\partial_{\Phi_\alpha}\langle\Psi_0|\Psi_n\rangle) = -\langle\Psi_0|(\partial_{\Phi_\alpha}|\Psi_n\rangle). \quad (6.20)$$

De même

$$\langle\Psi_0|H|\Psi_n\rangle = 0 \quad (6.21)$$

$$\Rightarrow (\partial_{\Phi_\alpha}\langle\Psi_0|H|\Psi_n\rangle) + \langle\Psi_0|(\partial_{\Phi_\alpha}H)|\Psi_n\rangle + \langle\Psi_0|H(\partial_{\Phi_\alpha}|\Psi_n\rangle) = 0 \quad (6.22)$$

$$\Rightarrow \langle\Psi_0|(\partial_{\Phi_\alpha}H)|\Psi_n\rangle = (\epsilon_n - \epsilon_0)\langle\Psi_0|(\partial_{\Phi_\alpha}|\Psi_n\rangle). \quad (6.23)$$

En reportant dans l'expression de la conductivité de Hall, nous en déduisons

$$\sigma_{xy} = -i\hbar \sum_{n \neq 0} \left[ (\partial_{\Phi_x}\langle\Psi_0|\Psi_n\rangle)\langle\Psi_n|(\partial_{\Phi_y}|\Psi_0\rangle) - (\partial_{\Phi_y}\langle\Psi_0|\Psi_n\rangle)\langle\Psi_n|(\partial_{\Phi_x}|\Psi_0\rangle) \right] \quad (6.24)$$

$$= -i\hbar \left[ \partial_{\Phi_x}\langle\Psi_0|\partial_{\Phi_y}|\Psi_0\rangle - \partial_{\Phi_y}\langle\Psi_0|\partial_{\Phi_x}|\Psi_0\rangle \right] \quad (6.25)$$

Pour un grand système :  $\sigma_{xy}$  doit être indépendant du flux : égal à sa valeur moyenne, donc

$$\sigma_{xy} = \frac{1}{\phi_0^2} \int d^2\Phi \sigma_{xy}(\Phi) \quad (6.26)$$

$$= \frac{e^2}{h^2} \frac{1}{2\pi i} \int d^2\Phi \left[ \partial_{\Phi_x}\langle\Psi_0|\partial_{\Phi_y}|\Psi_0\rangle - \partial_{\Phi_y}\langle\Psi_0|\partial_{\Phi_x}|\Psi_0\rangle \right] \quad (6.27)$$

$$= \frac{e^2}{h^2} \frac{1}{2\pi} \int d^2\Phi \mathcal{B}^{(0)}(\Phi). \quad (6.28)$$

L'intégrale de la courbure de Berry sur une surface fermée s'appelle le premier nombre de Chern du fibré correspondant.

Cette propriété fait de la conductivité de Hall une quantité robuste au désordre, aux interactions, etc tant que le gap n'est pas fermé.

## 6.2 Point de vue alternatif : Lagrangien de Chern-Simons

### 6.2.1 Lagrangien de Chern-Simons et conductivité de Hall

Nous considérons un ensemble de fermions décrit par un champ  $\psi(\mathbf{r})$  couplé à un champ électromagnétique  $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ , qui joue le rôle de source de champ magnétique, mais également de source afin de calculer les corrélations de courant dans le système. Nous pouvons décrire cet ensemble de fermions par un Lagrangien qui permet de générer les fonctions de corrélations du courant

$$\langle j_\mu(\mathbf{r}_1) j_\nu(\mathbf{r}_2) \rangle = \frac{\delta}{\delta A_\mu(\mathbf{r}_1)} \frac{\delta}{\delta A_\nu(\mathbf{r}_2)} \int D\bar{\psi} D\psi \exp(i\mathcal{L}[\psi, \bar{\psi}, A_\mu] + i\mathcal{L}_{em}[A_\mu]) \quad (6.29)$$

$$\int D\bar{\psi} D\psi \exp(i\mathcal{L}[\psi, \bar{\psi}, A_\mu] + i\mathcal{L}_{em}[A_\mu]) = \exp(i\mathcal{L}_{eff}[A_\mu] + i\mathcal{L}_{em}[A_\mu]). \quad (6.30)$$

Nous nous intéressons aux premiers termes de son développement en  $A_\mu(\mathbf{r})$  :

$$\mathcal{L}_{eff}[A_\mu] = -\frac{1}{2} \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' A_\mu(\mathbf{r}) P^{\mu\nu}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') A_\nu(\mathbf{r}') + \dots \quad (6.31)$$

$P^{\mu\nu}(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$  correspond à la polarisabilité de la phase électronique. Dans un métal, sa transformée de Fourier  $P^{\mu\nu}(\mathbf{k})$  possède des pôles correspondant aux excitations particule-trou de basse énergie ou de grande longueur d'onde (petit  $|\mathbf{k}|$ ). Si nous nous intéressons à une phase possédant un gap d'excitations au dessus du fondamental,  $P^{\mu\nu}(\mathbf{k})$  sera donc régulière à petit  $\mathbf{k}$ . La réponse électromagnétique à grande échelle de la phase considérée est obtenue par un développement aux premiers ordre en  $\mathbf{k}$  de ce Lagrangien. Nous identifions les termes généraux de  $\mathcal{L}_{eff}[A_\mu]$  invariants par les transformations de jauge :

$$A_\mu(r^\mu) \rightarrow A'_\mu(r^\mu) = A_\mu(r^\mu) + \partial_\mu f(r_\mu). \quad (6.32)$$

Ces termes s'expriment naturellement en fonctions des champs physiques  $\mathbf{E}$  et  $\mathbf{B}$  :

$$\mathcal{L}_{eff}[A_\mu] = -\frac{1}{2} \int d\mathbf{r} B_j(\mathbf{r}) \chi^{jk} B_k(\mathbf{r}) - \frac{1}{2} \int d\mathbf{r} E_j(\mathbf{r}) p^{jk} E_k(\mathbf{r}) + \dots \quad (6.33)$$

$\chi_{ij}$  est la susceptibilité magnétique, et  $p^{jk}$  les corrections à la constante diélectrique. En deux dimensions d'espace, un terme supplémentaire est autorisé :

$$\frac{\kappa}{4\pi} \epsilon^{\mu\nu\lambda} A_\mu \partial_\nu A_\lambda \quad (6.34)$$

qui est bien invariant de jauge, mais ne s'exprime ni en fonction de  $\mathbf{E}$ , ni de  $\mathbf{B}$ . Sous une transformation de jauge (6.32), ce terme est modifié en

$$\mathcal{S}'_{CS} = \frac{\kappa}{4\pi} \int d\mathbf{r} dt \epsilon^{\mu\nu\lambda} (A_\mu + \partial_\mu f) \partial_\nu (A_\lambda + \partial_\lambda f) \quad (6.35)$$

$$\begin{aligned} &= \frac{\kappa}{4\pi} \int d\mathbf{r} dt \left[ \epsilon^{\mu\nu\lambda} A_\mu \partial_\nu A_\lambda + \epsilon^{\mu\nu\lambda} A_\mu \partial_\nu \partial_\lambda f + \epsilon^{\mu\nu\lambda} \partial_\mu f \partial_\nu A_\lambda + \epsilon^{\mu\nu\lambda} \partial_\mu f \partial_\nu \partial_\lambda f \right] \\ &= \mathcal{S}_{CS} + \frac{\kappa}{4\pi} \oint dx_\mu \epsilon^{\mu\nu\lambda} f \partial_\nu A_\lambda. \end{aligned} \quad (6.36)$$

Ainsi  $\mathcal{S}'_{CS}$  ne diffère de  $\mathcal{S}_{CS}$  que par un terme de bord, qui l'on peut choisir nul en imposant  $f = 0$  sur les bords du système (ce qui revient à prendre des conditions aux limites fixées).

Considérons maintenant les fonctions de réponse linéaire extraites de cette action (en utilisant  $\partial_i A_j = E_j$ ) :

$$J_i = -\frac{\delta \mathcal{S}}{\delta A_i} = \frac{\kappa}{2\pi} \epsilon_{ij} \partial_0 A_j = \epsilon_{ij} \frac{\kappa}{2\pi} E_j \quad (6.37)$$

$$\Rightarrow \sigma_{xy} = \frac{\kappa}{2\pi} \frac{e^2}{\hbar} = \kappa \frac{e^2}{h}. \quad (6.38)$$

facteur :  $1/\hbar$  de l'action. Facteur  $e^2$  de courant de charge . **\*\*\* A FAIRE \*\*\***

Ainsi le terme de Chern-Simons est responsable de la quantification de la conductivité de Hall des phases en dimension deux possédant un gap d'excitation. C'est un argument très général, non spécifique à l'effet Hall quantique, et valable pour toute phase caractérisée par un nombre  $\kappa$  non nul.

### 6.2.2 Quantification de $\kappa$

On reprend la géométrie des conditions aux limites généralisées : état fondamental paramétré par deux flux  $\Phi_1$  et  $\Phi_2$ . L'action électromagnétique ci-dessus devient

$$\mathcal{L}_{eff}[\Phi] = \dot{\Phi}_i p^{ij} \dot{\Phi}_j + \frac{\kappa}{4\pi} \epsilon^{ij} \Phi_i \dot{\Phi}_j \quad (6.39)$$

Il n'y a aucun terme en  $\mathbf{B}$  car  $\mathbf{A}$  est uniforme.

Le Lagrangien est similaire à celui d'une particule dans un champ magnétique  $b$ , de position  $\Phi_1, \Phi_2$  :

- terme cinétique quadratique :  $\dot{\Phi}_i p^{ij} \dot{\Phi}_j$
- couplage au potentiel vecteur :  $\dot{\Phi}_j a_j(\Phi)$  avec  $a_i(\Phi) = \frac{\kappa}{4\pi} \epsilon^{ij} \Phi_j$ .

Le champ magnétique correspondant vaut

$$a_x = -\frac{\kappa}{4\pi} \Phi_2 \quad ; \quad a_y = \frac{\kappa}{4\pi} \Phi_1 \quad (6.40)$$

$$\Rightarrow b(\Phi) = \frac{\partial a_y}{\partial \Phi_1} - \frac{\partial a_x}{\partial \Phi_2} = \frac{\kappa}{2\pi}. \quad (6.41)$$

Le flux total à travers la surface de base de cette théorie des champs vaut donc

$$\int_{[0, \phi_0] \times [0, \phi_0]} d\Phi b(\Phi) = (2\pi)^2 \frac{\kappa}{2\pi} = 2\pi\kappa. \quad (6.42)$$

**\*\*\* PB normalisation :  $\phi_0^2 \kappa / 2\pi$  \*\*\***

Le flux doit être un multiple de  $\phi$  :  $\kappa$  est un entier.

Alternative (cf X.G. Wen) : lien avec point de vue de Berry.

## 6.3 Retour à un cristal

$$H = \sum_{\langle \mathbf{R}, \mathbf{R}' \rangle} t_{\mathbf{R}, \mathbf{R}'} e^{i\frac{1}{\hbar} \mathbf{A} \cdot (\mathbf{R}, \mathbf{R}')} |\mathbf{R}'\rangle \langle \mathbf{R}|. \quad (6.43)$$

Etat fondamental : produit antisymétrisé

$$|\Psi_0\rangle = \otimes_{\mathbf{k} \in \text{BZ}, \alpha, E_\alpha < \mu} |\psi_{\mathbf{k}, \alpha}\rangle. \quad (6.44)$$

Or, si  $|\Psi\rangle = |\psi_1\rangle \otimes |\psi_2\rangle$ , alors

$$\int_{\partial \mathbb{T}_2} \langle \Psi | d | \Psi \rangle = \int_{\partial \mathbb{T}_2} \langle \psi_1 | d | \psi_1 \rangle + \int_{\partial \mathbb{T}_2} \langle \psi_2 | d | \psi_2 \rangle. \quad (6.45)$$

Pour notre état fondamental, nous avons donc

$$\int_{\partial\mathbb{T}_2} \langle \Psi_0 | d | \Psi_0 \rangle = \sum_{\mathbf{k} \in \text{BZ}, \alpha, E_\alpha < \mu} \int_{\partial\mathbb{T}_2} \langle \psi_{\mathbf{k}, \alpha} | d | \psi_{\mathbf{k}, \alpha} \rangle \quad (6.46)$$

Au niveau de notre Hamiltonien, nous savons que l'application d'un potentiel vecteur  $\mathbf{A} = \Phi/L$  constant revient à décaler uniformément les pseudo-moments  $\mathbf{k}$  :  $\hat{H}(\mathbf{k}, \Phi) = \hat{H}(\mathbf{k} + \frac{e}{\hbar L} \Phi)$ . Lorsque  $\Phi$  évolue le long du bord du tore

$$[0, 0] \rightarrow [0, \phi_0] \rightarrow [\phi_0, \phi_0] \rightarrow [\phi_0, 0] \rightarrow [0, 0], \quad (6.47)$$

les moments évoluent le long des chemins

$$\mathbf{k}_0 \rightarrow \mathbf{k}_0 + \left[ 0, \frac{2\pi}{L_y} \right] \rightarrow \mathbf{k}_0 + \left[ \frac{2\pi}{L_x}, \frac{2\pi}{L_y} \right] \rightarrow \mathbf{k}_0 + \left[ \frac{2\pi}{L_x}, 0 \right] \rightarrow \mathbf{k}_0. \quad (6.48)$$

Or les états à une particule occupent une surface  $\frac{2\pi}{L_x} \times \frac{2\pi}{L_y}$  dans l'espace réciproque. En particulier, avec des conditions aux limites périodiques dans l'espace réel, les moments sont quantifiés selon  $\mathbf{k} = (n_x \frac{2\pi}{L_x}, n_y \frac{2\pi}{L_y})$ . Pour chaque bande  $\alpha$ , nous avons donc

$$\sum_{n_x, n_y} \int_{\partial\mathbb{T}_2} \langle \psi_{\mathbf{k}, \alpha} | d | \psi_{\mathbf{k}, \alpha} \rangle = \int_{\partial\text{BZ}} \langle \psi_{\mathbf{k}, \alpha} | d | \psi_{\mathbf{k}, \alpha} \rangle = n_\alpha. \quad (6.49)$$

$n_\alpha$  est le nombre de Chern de la bande  $\alpha$  au dessus de la zone de Brillouin. La relation () se réécrit donc en théorie des bandes :

$$\sigma_{xy} = \frac{e^2}{h} \sum_{\alpha, E_\alpha < \mu} n_\alpha. \quad (6.50)$$

Ainsi pour un isolant bidimensionnel,  $\sigma_{xy}$  est une mesure directe des propriétés topologiques des états électroniques constituant son fondamental.

Attention : en présence d'un champ magnétique, les opérateurs de translation ne commutent pas. Pour certains remplissages, il est possible de définir une cellule élémentaire magnétique n'ensérnant qu'un nombre entier de quantum de flux. On récupère alors un réseau de Bravais "effectif", plus petit que le réseau initial, pour lequel l'approche précédente s'applique. Le spectre du problème complet en fonction du flux magnétique par cellule élémentaire est remarquable (spectre de Hofstater).

# Chapitre 7

## Isolants de Chern

### 7.1 Effet Hall dans un cristal

Dans le chapitre précédent, nous avons considéré implicitement une structure de bande dans un cristal dans laquelle l'invariance par renversement du temps était brisée. Or en présence d'un champ magnétique, source naturelle pour briser cette invariance par renversement du temps, l'invariance par translation du réseau de Bravais initial est modifiée. Nous discutons cette situation dans cette partie. Plus précisément, nous considérons une situation où le flux magnétique par cellule élémentaire du réseau de Bravais est de l'ordre du quantum de flux  $\phi_0$ .

Considérons un modèle de liaisons fortes définis sur un réseau de Bravais bidimensionnel (par exemple un réseau carré) :

$$\hat{H} = \sum_{\langle \mathbf{R}, \mathbf{R}' \rangle} |\mathbf{R}\rangle \langle \mathbf{R}'| + \text{h.c.} \quad (7.1)$$

En présence d'un champ magnétique, ce Hamiltonien doit être modifié : en particulier, nous devons prendre en compte le déphasage d'Aharonov-Bohm précédemment rencontré : le long d'un chemin  $C$ , un

[...] Hofstadter

### 7.2 Isolant idéal : modèle à deux bandes

Un isolant idéalisé ne comporte que deux bandes d'énergie : une bande de valence sous le gap et une bande de conduction. La description d'un tel isolant requiert donc un Hamiltonien de Bloch  $\hat{H}(\mathbf{k})$  en tout point  $\mathbf{k}$  de la zone de Brillouin, agissant sur un espace de Hilbert de dimension 2. Ce hamiltonien peut être représenté par une matrice de taille  $2 \times 2$  paramétrée par 4 fonctions réelles  $h_\mu(k)$  selon

$$H(k) = h^0(k)\sigma_0 + \vec{h}(k) \cdot \vec{\sigma} \quad (7.2)$$

où nous avons utilisé une base de matrice  $2 \times 2$  hermitiennes constituée de  $\sigma_0 = \mathbb{I}$  et les trois matrices de Pauli  $\sigma_\mu$  pour  $\mu = x, y, z$ . Ce Hamiltonien peut donc être interprété comme décrivant un spin  $\frac{1}{2}$  couplé à un champ magnétique  $\mathbf{h}(\mathbf{k})$  qui varie continûment lorsque le point  $\mathbf{k}$  évolue sur la zone de Brillouin. Il est possible de choisir une base des espaces de Bloch  $\mathcal{H}_k$  qui soit continu sur la zone de Brillouin. Les fonctions  $h_\mu(\mathbf{k})$  peuvent alors être choisies périodiques sur cette zone de Brillouin. Le spectre du Hamiltonien (7.2) est simplement donné par

$$\epsilon_\pm(\mathbf{k}) = h_0(\mathbf{k}) \pm |\mathbf{h}(\mathbf{k})| \quad (7.3)$$

Cette structure de bande correspond à celle d'un isolant si les deux bandes ne se croisent jamais, c'est-à-dire si  $|\mathbf{h}(\mathbf{k})|$  ne s'annule jamais. Plus précisément cette condition est nécessaire mais non suffisante : nous devrions imposer que  $h_0(\mathbf{k})$  varie peut-être à l'intérieur du gap, c'est-à-dire que le minimum de  $\epsilon_+$  est supérieur au maximum de  $\epsilon_-$ . Nous allons voir que  $h_0$  ne modifie pas la nature des états propres, et donc les propriétés topologiques associées. Nous allons donc nous intéresser à cette situation qui généralise la notion d'isolant. En utilisant des coordonnées sphériques ( $h = |\mathbf{h}|$ ,  $\varphi$ ,  $\theta$ ) pour décrire le vecteur  $\mathbf{h}(\mathbf{k}) = (h_x(\mathbf{k}), h_y(\mathbf{k}), h_z(\mathbf{k}))$  :

$$\mathbf{h}(\mathbf{k}) = h(\mathbf{k}) \begin{pmatrix} \sin \theta(\mathbf{k}) \cos \varphi(\mathbf{k}) \\ \sin \theta(\mathbf{k}) \sin \varphi(\mathbf{k}) \\ \cos \theta(\mathbf{k}) \end{pmatrix}, \quad (7.4)$$

l'état propre de la bande de valence  $\epsilon_-(\mathbf{k})$  est défini (à un choix de phase arbitraire) par

$$|u_-(\mathbf{h})\rangle = \begin{pmatrix} -\sin \frac{\theta}{2} \\ e^{i\varphi} \cos \frac{\theta}{2} \end{pmatrix}. \quad (7.5)$$

Cette expression nous indique que la norme  $h = |\mathbf{h}|$  du vecteur  $\mathbf{h}$  et la fonction  $h_0$  ne jouent aucun rôle dans la nature de ces états propres. Seule la direction du vecteur unitaire  $\hat{\mathbf{h}}(\mathbf{k})$  sur la sphère détermine ces états. Or nous savons qu'il n'est pas possible de définir un champ de vecteur  $|u_-\rangle$  sur la sphère  $S^2$  : il possède nécessairement des singularités ponctuelles, c'est-à-dire des vortex. L'existence de ces défauts est une manifestation de la non-trivialité du fibré vectoriel considéré, découverte en 1931 par Dirac et Hopf [1]. Nous avons déjà rencontré ce problème dans la discussion des fonctions d'onde d'une charge couplée à un monopole dans le paragraphe ????. En effet, la situation où le vecteur  $\mathbf{h}(\mathbf{k})$  couvre la sphère  $S^2$  complète lorsque  $\mathbf{k}$  varie dans la zone de Brillouin peut être vue, si  $\mathbf{h}(\mathbf{k})$  est identifiée à un champ magnétique, comme le résultat de la présence d'un monopole à l'intérieur du Tore de Brillouin : le flux magnétique à travers la zone de Brillouin vaut alors  $4\pi$ . Nous retrouvons ici ce problème en réalisant que la fonction d'onde (7.5) n'est pas définie au pôle nord  $\theta = 0$  où cet état dépend toujours de l'angle  $\varphi$  qui y est mal défini. Nous réalisons que quelque soit le changement de jauge effectué sur cet état (7.5), il n'est pas possible d'éliminer le vortex initial du pôle nord, mais seulement de changer sa position sur la sphère.

Nous avons donc besoin d'un outil permettant de détecter si  $\mathbf{h}(\mathbf{k})$  couvre ou non la sphère  $S^2$  complète lorsque  $\mathbf{k}$  varie dans la zone de Brillouin. Si  $\mathbf{h}(\mathbf{k})$  était un champ

magnétique, nous considérerions le flux magnétique à travers la zone de Brillouin. Dans le cas présent, l'analogie du champ magnétique correspond à la courbure de Berry  $\mathcal{B}^{(-)}(\mathbf{k})$ , le pendant du flux magnétique à travers la zone de Brillouin est le (premier) nombre de Chern obtenu en intégrant la courbure de Berry :

$$c^{(-)} = \frac{1}{2\pi} \int_{\text{BZ}} \mathcal{B}^{(-)}(\mathbf{k}). \quad (7.6)$$

Ce nombre de Chern, obtenu en intégrant un flux à travers une surface ne s'applique qu'aux isolants en dimension  $d = 2$ , correspond à une zone de Brillouin bidimensionnelle.

Revenons maintenant à nos états propres (7.5) du Hamiltonien (7.2) : la courbure de Berry s'exprime alors selon

$$\mathcal{B}^{(-)}(\mathbf{k}) = \frac{1}{2} \hat{\mathbf{h}}(\mathbf{k}) \cdot \left( \frac{\partial \hat{\mathbf{h}}(\mathbf{k})}{\partial k_x} \times \frac{\partial \hat{\mathbf{h}}(\mathbf{k})}{\partial k_y} \right) dk_x \wedge dk_y, \quad (7.7)$$

corresponding to a Chern number

$$c^{(-)} = \frac{1}{4\pi} \int_{\text{BZ}} \frac{\mathbf{h}(\mathbf{k})}{|\mathbf{h}(\mathbf{k})|^3} \cdot \left( \frac{\partial \mathbf{h}(\mathbf{k})}{\partial k_x} \times \frac{\partial \mathbf{h}(\mathbf{k})}{\partial k_y} \right) dk_x \wedge dk_y. \quad (7.8)$$

Cette expression correspond à l'index de la fonction  $\mathbf{h}(\mathbf{k})$  qui transforme le tore de Brillouin vers (une partie de) la sphère  $S^2$ . Cette indice compte "l'enroulement" de cette transformation autour de la sphère. Elle permet donc de distinguer les fonctions qui ne pourront être continûment déformées les unes dans les autres.

### 7.3 Le modèle de Haldane

Un des modèles les plus simples à étudier et possédant une phase possédant un gap d'énergie et caractérisée un nombre de Chern a été proposé par D. Haldane en 1988 [2]. Ce modèle est défini comme un modèle de liaisons fortes sur le cristal nid d'abeilles du graphène, avec des couplages  $t$  entre plus proches voisins,  $t_2$  entre second voisins, et un potentiel d'amplitude  $M$  alterné sur les deux sous réseaux  $A$  et  $B$  du graphène. La Hamiltonien correspondant s'écrit

$$H = t \sum_{\langle i,j \rangle} |i\rangle \langle j| + t_2 \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} |i\rangle \langle j| + M \left[ \sum_{i \in A} |i\rangle \langle i| - \sum_{j \in B} |j\rangle \langle j| \right]. \quad (7.9)$$

Dans cette définition,  $|i\rangle$  représente un état localisé au site  $i$  (orbitale atomique),  $\langle i,j \rangle$  représente une somme sur chaque paire de plus proches voisins,  $\langle\langle i,j \rangle\rangle$  sur chaque paire de seconds voisins sur le cristal hexagonal dont  $A$  et  $B$  sont les deux sous-réseaux.

Des flux magnétiques sont ensuite ajoutés à ce modèle de façon à ce que le flux total à travers la cellule unité du réseau de Bravais soit nul. Ainsi ces flux

magnétiques brisent l'invariance par renversement du temps sans briser la symétrie de translation du modèle initial : une description du modèle en terme de Hamiltonien de Bloch au dessus de la zone de Brillouin est toujours pertinente. Ces flux induisent, *via* un mécanisme d'Aharonv-Bohm des déphasages qui peuvent être pris en compte à travers une substitution de Peierls sur les couplages entre second voisins uniquement :  $t_2^{(0)} \rightarrow t_2^{(0)} e^{i\phi}$ . Le Hamiltonien de Bloch correspondant à (7.9) est un Hamiltonien agissant sur un espace de Hilbert à deux composantes décrivant les composantes de fonctions d'onde sur les deux sous-réseaux. Il peut donc être paramétré selon ??? avec les fonctions

$$h_0 = 2t_2 \cos \phi \sum_{i=1}^3 \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_i) \quad (7.10a)$$

$$h_x = t [1 + \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_2) + \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_3)] \quad (7.10b)$$

$$h_y = t [\sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_2) + \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_3)] \quad (7.10c)$$

$$h_z = M - 2t_2 \sin \phi [\sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_1) - \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_2) + \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_3)] \quad (7.10d)$$

où les vecteurs  $\mathbf{a}_i$  sont définis sur la figure 4.1. qui correspond bien à une convention permettant à ces fonctions d'être périodique sur la zone de Brillouin :  $\mathbf{h}(\mathbf{k}+\mathbf{G}) = \mathbf{h}(\mathbf{k})$  avec  $\mathbf{G}$  un vecteur du réseau réciproque.

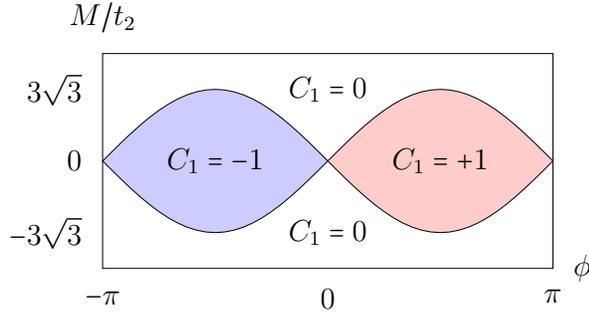


FIGURE 7.1 – Diagramme des phases du modèle d'Haldane (7.10) représenté en fonction du flux Aharonov-Bohm  $\phi$  associé à la brisure de symétrie de renversement du temps, et le potentiel alterné  $M/t_2$  associé à la brisure de symétrie de parité. Les différentes phases isolantes sont caractérisées par le nombre de Chern  $c^{(-)}$  de leur bande de valence.

Afin de déterminer le diagramme des phases, nous commençons par déterminer la différence d'énergie entre les deux bandes  $\epsilon_+(\mathbf{k}) - \epsilon_-(\mathbf{k}) = 2|\mathbf{h}(\mathbf{k})|$  qui est non nul sauf lorsque  $|M|/t_2 = 3\sqrt{3} \sin \phi$ . Le long de cette ligne,  $\mathbf{h}(\mathbf{k})$  s'annule en un point de la zone de Brillouin. Pour  $M = \phi = 0$  nous récupérons la situation du graphène où le gap s'annule en deux points  $\mathbf{K}$  et  $\mathbf{K}'$  de la zone de Brillouin. Le diagramme des phases, représenté sur la figure 7.1 consiste donc en trois phases isolantes, séparées par la ligne précédente correspondant à une phase semi-métallique.

Les trois phases isolantes ne sont pas équivalentes : leur bande de valence possèdent un nombre de Chern différent. En conséquence, une transition entre ces phases est associée naturellement à la fermeture du gap d'énergie, nécessaire pour faire varier cette propriété topologique des états de la bande de valence. La valeur du nombre de Chern est déterminée directement depuis l'expression (7.8), ou en remarquant que l'enroulement de la fonction  $\hat{\mathbf{h}}(\mathbf{k})$  sur la sphère peut être déduite du nombre de croisements (compté algébriquement) de cette fonction avec une direction (un rayon) fixé : si elle s'enroule une seule fois, ce nombre doit être de 1, indépendant du rayon choisi, et 0 (ou 1 fois dans deux "sens opposés") si elle ne s'enroule pas complètement sur la sphère. En choisissant cette direction selon l'axe  $Oz$ , nous commençons à identifier les vecteurs  $\mathbf{k}$  tel que  $\hat{\mathbf{h}}(\mathbf{k})$  croise l'axe  $Oz$ , c'est-à-dire tel que  $h_x(\mathbf{k}) = h_y(\mathbf{k}) = 0$ . Ces points correspondent donc naturellement aux points de Dirac  $\mathbf{K}, \mathbf{K}'$  du graphène. Le nombre de Chern vaut donc

$$c^{(-)} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}=\mathbf{K},\mathbf{K}'} \text{sign} [\mathbf{h}(\mathbf{k}) \cdot \hat{n}(\mathbf{k})], \quad (7.11)$$

où  $\hat{n}(\mathbf{k}) = \pm \hat{e}_z$  est le vecteur normal à la surface  $\Sigma$  en  $\mathbf{k}$ . Ce calcul direct donne

$$c_1 = \frac{1}{2} \left[ \text{sign} \left( \frac{M}{t_2} + 3 \sqrt{3} \sin(\phi) \right) - \text{sign} \left( \frac{M}{t_2} - 3 \sqrt{3} \sin(\phi) \right) \right], \quad (7.12)$$

dont les valeurs sont représentées sur la figure 7.1.



# Bibliographie

- [1] P. A. M. Dirac. Quantised singularities in the electromagnetic field. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Containing Papers of a Mathematical and Physical Character*, 133 :pp. 60–72, 1931.
- [2] 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.
- [3] D. Sticlet, F. Piéchon, J.-N. Fuchs, P. Kalugin, and P. Simon. Geometrical engineering of a two-band Chern insulator in two dimensions with arbitrary topological index. *Phys. Rev. B*, 85 :165456, April 2012.
- [4] J. J. Sakurai. *Modern Quantum Mechanics*. Addison Wesley, 1 edition, 9 1993.
- [5] C. L. Kane and E. J. Mele.  $Z_2$  topological order and the quantum spin Hall effect. *Phys. Rev. Lett.*, 95 :146802, Sep 2005.
- [6] Liang Fu and C. L. Kane. Topological insulators with inversion symmetry. *Phys. Rev. B*, 76 :045302, Jul 2007.
- [7] G. M. Graf and M. Porta. Bulk-edge correspondence for two-dimensional topological insulators. *Comm. Math. Phys.*, 324 :851, 2013.
- [8] L. Fu, C. L. Kane, and E. J. Mele. Topological insulators in three dimensions. *Phys. Rev. Lett.*, 98 :106803, March 2007.
- [9] Liang Fu and C. L. Kane. Time reversal polarization and a  $Z_2$  adiabatic spin pump. *Phys. Rev. B*, 74 :195312, November 2006.
- [10] Rahul Roy.  $Z_2$  classification of quantum spin Hall systems : An approach using time-reversal invariance. *Phys. Rev. B*, 79 :195321, May 2009.
- [11] J. E. Moore and L. Balents. Topological invariants of time-reversal-invariant band structures. *Phys. Rev. B*, 75 :121306, March 2007.
- [12] A. A. Soluyanov and D. Vanderbilt. Wannier representation of  $Z_2$  topological insulators. *Phys. Rev. B*, 83 :035108, January 2011.
- [13] Xiao-Liang Qi, Taylor L. Hughes, and Shou-Cheng Zhang. Topological field theory of time-reversal invariant insulators. *Phys. Rev. B*, 78 :195424, Nov 2008.
- [14] Zhong Wang, Xiao-Liang Qi, and Shou-Cheng Zhang. Equivalent topological invariants of topological insulators. *New Journal of Physics*, 12(6) :065007, 2010.
- [15] B. A. Bernevig, T. L. Hughes, and S.-C. Zhang. Quantum Spin Hall Effect and Topological Phase Transition in HgTe Quantum Wells. *Science*, 314 :1757–

- 1761, December 2006.
- [16] C. Liu, T. L. Hughes, X. L. Qi, K. Wang, and S. C. Zhang. Quantum spin hall effect in inverted type-ii semiconductors. *Phys. Rev. Lett.*, 100 :236601, 2008.
  - [17] G. Bastard. *Wave Mechanics applied to Semiconductor Heterostructures*. Les Editions de Physique, 1990.
  - [18] R. Jackiw and C. Rebbi. Solitons with fermion number 1/2. *Phys. Rev. D*, 13(13) :3398–3409, 1976.
  - [19] Shuichi Murakami. Phase transition between the quantum spin hall and insulator phases in 3d : emergence of a topological gapless phase. *New Journal of Physics*, 9 :356, 2007.
  - [20] Ari M. Turner and Ashvin Vishwanath. *Beyond Band Insulators : Topology of Semi-metals and Interacting Phases*, in "Topological Insulators", chapter 11. Elsevier, 2013.
  - [21] S. M. Young, S. Zaheer, J. C. Y. Teo, C. L. Kane, E. J. Mele, and A. M. Rappe. Dirac semimetal in three dimensions. *Phys. Rev. Lett.*, 108 :140405, 2012.
  - [22] Z. Wang, H. Weng, Q. Wu, X. Dai, and Zhong Fang. Three-dimensional dirac semimetal and quantum transport in  $\text{cd}_3\text{as}_2$ . *Phys. Rev. B*, 88 :125427, 88.
  - [23] G. Toulouse and M. Kléman. Principles of a classification of defects in ordered media. *J. Physique Lett.*, 37 :L–149, 1976.
  - [24] Grigory E. Volovik. *The Universe in a Helium Droplet*. Oxford University Press, 2003.
  - [25] G. Montambaux, F. Piéchon, J.-N. Fuchs, and M.O. Goerbig. Merging of dirac points in a 2d crystal. *Phys. Rev. B*, 80 :153412, 2009.
  - [26] L. Tarruell, D. Greif, T. Uehlinger, G. Jotzu, and T. Esslinger. Creating, moving and merging dirac points with a fermi gas in a tunable honeycomb lattice. *Nature*, 483 :302, 2012.