

# Chapitre 3

## Les pompes adiabatiques

### Sommaire

---

<b>1</b>	<b>Réseaux 1D au delà du modèle SSH</b> . . . . .	<b>2</b>
1-1	Hamiltonien à deux sites . . . . .	2
1-2	Le modèle de Rice-Mele . . . . .	3
1-3	La phase de Zak pour le modèle de Rice-Mele . . . . .	3
<b>2</b>	<b>Réseaux et super-réseaux optiques</b> . . . . .	<b>4</b>
2-1	Réseaux optiques à une dimension . . . . .	5
2-2	Super-réseau optique . . . . .	5
2-3	Mesure de la phase de Zak . . . . .	7
<b>3</b>	<b>Pompe adiabatique dans le modèle RM</b> . . . . .	<b>9</b>
3-1	Translation d'un réseau . . . . .	10
3-2	Déformation d'un réseau très profond. . . . .	11
3-3	L'expérience de Nakajima <i>et al.</i> . . . . .	12
<b>4</b>	<b>Pompe adiabatique et phase de Berry</b> . . . . .	<b>14</b>
4-1	Hamiltonien cyclant et phase géométrique . . . . .	14
4-2	Le déplacement du centre de masse . . . . .	15
4-3	Trajectoires sur la sphère de Bloch . . . . .	16
4-4	Déplacement quantifié et courbure de Berry . . . . .	18
<b>5</b>	<b>Pompe adiabatique et nombre de Chern</b> . . . . .	<b>19</b>
5-1	Singularité(s) de la connexion de Berry . . . . .	19
5-2	Le courant dans une pompe adiabatique . . . . .	21
5-3	Nombre de Chern et quantification du pompage . . . . .	22

---

Les deux cours précédents ont été principalement consacrés à l'étude d'un réseau 1D particulier, correspondant au modèle introduit par SU, SCHRIEFFER et al. (1979). Nous avons dégagé pour ce modèle deux classes topologiques distinctes, caractérisées par la valeur 0 ou  $\pi$  de la phase de Zak. Nous avons souligné que la distinction entre ces classes était possible grâce à la *symétrie de sous-réseau*, encore appelée *symétrie chirale*, qui procurait la protection topologique requise.

Nous allons dans ce chapitre chercher à aller au delà du modèle SSH, pour examiner ce qui se produit quand on perd la symétrie de sous-réseau. Il y a bien sûr de multiples façon de faire cette généralisation. Nous allons dans un premier temps ajouter un nombre minimum d'ingrédients : nous allons continuer à travailler dans le régime des liaisons fortes et nous allons également considérer uniquement des cellules à deux sites  $A$  et  $B$ . Mais nous allons relâcher la contrainte que ces deux sites soient équivalents, ce qui va nous conduire au modèle de RICE & MELE (1982). Nous décrirons ensuite comment implémenter cette classe générale de réseaux 1D bipartites avec des atomes froids piégés dans des ondes lumineuses stationnaires, et nous présenterons le principe de la mesure de la phase de Zak, faite par ATALA, AIDELSBURGER et al. (2013).

Nous aborderons ensuite le concept de *pompe adiabatique*, qui émerge quand on s'autorise à varier lentement dans le temps les paramètres du réseau, c'est-à-dire les couplages entre sites ou les énergies sur site. Nous verrons que pour une variation périodique de ces paramètres et pour une préparation adéquate des particules, le déplacement du centre de masse de

ces particules est quantifié en unité de période du réseau. Nous décrivons l'expérience de NAKAJIMA, TOMITA et al. (2016) qui a mis en évidence cette quantification dans une expérience d'atomes froids.

La pompe adiabatique constitue en fait un problème bi-dimensionnel, avec une dimension d'espace et une dimension de temps, pour lequel nous montrerons qu'il est possible d'exprimer la quantification trouvée en terme d'intégrale d'une courbure de Berry. Nous ferons ainsi un premier pas dans les problèmes topologiques de dimension supérieure à 1, et les résultats qui vont apparaître dans ce cours resurgiront donc sous une forme à peine modifiée pour les problèmes véritablement 2D que nous rencontrerons dans les chapitres ultérieurs.

## 1 Réseaux 1D au delà du modèle SSH

### 1-1 Hamiltonien à deux sites

Notre point de départ reste le même que celui du chapitre précédent. Nous considérons un réseau périodique unidimensionnel dans le régime des liaisons fortes, avec deux sites  $A$  et  $B$  par cellule unité. Le théorème de Bloch s'applique et la dynamique d'une particule est décrite par l'hamiltonien  $\hat{H}_q$ , représenté par une matrice  $2 \times 2$  hermitienne. Nous avons déjà eu l'occasion de signaler que ce type de matrice s'écrit de manière générale comme une combinaison linéaire de l'identité et des trois matrices de Pauli

$$E_0(q) \hat{1} - \mathbf{h}(q) \cdot \hat{\sigma}, \quad (1)$$

où le vecteur  $\mathbf{h}_q$  est caractérisé par son module  $|\mathbf{h}_q|$  et par son orientation en coordonnées sphériques, elle-même caractérisée par les angles  $\theta_q, \phi_q$ .

La partie proportionnelle à l'identité, qui fait intervenir l'énergie  $\alpha_q$ , n'a aucune influence sur les propriétés topologiques des bandes d'énergie : elle ne contribue pas à l'expression des états propres et n'intervient donc pas dans l'expression de la phase de Berry-Zak. Nous allons donc nous intéresser dans ce qui suit à la physique liée à la deuxième partie de (1)

$$\hat{H}_q = -\mathbf{h}(q) \cdot \hat{\sigma} = -|\mathbf{h}(q)| \begin{pmatrix} \cos \theta_q & e^{-i\phi_q} \sin \theta_q \\ e^{i\phi_q} \sin \theta_q & -\cos \theta_q \end{pmatrix}, \quad (2)$$

dont les états propres sont avec le choix de jauge du chapitre 1 :

$$|u_q^{(-)}\rangle = \begin{pmatrix} \cos(\theta_q/2) \\ e^{i\phi_q} \sin(\theta_q/2) \end{pmatrix} \quad |u_q^{(+)}\rangle = \begin{pmatrix} \sin(\theta_q/2) \\ -e^{i\phi_q} \cos(\theta_q/2) \end{pmatrix}. \quad (3)$$

L'hamiltonien  $\hat{H}_q$  est associé au problème du mouvement d'une particule dans un potentiel périodique de période spatiale  $a$ . Ici, cet hamiltonien est lui-même construit pour être périodique en  $q$  de période  $2\pi/a$  :

$$\hat{H}_{q+2\pi/a} = \hat{H}_q. \quad (4)$$

L'étude du modèle SSH nous a montré que l'émergence de classes topologiques distinctes provenait de la symétrie de sous-réseau, autrement dit du fait que les éléments diagonaux de  $\hat{H}_q$  sont nuls ( $\theta_q = \pi/2$ ). Les états  $|u_q^{(\pm)}\rangle$  sont alors confinés sur l'équateur de la sphère de Bloch. De ce confinement, nous avons déduit que les états  $|u_q^{(\pm)}\rangle$  faisaient un nombre entier de tours sur l'équateur de la sphère de Bloch dans  $q$  parcourait la zone de Brillouin de longueur  $2\pi/a$ . Ce nombre entier était l'invariant topologique du modèle SSH. Nous allons maintenant relâcher cette contrainte et la conséquence première sera que les états  $|u_q^{(\pm)}\rangle$  pourront désormais occuper n'importe quel point de la sphère de Bloch.

**Choix de jauge.** Dans l'expression (3), nous avons fixé la phase de  $|u_q^{(\pm)}\rangle$  en imposant que la première composante était réelle et positive ou nulle (puisque  $\theta_q$  se situe dans l'intervalle  $[0, \pi]$ ). Sauf mention explicite du contraire, nous adopterons ce choix de jauge dans la suite. Il conduit à l'expression suivante pour les connexions de Berry des deux bandes :

$$\mathcal{A}^{(-)}(q) = i\langle u_q^{(-)} | \partial_q u_q^{(-)} \rangle = -\frac{d\phi_q}{dq} \sin^2(\theta_q/2), \quad (5)$$

$$\mathcal{A}^{(+)}(q) = i\langle u_q^{(+)} | \partial_q u_q^{(+)} \rangle = -\frac{d\phi_q}{dq} \cos^2(\theta_q/2), \quad (6)$$

qui peut se mettre sous forme compacte :

$$\mathcal{A}^{(\pm)}(q) = -\frac{1}{2} \frac{d\phi_q}{dq} (1 \pm \cos \theta_q). \quad (7)$$

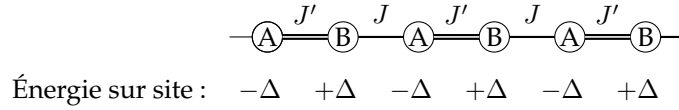


FIGURE 1. Modèle de Rice–Mele

## 1-2 Le modèle de Rice-Mele

Le modèle de RICE & MELE (1982) consiste à enrichir le modèle SSH en autorisant la possibilité d’avoir des énergies différentes  $E_A$  et  $E_B$  pour les sites  $A$  et  $B$  (figure 1). L’hamiltonien  $\hat{H}_q$  devient alors

$$\begin{aligned} \hat{H}_q &= \begin{pmatrix} E_A & -(J' + J e^{-iqa}) \\ -(J' + J e^{iqa}) & E_B \end{pmatrix} \\ &= \frac{1}{2}(E_A + E_B) \hat{1} - \begin{pmatrix} \Delta & J' + J e^{-iqa} \\ J' + J e^{iqa} & -\Delta \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (8)$$

où l’on a posé

$$2\Delta = E_B - E_A. \quad (9)$$

Nous prendrons dans la suite la référence d’énergie telle que  $E_A + E_B = 0$  pour éliminer le terme proportionnel à l’identité, qui ne joue aucun rôle dans la topologie du problème, comme nous l’avons déjà indiqué.

L’hamiltonien  $\hat{H}_q$  peut s’écrire sous la forme canonique  $\hat{H}_q = -\mathbf{h}(q) \cdot \hat{\sigma}$  avec

$$\mathbf{h}(q) = \begin{pmatrix} J' + J \cos(qa) \\ J \sin(qa) \\ \Delta \end{pmatrix}. \quad (10)$$

Le vecteur  $\mathbf{h}(q)$  est caractérisé par son module

$$\begin{aligned} |\mathbf{h}_q| &= [\Delta^2 + |J' + J e^{iqa}|^2]^{1/2} \\ &= [\Delta^2 + J^2 + J'^2 + 2JJ' \cos(qa)]^{1/2} \end{aligned} \quad (11)$$

et les deux angles  $\theta_q \in [0, \pi]$  et  $\phi_q \in ]-\pi, +\pi]$  :

$$\cos \theta_q = \frac{\Delta}{|\mathbf{h}_q|}, \quad e^{i\phi_q} \sin \theta_q = \frac{J' + J e^{iqa}}{|\mathbf{h}_q|}. \quad (12)$$

Ce modèle comporte bien sûr deux bandes d’énergie

$$E_q^{(\pm)} = \pm |\mathbf{h}(q)| \quad (13)$$

et ces deux bandes sont séparées par un gap qui ne peut s’annuler que si l’on a simultanément

$$\text{absence de gap ssi : } \Delta = 0 \quad \text{et} \quad J' = J. \quad (14)$$

## 1-3 La phase de Zak pour le modèle de Rice–Mele

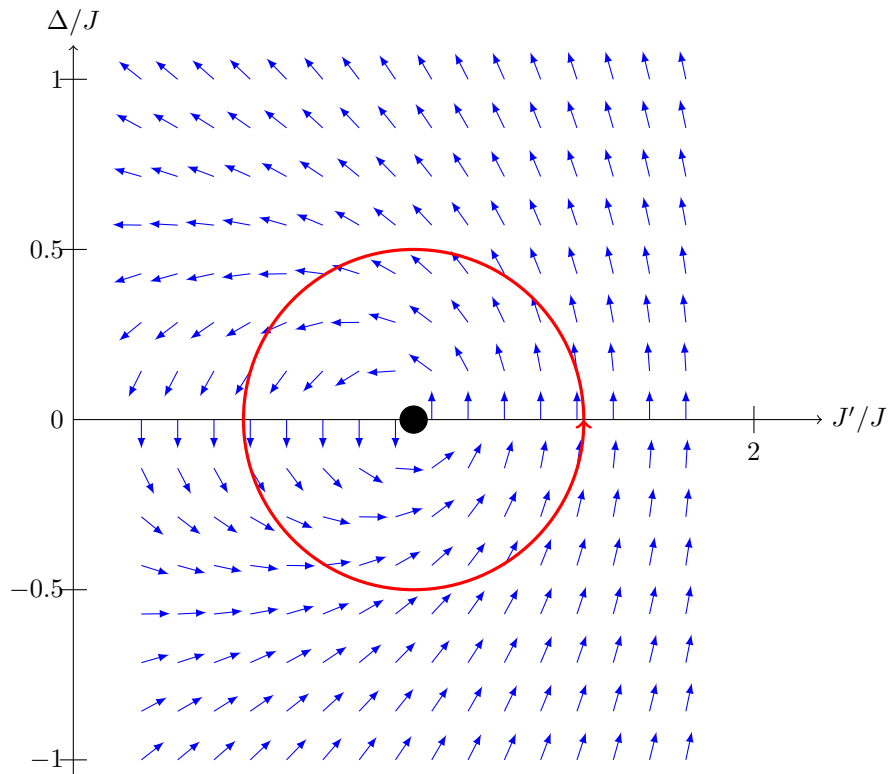
À partir de l’expression de ces états, on peut calculer la phase géométrique de Berry-Zak pour ce modèle, c’est-à-dire la phase accumulée par une particule qui parcourt la totalité de la zone de Brillouin  $[-\pi/a, \pi/a]$ . On trouve pour la bande inférieure :

$$\begin{aligned} \Phi_{\text{Zak}}^{(-)} &= i \int_{\text{BZ}} \langle u_q^{(-)} | \partial_q u_q^{(-)} \rangle dq = - \int_{\text{BZ}} \frac{\partial \phi_q}{\partial q} \sin^2(\theta_q/2) dq \\ &= -\frac{1}{2} \int_{\text{BZ}} \frac{\partial \phi_q}{\partial q} dq + \frac{1}{2} \int_{\text{BZ}} \frac{\partial \phi_q}{\partial q} \cos \theta_q dq. \end{aligned} \quad (15)$$

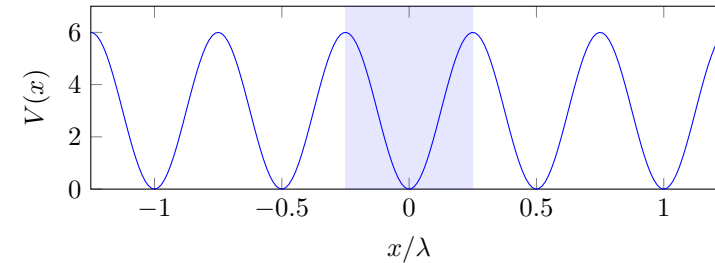
Le premier terme était déjà présent pour le modèle SSH et il donne 0 ou  $\pi$  selon que l’on considère le cas normal ( $J' > J$ ) ou topologique ( $J' < J$ ). Le second terme est propre au modèle de Rice–Mele, pour lequel  $\cos \theta_q$  n’est pas nul. Le calcul de cette phase est relativement long, mais sans difficulté et on a tracé le résultat sur la figure 2. Plus précisément, puisqu’une phase est une quantité définie modulo  $2\pi$ , on a représenté cette phase par un vecteur unitaire dans le plan  $[J'/J, \Delta]$ .

Le cas particulier du modèle SSH est représenté par l’axe horizontal  $\Delta = 0$  de ce graphe, avec une phase qui vaut  $\pi$  ou 0 selon que l’on est à gauche ou à droite du point  $J' = J$ . On voit que l’on peut connecter sans discontinuité ces deux parties de l’axe si on considère dans ce plan  $[J'/J, \Delta]$  un contour qui s’écartere de l’axe  $x$ . En d’autres termes, la possibilité de choisir  $\Delta \neq 0$  élimine la distinction topologique entre les deux phases du modèle SSH et on peut passer de l’une à l’autre sans jamais fermer le gap entre les deux bandes d’énergie.

On constate également que la variation de la phase de Zak autour du point singulier  $\Delta = 0, J' = J$  a une structure de tourbillon (ou vortex) :



**FIGURE 2.** Représentation vectorielle de la phase de Zak  $\Phi_{\text{Zak}}^{(-)}$  pour la bande fondamentale du modèle de Rice–Mele. On a tracé en bleu le vecteur unitaire d’angle polaire  $\Phi_{\text{Zak}}^{(-)} + \pi/2$  de sorte qu’une phase de Zak nulle (modulo  $2\pi$ ) est représentée par une flèche pointant vers le haut et une phase de Zak égale à  $\pm\pi$  par une flèche pointant vers le bas. On constate que ce vecteur présente une structure de vortex autour du point singulier où le gap entre les deux bandes s’annule :  $\Delta = 0$ ,  $J' = J$ . Le cercle rouge représente un cycle possible pour une pompe géométrique (§ 3).



**FIGURE 3.** Le potentiel sinusoïdal (16) de période  $a = \lambda/2$  et sa cellule unité.

cette phase s’enroule de  $\pm 2\pi$  si on suit un contour entourant ce point singulier, et cet enroulement va jouer un rôle décisif dans le principe d’une pompe adiabatique que nous étudierons en § 3.

## 2 Réseaux et super-réseaux optiques

Nous passons maintenant à la description de l’implémentation pratique des modèles SSH et RM avec des atomes froids, obtenue en plaçant les atomes dans un réseau optique. Ces réseaux sont formés par une onde lumineuse stationnaire, qui crée sur les atomes un potentiel proportionnel à l’intensité locale de la lumière. L’origine de ce potentiel, appelé *potentiel dipolaire*, réside dans le fait que le champ électrique du laser induit un dipôle électrique dans l’atome, ce dipôle interagissant lui-même avec le champ électrique de la lumière. Nous ne discuterons pas le formalisme détaillé permettant de calculer quantitativement ce potentiel et nous renvoyons le lecteur intéressé aux cours 2012-13 et 2014-15 et aux références qu’ils contiennent. Pour la suite, le seul élément utile est que pour un laser monochromatique d’intensité  $I(\mathbf{r})$ , le potentiel ressenti par un atome est  $V(\mathbf{r}) = \alpha I(\mathbf{r})$ , où le coefficient de proportionnalité  $\alpha$  dépend de la longueur d’onde de la lumière.

## 2-1 Réseaux optiques à une dimension

Le réseau optique le plus simple à une dimension utilise une onde lumineuse stationnaire, qui donne naissance au potentiel

$$V(x) = V_0 \sin^2(kx). \quad (16)$$

Le réseau impose une échelle spatiale, à savoir la période  $a = \pi/k = \lambda/2$  où  $k = 2\pi/\lambda$  est le nombre d'onde de la lumière et  $\lambda$  sa longueur d'onde. Il impose également une échelle d'énergie, appelée *énergie de recul* :

$$E_r = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \quad (17)$$

où  $m$  est la masse d'un atome. Le régime des liaisons fortes, sur lequel nous avons fondé notre analyse jusqu'ici, correspond au cas où la hauteur  $V_0$  de la barrière entre deux minima adjacents est grande devant l'énergie de recul :

$$\text{Liaisons fortes : } E_r \ll V_0. \quad (18)$$

Dans ce régime, le taux tunnel  $J$  d'un site au site voisin est très petit devant  $V_0$  et le réseau est décrit en bonne approximation par le modèle de Hubbard :

$$\hat{H} = -J \sum_j |j+1\rangle\langle j| + \text{h.c.}, \quad (19)$$

tous les sites ayant la même énergie. On peut montrer que la valeur asymptotique de  $J$  dans cette limite s'écrit (cf. cours 2012-13) :

$$\frac{J}{E_r} \approx \frac{4}{\sqrt{\pi}} \left( \frac{V_0}{E_r} \right)^{3/4} \exp \left[ -2 \left( \frac{V_0}{E_r} \right)^{1/2} \right]. \quad (20)$$

Nous avons représenté sur la figure 4 le spectre de bande obtenu pour  $V_0 = 6 E_r$ . Nous montrons en figure 5 un zoom sur la bande fondamentale, et nous vérifions que la variation de  $E_q^{(0)}$  avec  $q$  est bien décrite (à une constante additive près sans importance) par la prédiction du modèle de Hubbard

$$E_q = -2J \cos(qa) \quad (21)$$

avec le taux tunnel  $J \approx 0.05 E_r$ . Notons que la formule (20) donnerait  $J \approx 0.065 E_r$  pour  $V_0 = 6 E_r$ , ce qui indique que cette valeur de  $6 E_r$  n'est pas assez grande pour que le régime asymptotique soit complètement atteint.

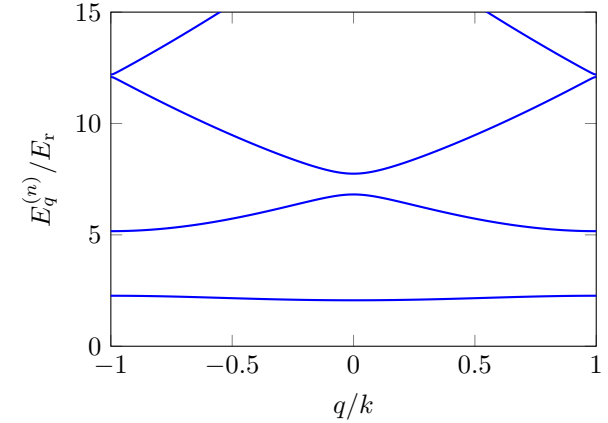


FIGURE 4. Premières bandes d'énergie pour le réseau sinusoïdal avec  $V_0 = 6 E_r$ .

## 2-2 Super-réseau optique

Pour enrichir la situation et arriver à une cellule unité à deux sites correspondant aux modèles SSH et RM, il faut générer

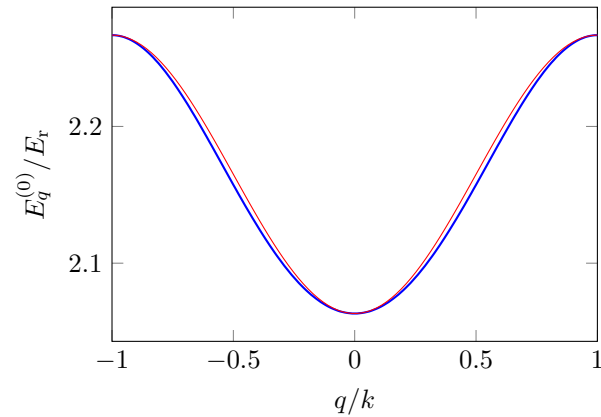
- deux types de saut dans le réseau avec une alternance régulière des coefficients tunnel  $J$  et  $J'$  ;
- une alternance régulière des énergies  $E_A = -\Delta$  et  $E_B = +\Delta$ .

Une configuration laser appelée *super-réseau* permettant de réaliser ce modèle est représentée sur la figure 6, et elle génère le potentiel de période  $\lambda$  :

$$V(x) = V_{\text{princ.}} \sin^2(kx) + V_{\text{sec.}} \sin^2[(kx + \phi)/2], \quad (22)$$

où nous supposons (sans perte de généralité) que la référence de position et d'énergie est telle que  $V_{\text{princ.}}$  et  $V_{\text{sec.}}$  sont tous deux positifs.

- Un premier réseau optique, appelé *réseau principal*, de longueur d'onde  $\lambda$  et donc de période  $a = \lambda/2$ , crée le réseau régulier de sites mentionné plus haut, que nous supposons bien décrit par le modèle des liaisons fortes (Hubbard). Les minima de ce réseau sont localisés aux points  $kx = n\pi$ , c'est-à-dire  $x = n\lambda/2$ ,  $n$  étant un entier positif ou négatif.



**FIGURE 5.** Bleu : bande fondamentale du réseau sinusoidal avec  $V_0 = 6 E_r$ . Rouge : variation de  $E_q$  pour le modèle de Hubbard (21) avec  $J = 0.05 E_r$  (décalé en énergie de  $+2.16 E_r$ ).

- Un réseau optique *secondaire*, d'intensité plus faible et de longueur d'onde  $2\lambda$ , vient moduler spatialement le potentiel créé par le réseau principal avec une période  $2a = \lambda$ .

L'action du réseau secondaire est caractérisée par deux paramètres : son amplitude de modulation  $V_{\text{sec}}$ . (supposée petite devant  $V_{\text{princ.}}$ ) et son déphasage spatial  $\phi$  par rapport au réseau principal. Le contrôle de ces deux paramètres permet de reproduire le modèle de Rice–Mele qui dépend lui aussi de deux paramètres.

Commençons par nous concentrer sur le cas  $\phi = \pm\pi/2$ . Le potentiel secondaire prend alors la même valeur  $V_{\text{sec}}/2$  sur tous les minima  $x = n\lambda/2$  du réseau principal, mais il module la hauteur de la barrière entre ces deux minima. On obtient ainsi le potentiel représenté sur les figures 7 (a) et (c) qui permet de réaliser le modèle SSH. Convenons de noter  $A$  les minima situés au voisinage de  $x = n\lambda$  et  $B$  les minima situés au voisinage de  $x = (n + \frac{1}{2})\lambda$ , ce qui conduit aux résultats suivants :

- Pour  $\phi = -\pi/2$ , la barrière entre  $A_1$  et  $B_1$  est plus basse que la barrière entre  $B_0$  et  $A_1$ , et on a donc  $J' > J$  [figure 7 (a)];



**FIGURE 6.** Principe de la réalisation d'un super-réseau, avec la superposition de deux ondes lumineuses stationnaires, l'une à la longueur d'onde  $\lambda$  et l'autre à la longueur d'onde  $2\lambda$ .

- Pour  $\phi = +\pi/2$ , on a au contraire  $J' < J$  [figure 7 (c)];

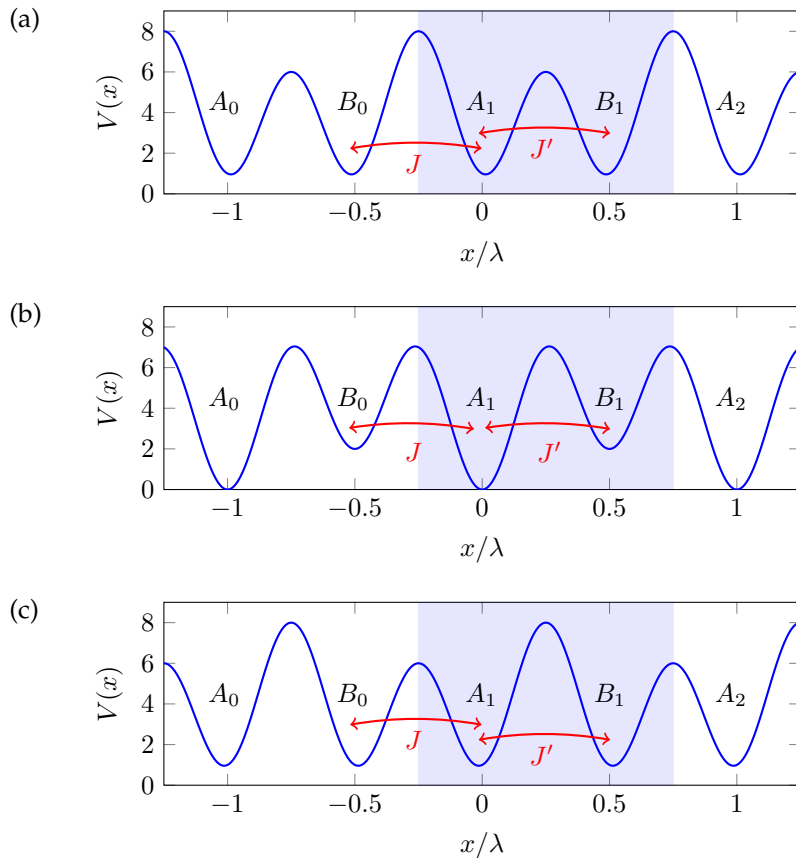
En basculant la phase  $\phi$  entre les deux valeurs  $\pm\pi/2$ , on réalise donc (à l'approximation des liaisons fortes), les deux cas topologiquement différents du modèle SSH,  $J' < J$  et  $J' > J$ .

Supposons maintenant que la phase relative entre les deux ondes stationnaires vaut  $\phi = 0$ ; le tracé du potentiel correspondant est donné en figure 7 (b). Le réseau secondaire prend cette fois des valeurs différentes aux minima du réseau principal. Aux points  $x = n\lambda$ , cette valeur est nulle alors qu'elle vaut  $V_{\text{sec}}$  sur les points  $kx = (n + \frac{1}{2})\pi$ . Dans un modèle de liaisons fortes, on génère ainsi deux types de sites avec  $E_A \neq E_B$ . En revanche, la barrière à franchir pour passer d'un minimum donné au minimum adjacent est identique pour un saut vers la droite ou un saut vers la gauche. On réalise donc le modèle RM dans le cas particulier  $J' = J$ ,  $\Delta > 0$ . Dans toutes les valeurs intermédiaires de la phase  $\phi$ , on a à la fois  $J \neq J'$  et  $\Delta \neq 0$ , ce qui permet de réaliser le cas générique du modèle RM.

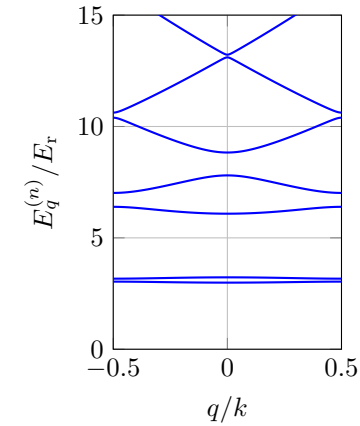
Le calcul numérique du spectre de bande pour ce super-réseau ne pose pas de difficulté. La cellule unité ayant cette fois-ci une largeur  $\lambda$ , la zone de Brillouin est  $q \in [-k/2, k/2[$ . On a représenté ce spectre de bande sur la figure 8 pour  $V_0 = 6 E_r$ ,  $V_1 = 2E_r$ , avec la phase  $\phi = \pi/2$  qui conduit à une situation de type SSH<sup>1</sup>.

Nous allons nous concentrer dans tout ce qui suit sur le bas du spectre de ce super-réseau et nous montrons en figure 9 un zoom sur les deux

1. Ce spectre est voisin de celui trouvé pour le réseau purement sinusoidal, si on trace ce dernier en configuration "repliée", obtenue en partant d'une cellule unité de taille  $\lambda$ , et donc une zone de Brillouin deux fois plus petite que celle de la figure 4 (voir appendice 1). On notera toutefois l'ouverture de gap en bords de bande pour  $q \approx \pm k/2$ , gaps qui sont dus au réseau secondaire et à la différence qui apparaît entre  $J$  et  $J'$ .



**FIGURE 7.** Tracé du potentiel (22) du super-réseau permettant de réaliser les différentes phases du modèle Rice-Mele. (a) et (c) correspondent au cas particulier du modèle SSH, avec  $\Delta = 0$  et :  $\phi = -\pi/2$ ,  $J' > J$  pour (a),  $\phi = +\pi/2$ ,  $J' < J$  pour (c). Le cas (b) est obtenu pour  $\phi = 0$  et correspond au modèle de Rice-Mele avec  $\Delta > 0$ ,  $J' = J$ . La zone grisée montre le choix fait pour la cellule unité.



**FIGURE 8.** Bandes d'énergie pour le super-réseau (22) pour  $V_{\text{princ.}} = 6E_r$ ,  $V_{\text{sec.}} = 2E_r$ ,  $\phi = \pm\pi/2$ .

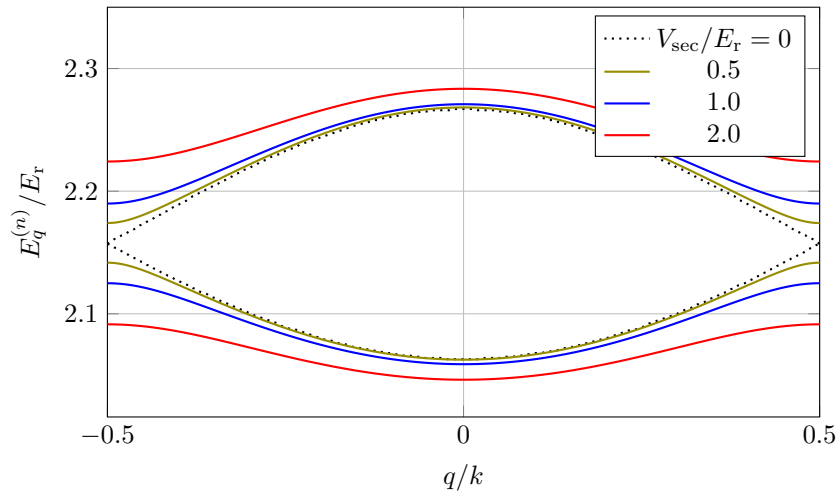
bandes les plus basses en présence des deux réseaux, pour des valeurs croissantes de  $V_{\text{sec.}}$ . En prenant comme exemple, la valeur  $V_{\text{sec.}} = E_r$ , on peut vérifier sur la figure 10 que la variation des énergies de ces deux bandes est en bon accord avec la prédiction du modèle SSH vue au chapitre 1 (avec un décalage global en énergie sans importance) :

$$E_q^{(\pm)} = \pm [J^2 + J'^2 + 2JJ' \cos(qa)]^{1/2}, \quad (23)$$

avec dans ce cas particulier  $J = 0.069 E_r$ ,  $J' = 0.037 E_r$ . Ces valeurs sont à comparer à la valeur  $J = 0.051 E_r$  obtenue au paragraphe précédent pour le même  $V_{\text{princ.}} = 6E_r$  et  $V_{\text{sec.}} = 0$  : le réseau secondaire, bien que faible, suffit à dissymétriser fortement les deux coefficients  $J$  et  $J'$ .

### 2-3 Mesure de la phase de Zak

Comme nous l'avons déjà indiqué à la fin du cours 1 dans le cadre du modèle SSH, la phase de Zak n'est pas véritablement un invariant topologique, car on peut modifier sa valeur en changeant la paramétrisation de la cellule unité du réseau. Passer d'une cellule unité composée de  $\{A_j, B_j\}$



**FIGURE 9.** Les deux bandes d'énergie les plus basses pour le super-réseau (22), pour  $V_{\text{princ.}} = 6E_r$  et différentes valeurs de  $V_{\text{sec.}}$ . On a choisi  $\phi = \pm\pi/2$ , correspondant à la réalisation du modèle SSH. On a décalé l'énergie des paires de bandes pour  $V_{\text{sec.}} \neq 0$ , de sorte qu'elles soient centrées au même endroit que la paire correspondant à  $V_{\text{sec.}} = 0$ .

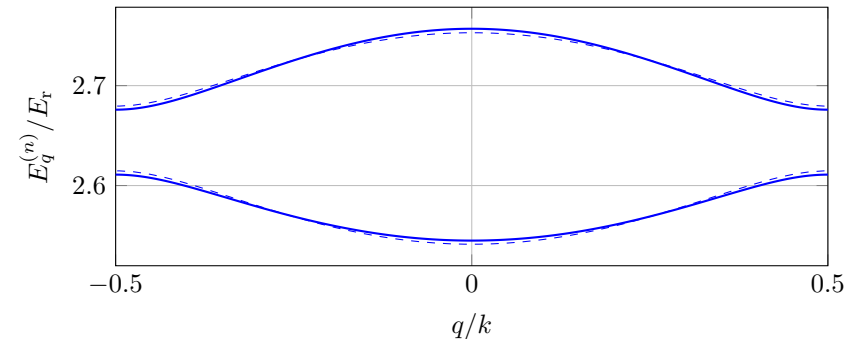
à une autre cellule unité composée de  $\{B_{j-1}, A_j\}$  revient à ajouter  $+\pi$  à la phase de Zak. En revanche, une fois que le choix d'une paramétrisation est fait, la différence entre les deux topologies  $J' < J$  et  $J' > J$  est fixée :

$$e^{i\Delta\Phi} = -1 \quad \text{avec} \quad \Delta\Phi \equiv \Phi_{\text{Zak}}^{[J'>J]} - \Phi_{\text{Zak}}^{[J'<J]}. \quad (24)$$

C'est donc cette différence qui est physiquement mesurable.

Pour y accéder, ATALA, AIDELSBURGER et al. (2013) ont mené une expérience que l'on peut schématiquement décrire de la manière suivante, pour une paramétrisation donnée de la cellule unité :

- On part d'atomes localisés autour d'un point  $q_i$  de la zone de Brillouin dans le super-réseau obtenu avec  $\phi = -\pi/2$ , c'est-à-dire le modèle SSH avec  $J' > J$  pour la paramétrisation de la figure 7.
- On applique une force faible  $F$  aux atomes qui leur fait parcourir la



**FIGURE 10.** Trait plein : bandes d'énergie les plus basses obtenues pour  $V_{\text{princ.}} = 6E_r$  et  $V_{\text{sec.}} = E_r$ . On a pris  $\phi = \pi/2$ , correspondant à la réalisation du modèle SSH. Tireté : prédiction (23) pour le modèle SSH pour  $J = 0.069E_r$ ,  $J' = 0.037E_r$  (avec un décalage global en énergie).

zone de Brillouin dans la bande fondamentale; c'est le phénomène des oscillations de Bloch sur lequel nous aurons l'occasion de revenir plus tard dans ce cours. À ce stade, le seul point utile est que le moment obéit en bonne approximation à "l'équation fondamentale de la dynamique", qui conduit ici à une variation linéaire avec le temps :

$$\hbar \frac{dq}{dt} = F \quad \longrightarrow \quad q(t) = q_i + Ft/\hbar. \quad (25)$$

- Au bout du temps  $t_B = 2\pi\hbar/(F\lambda)$ , les atomes ont parcouru l'ensemble de la zone de Brillouin :

$$q(t_B) \equiv q_f = q_i + 2\pi/\lambda \quad (26)$$

et ils ont donc accumulé (en plus de la phase dynamique) la phase géométrique  $\Phi_{\text{Zak}}^{[J'>J]}$ .

- A cet instant, on change brusquement la phase du réseau en passant de  $\phi = -\pi/2$  à  $\phi = +\pi/2$ . On reste donc dans le cadre du modèle SSH, mais avec à partir de maintenant  $J' < J$  (cf. figure 7).
- Au même instant, on change le signe de la force  $F$  pour que les atomes retraversent la zone de Brillouin dans le sens inverse du sens précé-



dent :

$$\hbar \frac{dq}{dt} = -F \quad \longrightarrow \quad q(t) = q_f - Ft/\hbar. \quad (27)$$

— A l'instant  $2t_B$  les atomes sont revenus en  $q_i$  et ils ont accumulé la phase géométrique totale  $\Delta\Phi = \Phi_{\text{Zak}}^{[J'>J]} - \Phi_{\text{Zak}}^{[J'<J]}$ .

La mesure de cette phase se fait par interférométrie et on compare le résultat à la prédiction théorique  $\Delta\Phi = \pi$  modulo  $2\pi$  indiqué en (24).

En pratique, la situation est un peu plus compliquée. La force  $F$  est générée par un gradient de champ magnétique, les atomes étant placés dans un sous-niveau Zeeman sensible au champ. Les atomes sont initialement préparés avec le moment  $q_i = 0$  et on utilise une impulsion micro-onde  $\pi/2$  pour les placer dans une superposition cohérente de deux états de spin  $|\uparrow\rangle$  et  $|\downarrow\rangle$ , qui ressentent des forces opposées  $\pm F$ . Le paquet d'ondes dans l'espace des moments se sépare donc en deux. Quand chaque paquet atteint le bord de la zone de Brillouin, on procède au changement instantané  $\phi : -\pi/2 \rightarrow +\pi/2$  pour basculer de  $J' > J$  à  $J' < J$ . Pour éliminer le bruit lié aux fluctuations du champ magnétique, on inverse simultanément les deux états  $|\uparrow\rangle$  et  $|\downarrow\rangle$  grâce à une impulsion micro-onde  $\pi$ , ce qui correspond à une technique *d'écho de spin*. Cette double action a pour effet de changer la sous-bande occupée par les atomes. On laisse ensuite les deux paquets d'ondes rejoindre le moment  $q = 0$ . En ce point, une dernière impulsion  $\pi/2$  permet de "lire" la phase relative des deux paquets. Une analyse détaillée permet de vérifier que les phases dynamiques accumulées sur chacune des trajectoires – en particulier celles dues aux déplacements Zeeman – se compensent et ne contribuent donc pas au signal.

La mesure de ATALA, AIDELSBURGER et al. (2013) a montré avec une très bonne précision que la phase relative mesurée est effectivement égale à  $\pi$  (à 3% près), en accord avec la topologie attendue pour le modèle SSH (figure 12). ATALA, AIDELSBURGER et al. (2013) ont ensuite étendu leur procédure au cas général d'un réseau Rice–Mele ( $\Delta \neq 0$ ), obtenu en prenant  $\phi \neq \pm\pi/2$ , et ils ont là aussi obtenu des résultats en très bon accord avec la prédiction générale (15) tracée en figure 2.

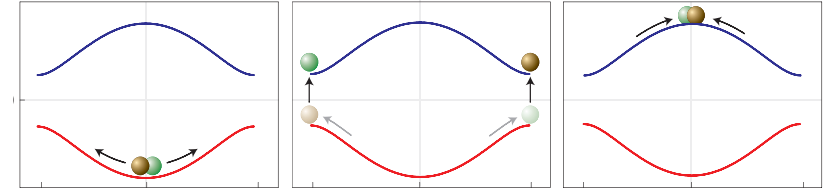


FIGURE 11. Protocole suivi par ATALA, AIDELSBURGER et al. (2013) pour mesurer la phase de Zak dans le cadre du modèle SSH, réalisé avec un super-réseau et une séquence d'impulsions micro-onde  $\pi/2-\pi-\pi/2$ .

### 3 Pompe adiabatique dans le modèle RM

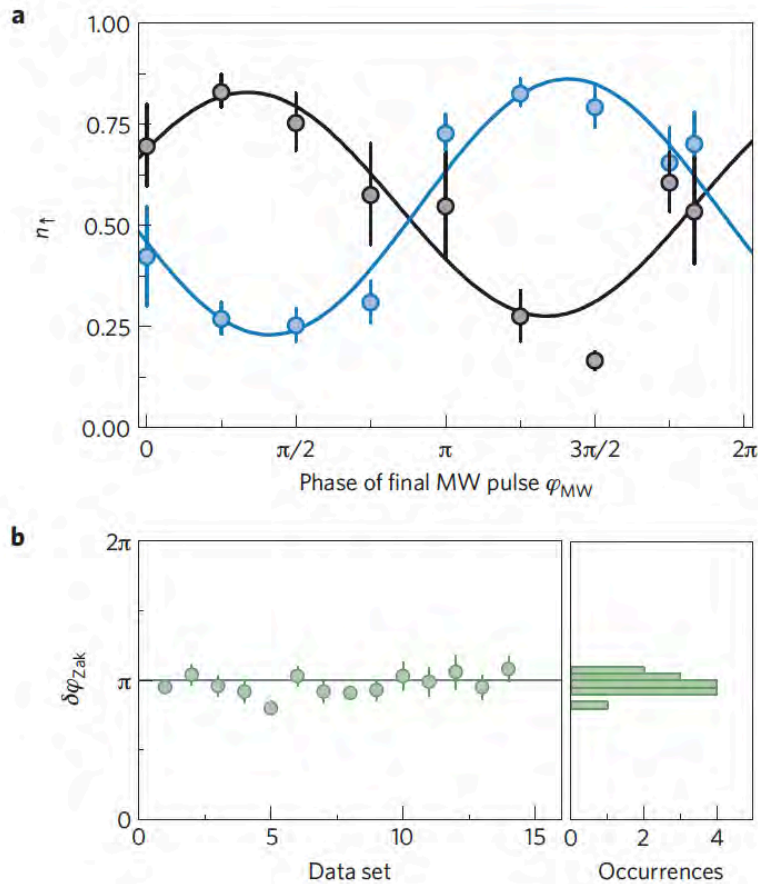
Nous abordons maintenant un aspect important de la physique des phases topologiques de la matière, la réalisation de *pompes adiabatiques*, encore appelées *pompes de Thouless*, d'après la proposition initiale faite dans THOULESS (1983).

De manière très générale, une pompe adiabatique peut se définir comme un processus dans lequel :

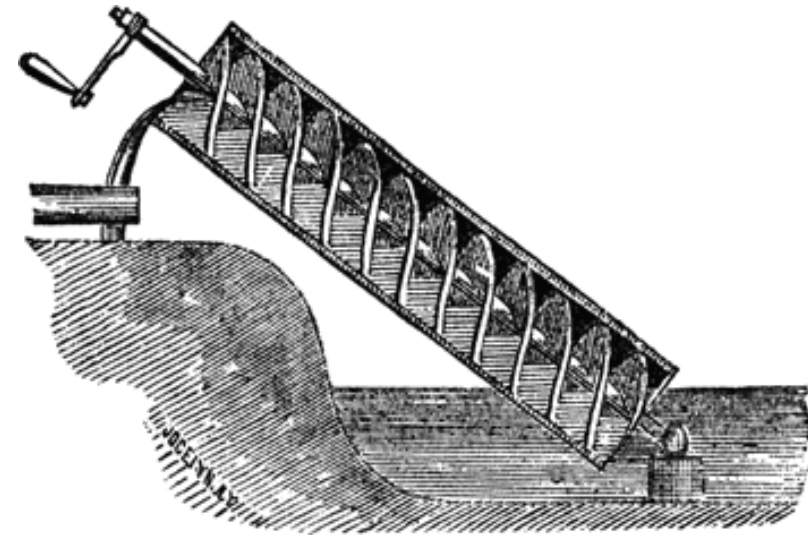
- On change de manière cyclique dans le temps les paramètres qui contrôlent un fluide, par exemple son hamiltonien.
- À l'issue d'un cycle, le fluide n'est pas revenu à sa position initiale, mais il s'est produit un transfert de matière dont la quantité ne dépend pas de la durée du cycle.

Un exemple bien connu est la vis d'Archimède, représentée en figure 13, pour laquelle une quantité donnée de liquide est transférée du bas vers le haut en un tour de manivelle, quelle que soit la vitesse de rotation de cette manivelle.

Nous allons nous intéresser ici à la version quantique de ce concept. Nous allons voir en particulier comment la structure "tourbillonnaire" de la phase de Zak autour du point singulier  $\Delta = 0$ ,  $J' = J$  permet de fabriquer une telle pompe. Notons que ce concept s'applique en premier lieu à des bandes d'énergies complètement remplies, une situation atteinte de manière simple si l'on dispose de fermions polarisés. Si on s'intéresse à la



**FIGURE 12.** Haut : résultat obtenu par ATALA, AIDELSBURGER *et al.* (2013) pour la mesure du taux d'occupation de l'état  $|\uparrow\rangle$  après la séquence décrite dans le texte. Les points bleus ont été obtenus en basculant  $\phi$  de  $-\pi/2$  à  $\pi/2$  et les points noirs correspondent au cas où  $\phi$  n'a pas été modifiée. La différence de phase entre les deux courbes donne accès à  $\Delta\Phi = \Phi_{Zak}^{[J'>J]} - \Phi_{Zak}^{[J'<J]}$ . Bas : résultat trouvé pour  $\Delta\Phi$ . La moyenne de 14 séquences indépendantes donne  $\Delta\Phi = 0.97(2)\pi$ .



**FIGURE 13.** Un exemple de pompe adiabatique (classique) : la vis d'Archimède (figure : Wikipedia).

bande fondamentale, il faut pour cela placer une particule par cellule unité du réseau. Ce concept peut également se généraliser à des bosons, pourvu que chaque état de Bloch  $|\psi_q^{(n)}\rangle$  de la bande considérée, par exemple la bande fondamentale  $n = 0$ , ait la même population moyenne.

Pour voir comment la notion de pompe adiabatique peut émerger, nous allons commencer par regarder deux situations simples utilisant des potentiels de réseaux optiques, qui conduisent toutes deux à un déplacement quantifié d'une particule dans un réseau.

### 3-1 Translation d'un réseau

Le premier exemple (presque trop simple!) est obtenu avec un simple réseau sinusoïdal

$$V(x) = V_0 \sin^2(kx - \phi), \tag{28}$$

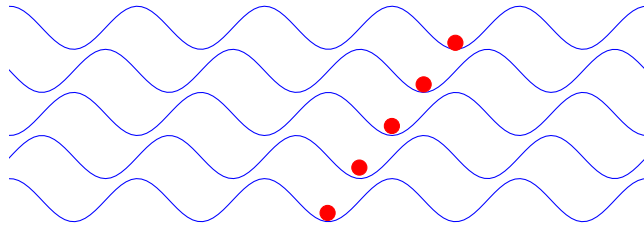


FIGURE 14. Transport adiabatique par simple translation d'un réseau.

supposé très profond de sorte que tout effet tunnel est bloqué. Une particule préparée au fond d'un puits de potentiel y reste donc indéfiniment. Si on varie dans le temps de manière très lente la valeur de  $\phi$  de 0 à  $\pi$ , tous les minima se décalent d'une période  $a$  du réseau et le déplacement de la particule est donc égal à  $a$  (figure 14).

### 3-2 Déformation d'un réseau très profond.

Le second exemple est nettement plus intéressant. Il est obtenu en déformant continument le potentiel d'un super-réseau de période  $a = 2\pi/k$  :

$$V(x) = V_{\text{princ.}} \sin^2(kx) + V_{\text{sec.}} \sin^2[(kx + \phi)/2] \quad (29)$$

en faisant varier uniquement la phase  $\phi$ . La déformation correspondante est représentée sur la figure 15. Prenons une particule localisée initialement dans un des puits et supposons que le réseau soit suffisamment profond pour que l'effet tunnel soit négligeable à travers les barrières "hautes". La particule va donc pouvoir passer adiabatiquement d'un site à l'autre quand les sites, situés de part et d'autre d'une barrière basse, prennent la même énergie. Le problème est identique à celui d'un double puits initialement asymétrique, qui devient momentanément symétrique, puis bascule sur l'asymétrie opposée (figure 16).

La série de dessins de la figure 15 montre qu'une particule située initialement sur un site  $A_j$  se déplace d'une unité  $a$  vers la droite et se retrouve donc sur le site  $A_{j+1}$  quand la phase  $\phi$  a augmenté de  $2\pi$ . Dans le même temps, une particule initialement sur le site  $B_j$  se retrouve sur le

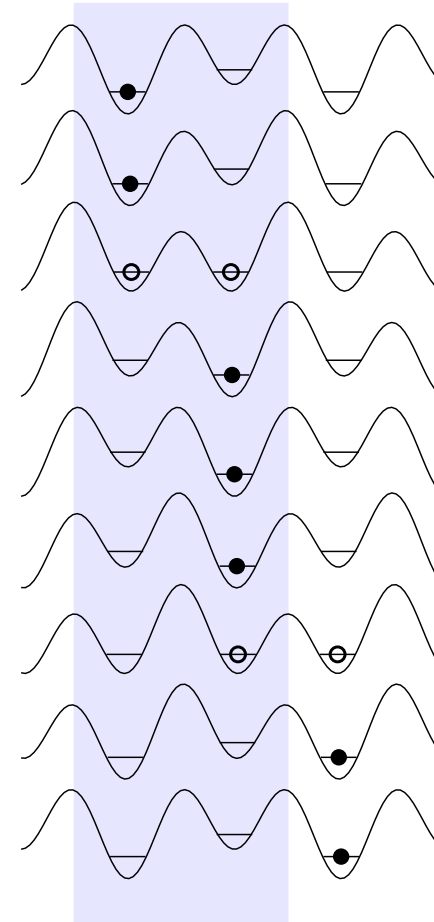
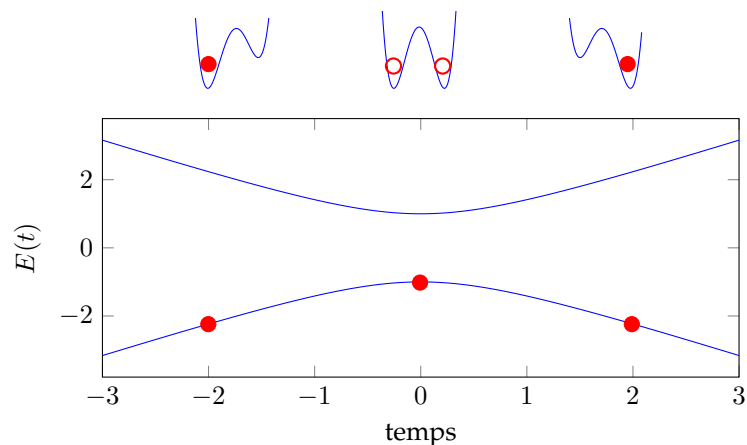


FIGURE 15. Déplacement quantifié d'une particule localisée initialement sur un site  $A$  lors de la déformation du potentiel de super-réseau (29) engendrée par la variation de  $\phi$  de 0 à  $2\pi$ . Une particule initialement située sur un site  $B$  se déplacerait dans le sens opposé.



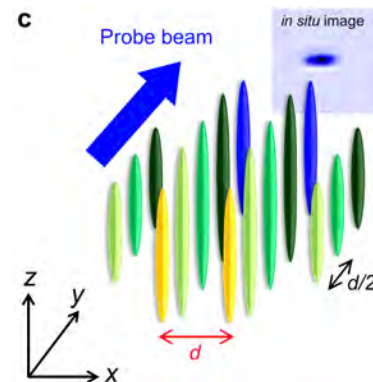
**FIGURE 16.** Passage adiabatique d'un site à l'autre d'un double puits quand on change lentement l'énergie relative des deux minima de potentiel.

site  $B_{j-1}$  après ce même changement de phase. Selon l'état initialement occupé par la particule, on génère donc deux courants en sens opposé pour un même cycle de pompe, ce qui est nettement moins intuitif que notre premier exemple d'un réseau translaté.

### 3-3 L'expérience de Nakajima *et al.*

L'idée de la pompe adiabatique (ou "topologique") date de 1983 avec l'article de Thouless, mais c'est véritablement grâce aux expériences menées avec des atomes froids dans des réseaux optiques qu'elle a pu être mise en pratique (HATSUGAI & FUKUI 2016). Il n'est en effet pas possible de moduler dans le temps les paramètres d'un réseau cristallin pour des électrons, et la version photonique de la pompe adiabatique n'est pas simple à implémenter non plus [voir cependant WIMMER, PRICE *et al.* (2017) et OZAWA, PRICE *et al.* (2018)].

Pour des atomes froids, la déformation périodique du potentiel de confinement peut se faire relativement simplement en utilisant un super-

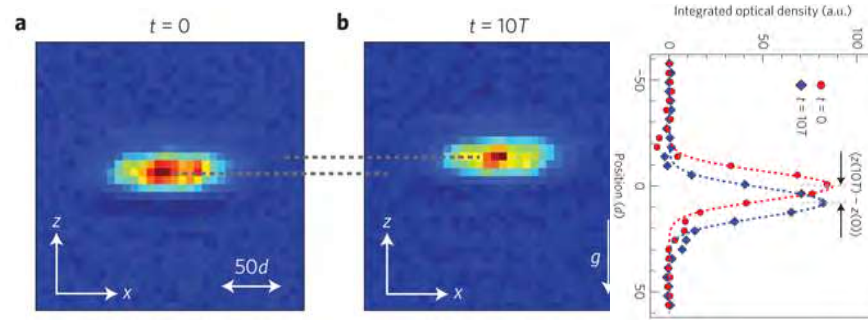


**FIGURE 17.** Série de tubes verticaux indépendants. Le potentiel de super-réseau est appliqué le long de l'axe  $z$ . Figure extraite de NAKAJIMA, TOMITA *et al.* (2016), *sup.mat.*

réseau optique, et en modulant dans le temps la phase relative des deux ondes stationnaires et leurs intensités. Nous allons décrire ici une expérience menée à Kyoto sur un gaz d'atomes fermioniques (NAKAJIMA, TOMITA *et al.* 2016). Signalons qu'il y a eu de manière quasi-simultanée la publication de deux autres résultats expérimentaux obtenus avec des bosons à Munich (LOHSE, SCHWEIZER *et al.* 2016) et au JQI Maryland (LU, SCHEMMER *et al.* 2016).

L'expérience de Kyoto a été menée avec  $\sim 10^4$  atomes d'Ytterbium  $^{171}\text{Yb}$  piégés dans une série de tubes verticaux indépendants (figure 17). Dans chaque tube, les atomes sont placés dans un potentiel de période spatiale 266 nm, superposé avec un potentiel de période double, 532 nm. La phase relative entre les profils spatiaux de ces deux ondes, notée  $\phi$  dans (22), est contrôlée par un interféromètre auxiliaire. Elle peut être variée continuellement de  $\sim 20\pi$  dans cette expérience, ce qui correspond à une dizaine de cycles de pompage.

Les atomes sont préparés dans la bande fondamentale du réseau avec un taux de remplissage de  $\sim 0.7$  par état de spin au centre du nuage. On ne part donc pas *stricto sensu* d'un isolant de bande (remplissage unité) mais la bande est remplie de manière uniforme, ce qui est suffisant pour observer la quantification du déplacement du centre de masse; la température



**FIGURE 18.** Image in situ du nuage d'atomes avant et après 10 cycles de la pompe adiabatique. La durée  $T$  d'un cycle de la pompe est de 50 ms. Le déplacement du centre de masse le long de l'axe  $z$  révèle la quantification recherchée. Figure extraite de NAKAJIMA, TOMITA et al. (2016).

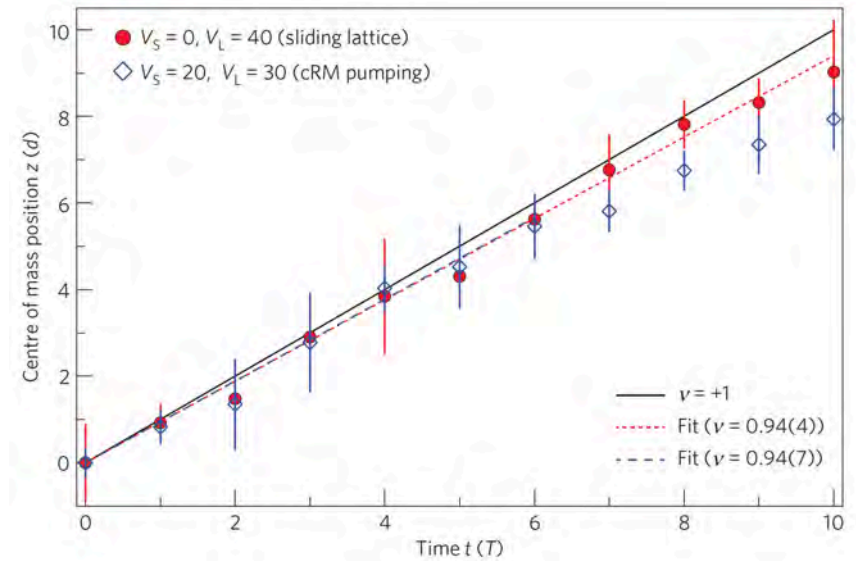
est en effet notablement supérieure à la largeur de cette bande, tout en restant notablement inférieure au gap qui sépare la bande fondamentale de la première bande excitée.

Une fois les cycles de pompage effectués, on prend une image du nuage *in situ* que l'on compare avec l'image de référence prise pour un nuage non déplacé (figure 18); on repère ainsi le décalage entre les centres de masse le long de la direction verticale  $z$ .

La première expérience menée par NAKAJIMA, TOMITA et al. (2016) a consisté à mesurer le déplacement induit par un réseau en translation. Il suffit pour cela d'annuler l'intensité du réseau de courte période  $V_{\text{princ.}}$  et de varier linéairement dans le temps la phase  $\phi$ . Le déplacement mesuré est représenté sur la figure 19 par des points rouges. On vérifie qu'il est bien linéaire avec le nombre de cycles de pompage, avec un coefficient de proportionnalité compatible avec la valeur attendue de  $a = 532$  nm tous les temps  $T$ , c'est-à-dire à chaque fois que  $\phi$  augmente de  $2\pi$ .

La seconde expérience a consisté à appliquer une déformation périodique en temps du potentiel de Rice–Mele. Cette déformation est similaire à celle représentée en figure 15 et elle est obtenue en variant linéairement  $\phi$  pour une valeur constante de l'amplitude des deux réseaux :

$$V_{\text{princ.}} = 30 E_r \quad V_{\text{sec.}} = 20 E_r \quad (30)$$



**FIGURE 19.** Déplacement du centre de masse du nuage d'atomes en fonction du nombre de cycles de la pompe géométrique. Les points rouges correspondent à un simple réseau traduit, les points bleus à une déformation similaire à celle représentée en figure 15. Figure extraite de NAKAJIMA, TOMITA et al. (2016).

où  $E_r = \hbar^2 k^2 / (2m)$  est l'énergie de recul à la longueur d'onde  $\lambda = 2\pi/k = 532$  nm. Pour ces grandes valeurs de profondeur de réseau, le mécanisme simplifié représenté sur la figure 15 décrit en bonne approximation le principe de la pompe adiabatique. Les résultats correspondants sont également tracés en figure 19 (points bleus). Quand le nombre de cycles de pompe n'est pas trop grand ( $\lesssim 6$ ), on trouve là aussi un déplacement en accord avec la quantification attendue. Pour les durées de pompage plus longues, le déplacement est plus faible que prévu. NAKAJIMA, TOMITA et al. (2016) attribuent cet effet au confinement harmonique additionnel le long de l'axe  $z$ , qui crée un déplacement d'énergie comparable à la largeur de bande quand le déplacement du centre de masse augmente au delà de  $6a$ .

NAKAJIMA, TOMITA et al. (2016) ont également testé la robustesse de cette pompe adiabatique en déformant le contour suivi dans le plan ( $J', \Delta$ ).



Rappelons que l'on s'attend à ce que la pompe fonctionne si et seulement si le contour encercle le point critique  $J' = J$ ,  $\Delta = 0$ . Par ailleurs, le signe du déplacement est lié au sens dans lequel le contour est parcouru. L'expérience de NAKAJIMA, TOMITA et al. (2016) a confirmé ces différentes prédictions, comme on peut le voir sur la figure 20.

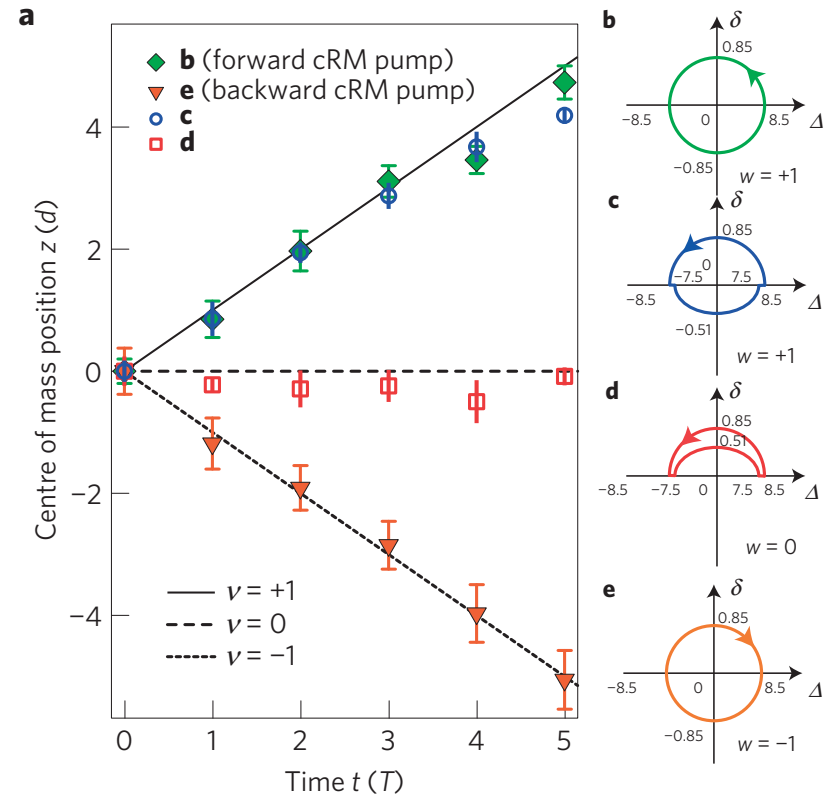
## 4 Pompe adiabatique et phase de Berry

Les exemples étudiés au paragraphe précédent tiraient parti du fait que l'effet tunnel jouait un rôle négligeable la plupart du temps, ce qui simplifiait considérablement l'analyse. Le résultat de THOULESS (1983) a une portée beaucoup plus générale, comme nous allons le voir maintenant. Dans cette partie, nous allons utiliser essentiellement un raisonnement géométrique, bien adapté au cas du modèle RM pour lequel nous pouvons représenter les états par un pseudo-spin 1/2. Dans la partie 5, nous utiliserons une approche plus générale, à partir d'un traitement fondé sur la réponse linéaire.

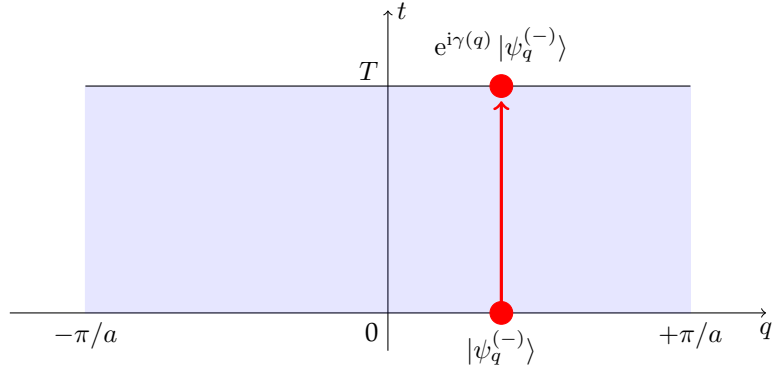
### 4-1 Hamiltonien cyclant et phase géométrique

Pour analyser l'évolution du système au cours d'un cycle de la pompe, partons de l'état de Bloch  $|\psi_q^{(-)}\rangle$  de la bande fondamentale du modèle de Rice–Mele, avec un moment  $q$  donné. Considérons une variation très lente des paramètres  $J'$  et  $\Delta$ , qui réalise en une période de cycle  $T$  une trajectoire fermée comme celle représentée par un cercle rouge sur la figure 2. Le raisonnement se fait alors en deux étapes :

- Puisque qu'à tout instant  $t$  entre 0 et  $T$  l'hamiltonien  $\hat{H}(t)$  reste périodique de période  $a$ , le théorème de Bloch dans sa version dépendante du temps s'applique : l'état du système reste à chaque instant une fonction de Bloch, c'est-à-dire le produit de l'onde plane  $e^{iqx}$  par une fonction  $u(x, t)$  (ou  $|u(t)\rangle$ ) périodique sur le réseau.
- Prenons maintenant en compte le fait que les paramètres  $J'$  et  $\Delta$  varient très lentement. Le théorème adiabatique indique que l'état du système, caractérisé par la fonction périodique  $|u(t)\rangle$ , va en bonne approximation rester dans la bande fondamentale, donc dans l'état  $|u_{q,t}^{(-)}\rangle$



**FIGURE 20.** Robustesse topologique de la pompe adiabatique, quand on varie le contour dans le plan  $J'$ ,  $\Delta$  (avec ici  $2\delta = J' - J$ ). Figure extraite de NAKAJIMA, TOMITA et al. (2016).



**FIGURE 21.** Diagramme bi-dimensionnel avec les moments en abscisse et le temps en ordonnée. Le mouvement adiabatique correspond à des trajectoires rectilignes comme la flèche rouge, la connaissance de la dynamique se résumant à la phase  $\gamma(q)$ .

donné en (3). Cet état varie dans le temps puisqu'il dépend des valeurs instantanées de  $J'$  et  $\Delta$ , via les angles  $\theta_q$  et  $\phi_q$ . On sait que l'approximation adiabatique sera valable pour un temps de cycle  $T$  suffisamment long pourvu qu'il n'y ait pas d'annulation de l'écart entre l'état suivi et les autres états accessibles, en l'occurrence l'état de même  $q$ , mais appartenant à l'autre bande  $|u_{q,t}^{(+)}$ .

Pour que le raisonnement précédent s'applique pour tous les moments  $q$  de la zone de Brillouin, il faut que le gap entre la bande fondamentale et la bande excitée ne se ferme pas, donc que notre contour ne passe pas par le point central du vortex de la figure 2,  $J' = J, \Delta = 0$ . Une fois ce fait acquis, on sait que l'état du système à l'instant final  $T$  sera identique à l'état initial  $|\psi_{q,t}^{(-)}\rangle$ , à une phase près.

Il nous reste bien sûr à prendre en compte ce facteur de phase, composé comme toujours de deux termes :

$$e^{i\gamma(q)} = e^{i\Phi_{\text{dyn}}(q)} e^{i\Phi_{\text{geom}}(q)}. \tag{31}$$

La phase dynamique s'écrit (cf. cours 1)

$$\Phi_{\text{dyn}}(q) = -\frac{1}{\hbar} \int_0^T E_q^{(-)}(t) dt, \tag{32}$$

où  $E_q^{(-)}(t)$  représente l'énergie de l'état  $|\psi_q^{(-)}\rangle$  de la bande fondamentale, pour les valeurs des paramètres  $J, J'$  et  $\Delta$  à l'instant  $t$ . La phase géométrique vaut quant à elle

$$\Phi_{\text{geom}}(q) = \int_0^T \mathcal{A}_2(q, t) dt. \tag{33}$$

où nous avons introduit<sup>2</sup> la connexion de Berry temporelle

$$\mathcal{A}_2(q, t) = i\langle u_{q,t} | \partial_t u_{q,t} \rangle, \tag{34}$$

l'indice 2 faisant référence au fait qu'on a ici deux variables,  $q$  et  $t$ , et que l'on prend la dérivée du ket  $|u_{q,t}\rangle$  par rapport à la seconde.

Nous venons donc de montrer que l'action de l'opérateur d'évolution à une particule  $\hat{U}(T)$  sur la durée  $T$  d'un cycle de la pompe est diagonal dans la base des états de Bloch  $|\psi_q^{(-)}\rangle$  :

$$\hat{U}(T) = \exp[i\gamma(\hat{q})] \tag{35}$$

où  $\hat{q}$  est l'opérateur moment de la particule, admettant les états  $|\psi_q\rangle$  comme vecteurs propres, avec la valeur propre  $q$ .

### 4-2 Le déplacement du centre de masse

Le fait que l'opérateur d'évolution soit diagonal dans la base des  $|\psi_q\rangle$  permet de déduire assez simplement la translation du centre de masse  $X$  d'une assemblée de  $N$  particules identiques sans interaction. Remarquons d'abord que puisque l'opérateur position du centre de masse

$$\hat{X} = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \hat{x}_n \tag{36}$$

est un opérateur "à une particule", sa moyenne se calcule à partir de l'opérateur densité réduit à un corps  $\hat{\rho}^{(1)}$ , obtenu en prenant la trace partielle de l'opérateur densité total sur  $N - 1$  particules :

$$\langle X(T) \rangle = \text{Tr} \left( \hat{x} \hat{\rho}^{(1)}(T) \right). \tag{37}$$

2. On oublie ici la mention  $(-)$  de la bande puisque seule la bande inférieure est supposée occupée.

Par ailleurs, si les particules sont indépendantes, l'évolution de l'opérateur densité réduit  $\hat{\rho}^{(1)}$  est donnée par

$$\hat{\rho}^{(1)}(T) = \hat{U}(T) \hat{\rho}^{(1)}(0) \hat{U}^\dagger(T), \quad (38)$$

de sorte que l'on obtient après permutation circulaire à l'intérieur de la trace :

$$\langle X(T) \rangle = \text{Tr} \left( \hat{x}(T) \hat{\rho}^{(1)}(0) \right) \quad (39)$$

où l'on a posé :

$$\hat{x}(T) = \hat{U}^\dagger(T) \hat{x} \hat{U}(T) = \hat{x} - \partial_q \gamma(\hat{q}). \quad (40)$$

Dans la dernière égalité, nous avons utilisé le fait que l'opérateur position de chaque particule est défini ici comme canoniquement associé à son moment, de sorte que  $[\hat{x}, \hat{q}] = i$  et

$$e^{-i\gamma(\hat{q})} \hat{x} e^{+i\gamma(\hat{q})} = \hat{x} - \partial_q \gamma(\hat{q}). \quad (41)$$

On trouve donc le déplacement recherché pour le centre de masse

$$\Delta x \equiv \langle X(T) \rangle - \langle X(0) \rangle = -\langle \partial_q \gamma(\hat{q}) \rangle. \quad (42)$$

Supposons maintenant que la bande d'énergie inférieure est uniformément remplie quand l'assemblée de particules est dans l'état  $|\Psi\rangle$ , c'est-à-dire que l'opérateur densité à un corps est proportionnel à l'identité dans la base  $|\psi_q^{(-)}\rangle$ . La moyenne intervenant dans (42) devient alors une simple intégrale sur la zone de Brillouin (de largeur  $2\pi/a$ ) :

$$\Delta x = -\frac{a}{2\pi} \int_{-\pi/a}^{+\pi/a} \partial_q \gamma(q) dq. \quad (43)$$

Dans cette intégrale, la contribution de la phase dynamique est nulle du fait de la périodicité de l'énergie  $E_q$  avec  $q$  et il reste à évaluer

$$\Delta x = -\frac{a}{2\pi} \int_{-\pi/a}^{+\pi/a} \frac{d\Phi_{\text{geom}}}{dq} dq \quad \text{avec} \quad \Phi_{\text{geom}}(q) = \int_0^T \mathcal{A}_2(q, t) dt. \quad (44)$$

### 4-3 Trajectoires sur la sphère de Bloch

Face à l'expression (44), le premier réflexe est d'intégrer simplement le résultat pour trouver :

$$\Delta x = -\frac{a}{2\pi} [\Phi_{\text{geom}}(+\pi/a) - \Phi_{\text{geom}}(-\pi/a)] \quad (45)$$

et de trouver ensuite la valeur de cette phase géométrique  $\Phi_{\text{geom}}(\pm\pi/a)$  pour les deux extrémités de la zone de Brillouin.

Cette démarche, que nous allons suivre dans un instant, appelle néanmoins une mise en garde. Nous sommes en train de manipuler ici des expressions mathématiques qui peuvent être singulières en certains points de l'espace  $(q, t)$ . En effet, le paramétrage (3) de l'état  $|u_{q,t}\rangle$  en termes des angles polaires  $\theta_{q,t}$  et  $\phi_{q,t}$  peut conduire à des expressions mathématiques mal définies pour la connexion de Berry "temporelle"  $\mathcal{A}_2 = i\langle u_{q,t} | \partial_t u_{q,t} \rangle$  qui intervient dans  $\Phi_{\text{geom}}(q)$  (voir § 5). Pour mener le calcul sans problème, le moyen le plus sûr est d'exprimer le déplacement du centre de masse en terme de la courbure de Berry, ce que nous ferons dans le paragraphe suivant (§ 4-4).

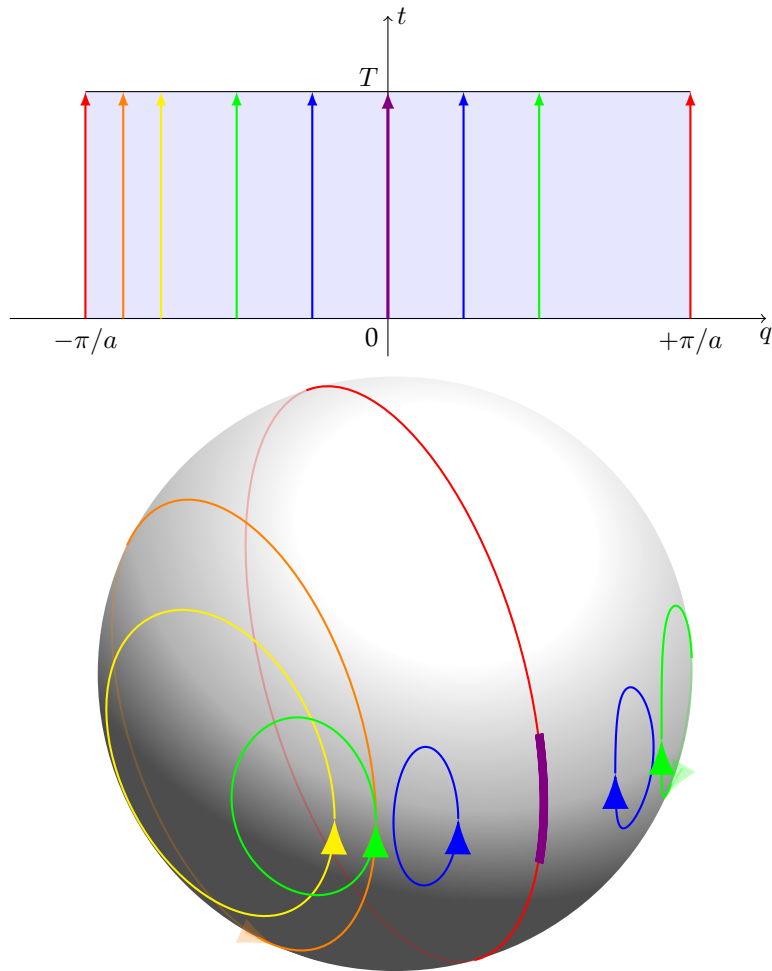
Pour le moment, nous allons voir comment donner un sens à (44-45) en utilisant un raisonnement géométrique. Nous savons depuis le premier chapitre que pour un problème se ramenant à un pseudo-spin 1/2, la phase géométrique  $\Phi_{\text{geom}}(q)$  est, à un facteur 1/2 près, l'angle solide décrit par la trajectoire sur la sphère de Bloch de l'état  $|u_{q,t}\rangle$  quand  $t$  varie de 0 à  $T$ . Examinons donc cette trajectoire pour différentes valeurs de  $q$  (figure 22) en utilisant les expressions de  $\theta_{q,t}$  et  $\phi_{q,t}$

$$\cos \theta_q = \frac{\Delta}{|\mathbf{h}(q)|}, \quad e^{i\phi_q} \sin \theta_q = \frac{J' + J e^{iqa}}{|\mathbf{h}(q)|}. \quad (46)$$

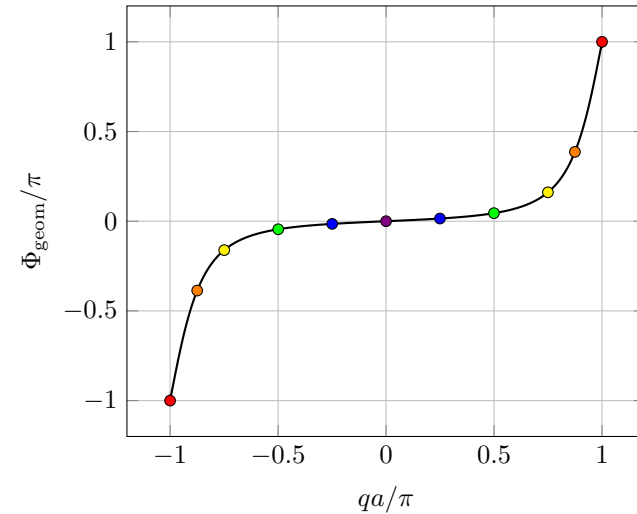
avec  $|\mathbf{h}(q)| = [\Delta^2 + J^2 + J'^2 + 2JJ' \cos(qa)]^{1/2}$  et les deux angles  $\theta_q \in [0, \pi]$  et  $\phi_q \in ]-\pi, +\pi]$ .

— Pour  $q = 0$ , la quantité  $e^{i\phi_q} \sin \theta_q = (J + J')/\epsilon_q$  reste toujours réelle positive quand  $J'$  et  $\Delta$  varient sur le cercle de la figure 2. La trajectoire sur la sphère de Bloch est donc un simple aller et retour sur le méridien de longitude 0 : l'angle solide correspondant à cette trajectoire, représentée en violet sur la figure 22 est nul.





**FIGURE 22.** Trajectoires suivies pour un  $q$  fixé dans un cycle de la pompe. La phase géométrique  $\Phi_{\text{geom}}(t)$  est donnée, à un facteur  $1/2$  près, par l'angle solide sous-tendu par la trajectoire correspondante. On a pris une trajectoire circulaire centrée en  $(1,0)$  et de rayon  $0.5$  dans le plan  $(J'/J, \Delta)$  parcourue à vitesse uniforme.



**FIGURE 23.** Phase géométrique déduite de l'angle solide sous-tendu par la trajectoire de l'état  $|u_{q,t}\rangle$  sur la sphère de Bloch au cours d'un cycle de la pompe. Cette phase géométrique varie continuellement de  $-\pi$  à  $+\pi$  quand  $q$  décrit la zone de Brillouin, ce qui entraîne la quantification du déplacement  $\Delta x$  donné en (44). Le code de couleurs des différents points est le même que celui de la figure 22.

- Pour  $qa/\pi = \pm 1/4, 1/2, 3/4, 7/8$ , les trajectoires représentées par les couleurs bleue, verte, jaune et orange, s'écartent de plus en plus du méridien central. Elles génèrent des angles solides de plus en plus grands et de signe opposé pour  $\pm q$ , qui tendent vers le demi-espace (angle solide de  $2\pi$ ) quand  $q$  s'approche de  $\pm\pi/a$ .
- Pour  $q = \pm\pi/a$ , les deux trajectoires suivies sont identiques : ce sont des grands cercles rouges passant par les pôles ; l'angle solide vaut donc  $\pm 2\pi$  et la phase géométrique associée est  $\pm\pi$ .

Cette analyse géométrique nous apprend deux choses. D'une part, tous les points de la sphère de Bloch sont atteints au moins une fois quand  $q$  et  $t$  varient respectivement dans les intervalles  $[-\pi/a, +\pi/a]$  et  $[0, T]$  : la sphère de Bloch est complètement enveloppée par ces trajectoires. Ensuite, par continuité, on voit qu'il faut assigner la valeur  $\Phi_{\text{geom}} = -\pi$  à la trajectoire pour  $q = -\pi/a$  et la valeur  $\Phi_{\text{geom}} = +\pi$  à la trajectoire  $q = \pi/a$ . Le résultat

(45) doit donc être compris comme

$$\Delta x = -\frac{a}{2\pi} \left[ \lim_{q \rightarrow +\pi/a} \Phi_{\text{geom}}(q) - \lim_{q \rightarrow -\pi/a} \Phi_{\text{geom}}(q) \right] \quad (47)$$

où la première limite est prise par valeurs négatives et la seconde par valeurs positives. Cela conduit finalement à :

$$\Delta x = -\frac{a}{2\pi} [(+\pi) - (-\pi)] = -a. \quad (48)$$

Le déplacement du centre de masse dans un cycle de pompe est donc effectivement quantifié en unité de période du réseau.

On voit donc que pour ce problème à deux dimensions (une de temps et une d'espace), la sphère de Bloch est entièrement recouverte par les états  $|u_{q,t}\rangle$ . Ceci constitue l'invariant topologique du problème, qui ne peut pas être modifié par un changement "doux" de la trajectoire suivie dans le plan  $(J', \Delta)$ . Cet invariant est l'équivalent pour ce problème 2D de l'enroulement d'une phase dans un problème 1D.

#### 4-4 Déplacement quantifié et courbure de Berry

Continuons à faire abstraction des singularités possibles dans la définition de l'état  $|u_{q,t}\rangle$  pour établir une autre expression pour le déplacement  $\Delta x$  du centre de masse de l'assemblée de particules. Pour ce problème avec une coordonnée d'espace et une coordonnée de temps, nous pouvons définir les deux composantes de la connexion de Berry [ $\mathcal{A}_2$  a déjà été introduit en (34)] :

$$\mathcal{A}_1(q, t) = i\langle u_{q,t} | \partial_q u_{q,t} \rangle, \quad \mathcal{A}_2(q, t) = i\langle u_{q,t} | \partial_t u_{q,t} \rangle, \quad (49)$$

qui forment un vecteur réel à deux composantes. Nous définissons également la courbure de Berry :

$$\Omega(q, t) = \begin{pmatrix} \partial_q \\ \partial_t \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} \mathcal{A}_1 \\ \mathcal{A}_2 \end{pmatrix} = i(\langle \partial_q u_{q,t} | \partial_t u_{q,t} \rangle - \langle \partial_t u_{q,t} | \partial_q u_{q,t} \rangle) \quad (50)$$

qui est une quantité scalaire réelle.

L'expression (44) pour le déplacement  $\Delta x$  fait intervenir la dérivée par rapport à  $q$  de la phase géométrique

$$\Phi_{\text{geom}}(q) = \int_0^T \mathcal{A}_2(q, t) dt. \quad (51)$$

Une intégration par parties donne

$$\begin{aligned} \frac{d\Phi_{\text{geom}}}{dq} &= i \frac{d}{dq} \left[ \int_0^T \langle u_{q,t} | \partial_t u_{q,t} \rangle dt \right] \\ &= i \int \langle \partial_q u_{q,t} | \partial_t u_{q,t} \rangle dt + i \int \langle u_{q,t} | \partial_q \partial_t u_{q,t} \rangle dt \\ &= i \int \langle \partial_q u_{q,t} | \partial_t u_{q,t} \rangle dt + i [\langle u_{q,t} | \partial_q u_{q,t} \rangle]_0^T - i \int \langle \partial_t u_{q,t} | \partial_q u_{q,t} \rangle dt \\ &= \int_0^T \Omega(q, t) dt, \end{aligned} \quad (52)$$

le terme tout intégré étant nul du fait de la périodicité en temps.

Quand on reporte ce résultat dans l'expression du déplacement de centre de masse, on trouve

$$\Delta x = -\frac{a}{2\pi} \int_{-\pi/a}^{+\pi/a} \int_0^T \Omega(q, t) dq dt. \quad (53)$$

Cette expression est "robuste" au sens où la courbure de Berry est invariante de jauge. Elle ne présente pas de singularité, contrairement aux expressions faisant intervenir la connexion de Berry. Nous y reviendrons dans le paragraphe 5. Nous verrons en particulier que du fait de la périodicité en  $q$  et en  $t$  du problème, l'intégrale

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\pi/a}^{+\pi/a} \int_0^T \Omega(q, t) dq dt \quad (54)$$

est nécessairement un entier, le nombre de Chern, qui en l'occurrence est égal à 1.

## 5 Pompe adiabatique et nombre de Chern

Dans la dernière partie de ce chapitre, nous allons présenter un traitement général de la pompe adiabatique. Nous allons commencer par préciser la nature des singularités déjà mentionnées, susceptibles d'apparaître lors du calcul de la connexion de Berry. Nous passerons ensuite à une présentation de la pompe adiabatique pour un réseau 1D quelconque, vue comme un problème bi-dimensionnel, une dimension d'espace et une dimension de temps. De ce fait, les notions que nous allons dégager ici reviendront dans la suite du cours, lorsque nous aborderons les problèmes bi-dimensionnels d'espace. Nous verrons en particulier que la quantification de la pompe n'est autre que la manifestation de l'existence d'un nombre de Chern. Signalons par ailleurs qu'une autre approche de la pompe adiabatique fait appel au formalisme de Floquet. Nous renvoyons le lecteur intéressé par cette approche à l'article de revue de COOPER, DALIBARD et al. (2018) et aux références qu'il contient.

### 5-1 Singularité(s) de la connexion de Berry

Dans tout ce cours, nous avons utilisé abondamment la représentation d'un état  $|u_{q,t}^{(-)}\rangle$  en terme d'un point sur la sphère de Bloch. Cette représentation, biunivoque, est extrêmement commode pour mener des raisonnements géométriques simples en terme de contour s'enroulant sur la sphère. Elle présente toutefois une ambiguïté pour deux points particuliers, les pôles nord et sud de la sphère de Bloch, obtenus respectivement pour les latitudes  $\theta_q = 0$  et  $\theta_q = \pi$ . L'angle azimuthal  $\phi_q$  (longitude) est en effet indéterminé en ces points, ce qui peut conduire aux singularités que nous allons maintenant commenter.

Dans ce qui précède, nous avons choisi d'exprimer l'état  $|u_{q,t}\rangle$  dans la base propre de l'opérateur  $\hat{\sigma}_z$  avec une composante réelle positive sur l'état de base  $|+\rangle_z$ , ce qui nous a conduit à écrire

$$|u_{q,t}\rangle = \begin{pmatrix} \cos(\theta/2) \\ e^{i\phi} \sin(\theta/2) \end{pmatrix} \quad (55)$$

où les angles  $\theta \equiv \theta_{q,t}$  et  $\phi \equiv \phi_{q,t}$  sont définis par

$$\cos \theta = \frac{\Delta_t}{\epsilon_{q,t}}, \quad e^{i\phi} \sin \theta = \frac{J'_t + J e^{iqa}}{\epsilon_{q,t}}, \quad (56)$$

avec

$$\epsilon_{q,t} = \left[ \Delta_t^2 + J^2 + J_t'^2 + 2JJ'_t \cos(qa) \right]^{1/2} \quad (57)$$

et  $\theta \in [0, \pi]$ , soit  $\sin \theta \geq 0$ . Dans la mesure où la trajectoire suivie par  $(J'_t, \Delta_t)$  évite le point central  $(J, 0)$ , la définition (56) ne comporte aucune ambiguïté sauf en un point particulier, le couple  $(J', \Delta)$  qui atteint le pôle sud  $\theta = \pi$ . En effet, l'état  $|u_{q,t}\rangle$  en ce point devient

$$|u_{q,t}\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ e^{i\phi} \end{pmatrix} \quad (58)$$

mais la phase  $\phi$  ne peut pas être déterminée à partir de (56) puisque  $\sin \theta = 0$  en ce point.

Cette ambiguïté se transcrit directement sur la connexion de Berry que nous avons définie en (49) pour notre problème à deux dimensions (une d'espace  $q$  et une de temps  $t$ )

$$\mathcal{A}(q, t) = i \langle u_{q,t} | \nabla u_{q,t} \rangle, \quad \nabla = \begin{pmatrix} \partial_q \\ \partial_t \end{pmatrix}. \quad (59)$$

Un calcul immédiat donne

$$\mathcal{A}(q, t) = -\nabla \phi \sin^2(\theta/2) \quad (60)$$

qui est donc singulier au pôle sud, en  $\theta = \pi$ . Notons qu'au pôle nord,  $\phi$  est également indéterminé mais le fait que  $\sin^2(\theta/2) = 0$  efface la singularité sur  $\mathcal{A}$ . Cette différence de traitement entre pôle nord et pôle sud vient du fait que nous avons imposé à la composante de  $|u_{q,t}\rangle$  sur  $|+\rangle_z$  d'être réelle positive, alors que la composante sur  $|-\rangle_z$  est complexe.

Examinons cette singularité de manière générale. Notons  $(q_0, t_0)$  un point où le pôle sud de la sphère de Bloch est atteint. Paramétronsons le voisinage de ce point par

$$q = q_0 + \delta q, \quad t = t_0 + \delta t, \quad (61)$$

et considérons un développement limité au voisinage de ce point :

$$e^{i\phi} \sin \theta \approx \alpha \delta q + \beta \delta t, \quad (62)$$

où  $\alpha, \beta$  sont des nombres complexes qui dépendent du problème considéré. La contrainte  $\sin \theta \geq 0$  conduit à :

$$e^{i\phi} \approx \frac{\alpha \delta q + \beta \delta t}{|\alpha \delta q + \beta \delta t|}, \quad \sin \theta \approx |\alpha \delta q + \beta \delta t|, \quad (63)$$

et donc

$$\cos \theta \approx -1 + \frac{1}{2} |\alpha \delta q + \beta \delta t|^2. \quad (64)$$

On en déduit la variation de la connexion de Berry au voisinage de ce point singulier :

$$\mathcal{A} \approx -\nabla\phi \approx \gamma \frac{1}{|\alpha \delta q + \beta \delta t|^2} \begin{pmatrix} -\delta t \\ \delta q \end{pmatrix} \quad (65)$$

où l'on a introduit le nombre réel

$$\gamma = \frac{i}{2} (\alpha^* \beta - \alpha \beta^*). \quad (66)$$

Le vecteur  $\mathcal{A}$  a une structure tourbillonnaire autour du point singulier  $(q_0, t_0)$  : il est orthoradial et son module diverge comme l'inverse de la distance à l'origine.

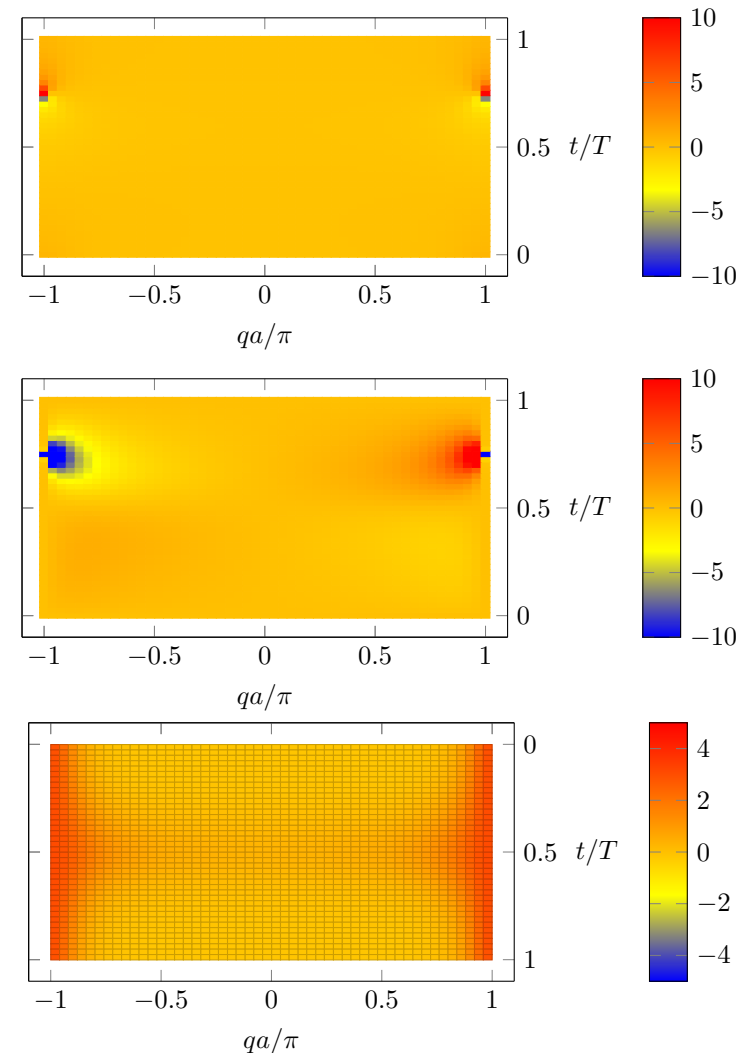
Cette divergence apparaît effectivement pour la pompe adiabatique du modèle de Rice–Mele, comme on peut le voir sur la figure 24. Cette figure a été tracée en supposant que la trajectoire circulaire dans le plan  $(J', \Delta)$  de la figure 2 est parcourue à vitesse uniforme. Le pôle sud de la sphère de Bloch est alors atteint pour :

$$\text{Singularité au pôle sud pour : } qa = \pm\pi, \quad t = 3T/4. \quad (67)$$

puisqu'on a en ces points

$$J' = J, \quad \Delta < 0 \quad \Rightarrow \quad \cos \theta_q = \frac{\Delta}{\epsilon_q} = -1, \quad e^{i\phi_q} \sin \theta_q = \frac{J' + J e^{iqa}}{\epsilon_q} = 0. \quad (68)$$

La phase géométrique  $\Phi_{\text{geom}}(q)$  et la phase de Zak  $\Phi_{\text{Zak}}(t)$  (appendice 2) sont donc bien définies pourvu qu'on les calcule respectivement en dehors de  $q = \pm\pi/a$  et  $t = 3T/4$ .



**FIGURE 24.** Haut et milieu : composantes 1 et 2 de la connexion de Berry  $\mathcal{A}(q, t)$  pour le choix de jauge du texte. Un point singulier apparaît à l'instant  $t = 3T/4$  pour  $qa = \pm\pi$  car l'état  $|u_{q,t}\rangle$  se trouve alors au pôle sud de la sphère de Bloch. Bas : courbure de Berry  $\Omega(q, t)$  qui est parfaitement régulière sur tout le plan  $(q, t)$ . Son intégrale sur le rectangle  $[-\pi/a, \pi/a] \times [0, T]$  est égale à  $2\pi$ , soit un nombre de Chern de 1.

La divergence de la connexion de Berry que nous venons de trouver dépend du choix de jauge. On aurait pu décider d'imposer une composante réelle positive sur  $|-\rangle_z$  au lieu de  $|+\rangle_z$  en paramétrant l'état  $|u_{q,t}\rangle$  sous la forme

$$|\tilde{u}_{q,t}\rangle = \begin{pmatrix} e^{-i\phi} \cos(\theta/2) \\ \sin(\theta/2) \end{pmatrix} \quad (69)$$

et la nouvelle connexion de Berry  $\tilde{\mathcal{A}}$  aurait été singulière autour du pôle nord de la sphère de Bloch, c'est-à-dire pour un autre couple  $(\tilde{q}_0, \tilde{t}_0)$ .

Nous avons déjà eu l'occasion de mentionner qu'au contraire de la connexion de Berry, la courbure de Berry définie en (50)

$$\Omega = \nabla \times \mathcal{A} \quad (70)$$

était invariante de jauge. La divergence que nous venons de trouver pour  $\mathcal{A}$  ne doit donc pas se produire pour  $\Omega$ . Montrons-le explicitement à partir du développement limité précédent. Nous avons établi au chapitre 1 l'expression générale de  $\Omega$

$$\Omega = -\frac{1}{2} \nabla \phi \times \nabla(\cos \theta) \quad (71)$$

ce qui conduit au point  $(q_0, t_0)$  à

$$\Omega \approx -\frac{\gamma}{2} \mathbf{u}_z, \quad (72)$$

ce qui est effectivement régulier. Le calcul pour la pompe adiabatique du modèle de Rice–Mele confirme cette régularité (figure 24, bas).

## 5-2 Le courant dans une pompe adiabatique

Dans le traitement que nous avons présenté au paragraphe §3, nous avons utilisé des arguments géométriques simples tirant parti de l'hamiltonien de Rice–Mele, pour déterminer le déplacement du centre de masse du gaz de particules dans un cycle de pompage. Nous allons maintenant mettre en place un formalisme plus général qui nous permettra de montrer l'importance de la courbure de Berry pour ce type d'étude.

Nous partons comme précédemment d'une assemblée de particules sans interaction, et nous supposons que l'opérateur densité à une particule

est diagonal dans la base des moments  $q$ . Nous pouvons donc calculer le flux de matière pour une particule dans un état de Bloch  $|\psi_q\rangle$ , puis moyenner ensuite le résultat sur  $q$ .

Partons d'une particule préparée dans l'état de moment  $q$  dans la bande fondamentale  $n = 0$  et considérons un cycle de la pompe, pendant lequel certains paramètres caractérisant le réseau ( $J'$  et  $\Delta$  pour le modèle de Rice–Mele) varient très lentement. L'état de la particule à un instant donné peut s'écrire au premier ordre de l'approximation adiabatique (cf. chapitre 1) :

$$|\Psi(t)\rangle \approx |\psi^{(0)}\rangle + i\hbar \sum_{n \neq 0} |\psi^{(n)}\rangle \frac{\langle \psi^{(n)} | \partial_t \psi^{(0)} \rangle}{E^{(n)} - E^{(0)}} + \dots \quad (73)$$

Notons que pour alléger les notations, nous n'avons pas explicitement indiqué la dépendance en  $q$  et en  $t$  des fonctions de Bloch et des énergies :

$$|\psi^{(n)}\rangle \equiv |\psi_{q,t}^{(n)}\rangle, \quad E^{(n)} \equiv E_{q,t}^{(n)}. \quad (74)$$

Nous souhaitons calculer, à l'ordre le plus bas non nul, la vitesse moyenne dans cet état. L'opérateur vitesse est donné par

$$\hat{v} = \frac{\hat{p}}{m} \quad \text{avec} \quad \hat{p} = -i\hbar \frac{d}{dx} \quad (75)$$

et nous allons donc avoir besoin d'évaluer des éléments de matrice du type

$$\langle \psi^{(0)} | \hat{p} | \psi^{(n)} \rangle. \quad (76)$$

Il est en général plus commode de travailler avec les parties périodiques  $|u^{(n)}\rangle$  qu'avec les fonctions de Bloch  $|\psi^{(n)}\rangle$  elles-mêmes. Le passage d'un type de fonction à l'autre se fait en utilisant

$$\hat{p} \left( e^{iqx} u_{q,t}^{(n)}(x) \right) = e^{iqx} (\hat{p} + \hbar q) u_{q,t}^{(n)}(x) \quad (77)$$

de sorte que l'élément de matrice (76) se réécrit

$$\langle \psi^{(0)} | \hat{p} | \psi^{(n)} \rangle = \langle u^{(0)} | (\hat{p} + \hbar q) | u^{(n)} \rangle. \quad (78)$$

L'impulsion moyenne dans l'état  $|\Psi(t)\rangle$  vaut donc, toujours à l'ordre 1 de l'approximation adiabatique

$$\begin{aligned} \langle \Psi(t) | \hat{p} | \Psi(t) \rangle &= \langle u^{(0)} | (\hat{p} + \hbar q) | u^{(0)} \rangle \\ &+ i\hbar \sum_{n \neq 0} \langle u^{(0)} | (\hat{p} + \hbar q) | u^{(n)} \rangle \frac{\langle u^{(n)} | \partial_t u^{(0)} \rangle}{E^{(n)} - E^{(0)}} + \text{c.c.} \end{aligned} \quad (79)$$

Pour aller plus loin, nous allons avoir recours aux lemmes suivants, prouvés dans l'appendice 3 :

$$\langle u^{(0)} | (\hat{p} + \hbar q) | u^{(n)} \rangle = \frac{m}{\hbar} (E^{(0)} - E^{(n)}) \langle \partial_q u^{(0)} | u^{(n)} \rangle. \quad (80)$$

et

$$\langle u^{(0)} | (\hat{p} + \hbar q) | u^{(0)} \rangle = \frac{m}{\hbar} \partial_q E^{(0)}. \quad (81)$$

En utilisant de plus une relation de fermeture dans la deuxième ligne de (79), nous arrivons à :

$$v_{q,t} \equiv \langle \Psi(t) | \frac{\hat{p}}{m} | \Psi(t) \rangle = \frac{1}{\hbar} \partial_q E^{(0)} - \left( i \langle \partial_q u^{(0)} | \partial_t u^{(0)} \rangle + \text{c.c.} \right). \quad (82)$$

Nous voyons donc apparaître deux composantes pour cette vitesse moyenne :

- La première  $\frac{1}{\hbar} \partial_q E^{(0)}$  est la vitesse de groupe. Quand on prend sa moyenne sur tous les états  $q$  en les supposant également peuplés, on trouve un résultat nul du fait de la périodicité en  $q$  (à chaque instant  $t$ ) de la bande d'énergie  $E_{q,t}^{(0)}$ .
- La seconde contribution est (au signe près) la courbure de Berry que nous avons introduite en (50) :

$$\Omega_{q,t} = i \left( \langle \partial_q u^{(0)} | \partial_t u^{(0)} \rangle - \langle \partial_t u^{(0)} | \partial_q u^{(0)} \rangle \right). \quad (83)$$

Pour une population uniforme de tous les moments  $q$ , la vitesse moyenne sur ces moments vaut donc à l'instant  $t$  :

$$\bar{v}_t = -\frac{a}{2\pi} \int_{\text{ZB}} \Omega_{q,t} dq \quad (84)$$

où  $a$  est la période spatiale du potentiel et  $2\pi/a$  représente donc la largeur de la zone de Brillouin.

Le déplacement moyen sur un cycle de durée  $T$  s'obtient quant à lui en intégrant cette vitesse :

$$\Delta x = -\frac{a}{2\pi} \int_0^T \int_{\text{ZB}} \Omega_{q,t} dq dt, \quad (85)$$

et l'on retrouve le résultat que nous avons obtenu "pédestrement" pour le modèle de Rice-Mele à l'équation (53). L'intérêt de la présente dérivation est de ne pas être passée par la connexion de Berry, dont nous avons vu qu'elle pouvait contenir des singularités, et de reposer entièrement sur la notion de courbure de Berry, qui est parfaitement régulière.

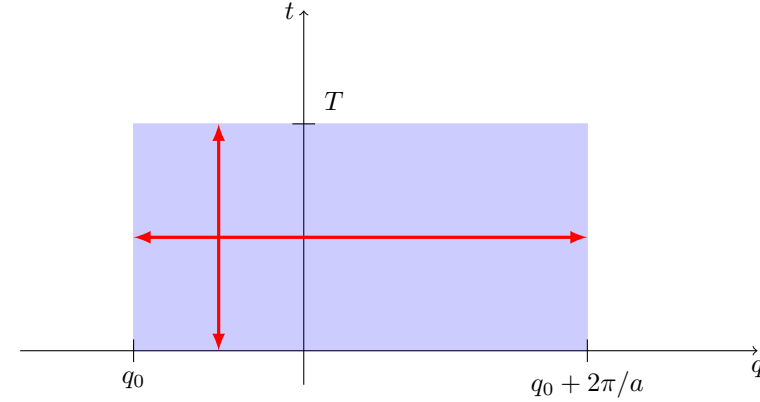


FIGURE 25. Diagramme bi-dimensionnel dans l'espace  $(q, t)$  : moment en abscisse et temps en ordonnées. La surface grisée représente la zone d'intégration de (86), la courbure de Berry  $\Omega_{q,t}$  est périodique en  $q$  de période  $2\pi/a$  et périodique en  $t$  de période  $T$ .

### 5-3 Nombre de Chern et quantification du pompage

Nous allons maintenant établir la quantification du déplacement  $\Delta x$ , qui n'est qu'un cas particulier du fait que la quantité

$$\mathcal{C} = \frac{1}{2\pi} \int_0^T \int_{q_0}^{q_0+2\pi/a} \Omega_{q,t} dq dt \quad (86)$$

est toujours un entier si  $\Omega$  est une courbure de Berry et si l'intégrale est prise sur un domaine rectangulaire avec des conditions aux bords périodiques (figure 25) :

- La périodicité de la zone de Brillouin assure que l'hamiltonien et ses états propres sont les mêmes pour le moment  $q_0$  et le moment  $q_0 + 2\pi/a$ ;
- La périodicité temporelle de la pompe assure que l'hamiltonien et ses états propres sont les mêmes à l'instant  $t = 0$  et à l'instant  $t = T$ .

Pour montrer ce résultat, rappelons que la courbure de Berry  $\Omega_{q,t}$  est définie à partir de la connexion de Berry  $\mathcal{A}_{q,t}$  par

$$\nabla \times \mathcal{A}_{q,t} = \Omega_{q,t} \mathbf{u}_z. \quad (87)$$

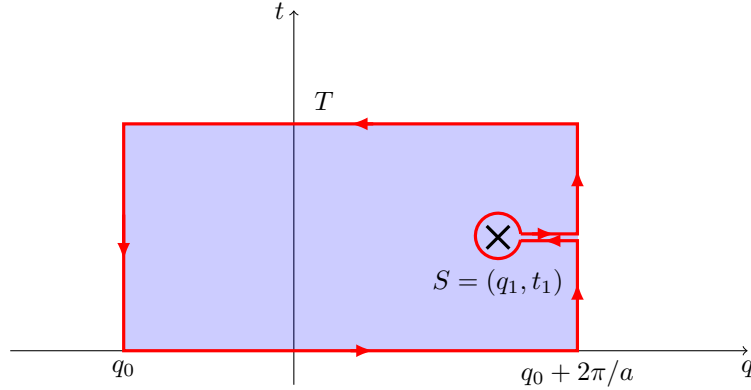


FIGURE 26. Contour d'intégration suivi en (88) pour éviter la singularité en  $S = (q_1, t_1)$ . La contribution des parties rectilignes s'annule du fait de la périodicité de  $\mathcal{A}_{q,t}$ . La contribution du petit cercle donne  $\pm 2\pi$ .

Il est tentant d'appliquer la formule de Stokes, qui relie l'intégrale surfacique de  $\Omega$  à l'intégrale de  $\mathcal{A}$  sur le pourtour du rectangle de la figure 26. Toutefois, des précautions doivent être prises, toujours en raison des singularités possibles de  $\mathcal{A}_{q,t}$  en un ou plusieurs points  $q_j, t_j$  du rectangle considéré.

Supposons qu'il y ait un seul de ces points, noté  $S = (q_1, t_1)$ , la généralisation à plusieurs points étant immédiate. Considérons le contour qui longe le pourtour du rectangle et fait une incursion à l'intérieur de ce rectangle pour éviter le point singulier  $S$ . La zone exclue autour de  $S$  ne change pas l'intégrale surfacique de  $\Omega$ , puisque cette fonction est régulière. On a donc

$$\iint \Omega_{q,t} dq dt = \left( \oint_{\text{rectangle}} + \oint_{\text{cercle}} \right) \mathcal{A}_{q,t} \cdot dl, \quad (88)$$

où le cercle exclu a une taille infinitésimale.

Du fait de la périodicité du problème, à la fois en  $q$  et en  $t$ , les contributions des côtés du rectangle se compensent deux à deux. Il ne reste donc dans le membre de droite que la contribution du petit cercle, centré sur le point singulier  $S$ . Or, nous avons vu qu'autour d'un tel point, la connexion

de Berry a une structure tourbillonnaire, avec

$$\mathcal{A}_{q,t} \approx -\nabla \phi \quad (89)$$

de sorte que l'intégrale curviligne de  $\mathcal{A}$  sur le petit cercle est égale à  $\pm 2\pi$ , avec un signe qui dépend du sens du tourbillon (le signe du coefficient  $\gamma$  introduit en (66)). On en déduit donc dans le cas d'un seul point singulier

$$\iint \Omega_{q,t} dq dt = \pm 2\pi, \quad (90)$$

ce qui est le résultat recherché. Dans le cas où il y a plusieurs points singuliers, leurs contributions s'ajoutent indépendamment et de manière algébrique de sorte que l'on trouve :

$$\iint \Omega_{q,t} dq dt = 2\pi(N_+ - N_-). \quad (91)$$

Dans tous les cas, on trouve une quantification du déplacement en unité de la période spatiale  $a$  lors d'un cycle de pompe.

### Appendice 1. Cellule doublée et bandes repliées

Il peut arriver que l'on recherche les bandes d'un hamiltonien périodique avec une définition non optimale de la cellule unité. Par exemple, au lieu de reconnaître sur la figure 3 que la cellule unité a une taille  $\lambda/2$ , on aurait pu poser que la période du potentiel est  $\lambda$  (haut de la figure 27). Cette hypothèse n'est pas fautive, elle ne tire simplement pas le meilleur parti de la forme du potentiel. Avec ce choix d'une période doublée, la zone de Brillouin est quant à elle divisée par 2 :

$$\begin{aligned} \text{Cellule unité de période } \lambda/2 &\rightarrow \text{zone de Brillouin : } q \in [-k, k[ \\ \text{Cellule unité de période } \lambda &\rightarrow \text{zone de Brillouin : } q \in [-k/2, k/2[ \end{aligned}$$

et on arrive au spectre d'énergie représenté sur la figure 27 à droite. Pour comparaison, on a reporté sur la gauche de cette figure le spectre déjà montré en figure 4, en grisant les parties extérieures de la zone de Brillouin. On constate qu'il y a un simple repliement de ces parties vers l'intérieur, le spectre global n'étant pas modifié. Simplement, pour chaque valeur  $q$  de la nouvelle zone de Brillouin, le nombre d'états propres  $\psi_q$  est doublé puisqu'on a à la fois l'ancien  $\psi_q$  et l'ancien  $\psi_{q\pm k}$ .

### Appendice 2. Pompe adiabatique et phase de Zak

Dans la partie 3, nous avons établi le lien entre déplacement  $\Delta x$  du centre de masse dans un cycle de pompage, phase géométrique  $\Phi_{\text{geom}}(q)$  et courbure de Berry  $\Omega(q, t)$ . Il est également possible de relier  $\Delta x$  à la phase de Zak  $\Phi_{\text{Zak}}(t)$  calculée à chaque instant  $t$  du cycle de pompage :

$$\Phi_{\text{Zak}}(t) = \int_{-\pi/a}^{+\pi/a} \mathcal{A}_1(q, t) dq. \quad (92)$$

Notre point de départ sera la relation :

$$\frac{d\Phi_{\text{Zak}}}{dt} = i \frac{d}{dt} \left[ \int_{-\pi/a}^{+\pi/a} \langle u_{q,t} | \partial_q u_{q,t} \rangle dt \right] = - \int_{-\pi/a}^{+\pi/a} \Omega(q, t) dq. \quad (93)$$

Cette expression est valable pourvu que l'on évite la singularité "pôle sud", donc pour  $t \neq 3T/4$ .

À partir de cette expression, on peut écrire le déplacement  $\Delta x$  comme :

$$\Delta x = \frac{a}{2\pi} \int_0^T \frac{d\Phi_{\text{Zak}}}{dt} dt = \frac{a}{2\pi} [\Phi_{\text{Zak}}(T) - \Phi_{\text{Zak}}(0)]. \quad (94)$$

Comme nous l'avons fait pour la phase géométrique, il faut pour donner un sens à cette équation suivre continûment l'évolution de la phase de Zak quand le temps  $t$  passe de la valeur 0 à la valeur  $T$ . Cela se fait à partir de l'évolution des contours correspondants sur la sphère de Bloch et nous le montrons sur la figure 28, le résultat redonnant bien évidemment la valeur trouvée précédemment  $\Delta x = -a$ .

### Appendice 3. Preuve des lemmes (80-81)

Nous allons prouver ici ces lemmes en dimension quelconque, puisque nous en aurons également besoin pour les problèmes bi-dimensionnels. Nous allons donc montrer que

$$\langle u^{(0)} | (\hat{\mathbf{p}} + \hbar \mathbf{q}) | u^{(n)} \rangle = \frac{m}{\hbar} (E^{(0)} - E^{(n)}) \langle \nabla_{\mathbf{q}} u^{(0)} | u^{(n)} \rangle. \quad (95)$$

et

$$\langle u^{(0)} | (\hat{\mathbf{p}} + \hbar \mathbf{q}) | u^{(0)} \rangle = \frac{m}{\hbar} \nabla_{\mathbf{q}} E^{(0)}. \quad (96)$$

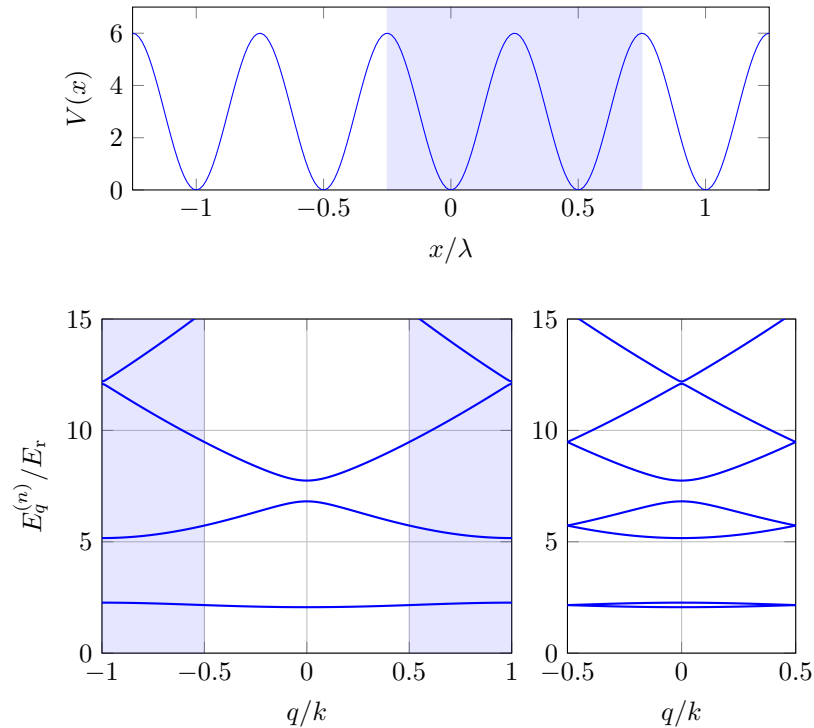
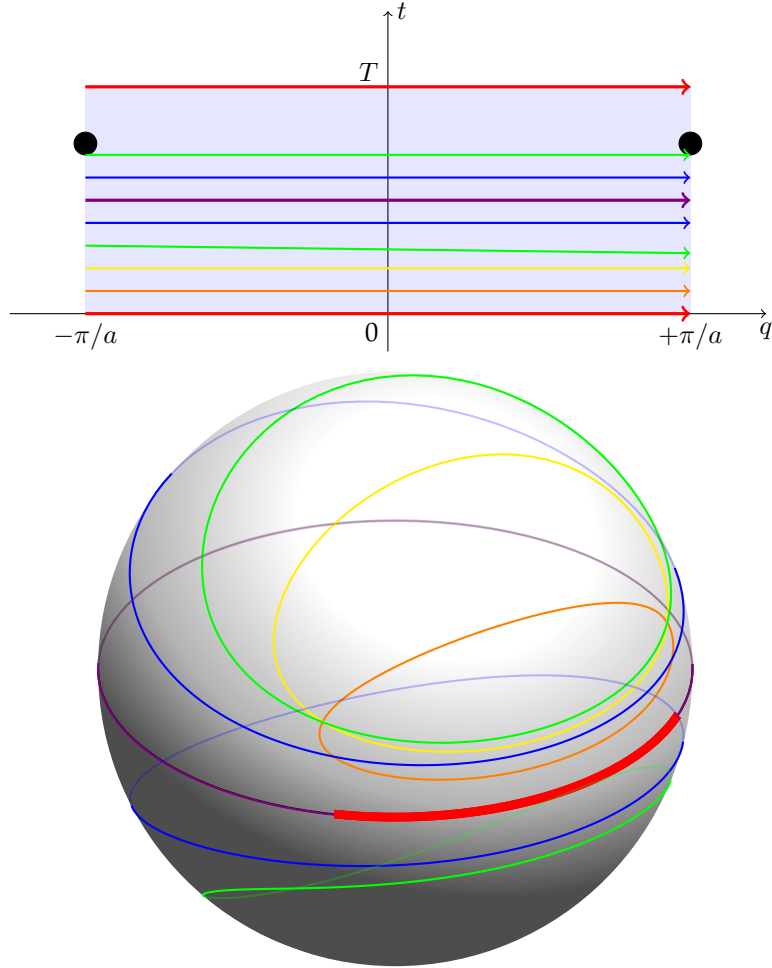


FIGURE 27. Haut : Cellule unité "non optimale", de taille  $\lambda$ , pour le potentiel sinusoïdal de période  $\lambda/2$ . Bas : repliement du spectre de bande quand on choisit la taille de la cellule unité égale à  $\lambda$  (à droite) au lieu de  $\lambda/2$  (à gauche).





**FIGURE 28.** Trajectoires suivies à un instant donné quand on parcourt la zone de Brillouin. La phase de Zak  $\Phi_{\text{Zak}}(t)$  est donnée, à un facteur  $1/2$  près, par l'angle solide sous-tendu par la trajectoire correspondante. On a pris une trajectoire circulaire centrée en  $(1,0)$  et de rayon  $0.5$  dans le plan  $(J'/J, \Delta)$ . Les deux petits disques noirs indiquent le point où le pôle sud est atteint, ce qui correspond à une singularité de la définition de l'angle azimutal  $\phi_{q,t}$  pour l'état  $|u_{q,t}\rangle$ .

On pourra également consulter l'article de revue très complet de XIAO, CHANG et al. (2010).

Pour le prouver, rappelons que les fonctions périodiques  $u^{(n)}$  sont solutions de l'équation aux valeurs propres (cf. chapitre 1) :

$$\hat{H}_q |u_q^{(n)}\rangle = E_q^{(n)} |u_q^{(n)}\rangle \quad \text{avec} \quad \hat{H}_q = \frac{(\hat{p} + \hbar q)^2}{2m} + V(\mathbf{r}) \quad (97)$$

soit, en prenant le produit scalaire avec  $\langle u_q^{(0)} |$  :

$$\langle u_q^{(0)} | \hat{H}_q |u_q^{(n)}\rangle = E_q^{(n)} \delta_{n,0}. \quad (98)$$

Cette équation est vérifiée pour tout  $q$ . Prenons donc le gradient par rapport à  $q$  des deux membres :

$$\langle \nabla_q u_q^{(0)} | \hat{H}_q |u_q^{(n)}\rangle + \langle u_q^{(0)} | \nabla_q \hat{H}_q |u_q^{(n)}\rangle + \langle u_q^{(0)} | \hat{H}_q | \nabla_q u_q^{(n)}\rangle = (\nabla_q E_q^{(n)}) \delta_{n,0}. \quad (99)$$

On a

$$\nabla_q \hat{H}_q = \frac{\hbar}{m} (\hat{p} + \hbar q) \quad (100)$$

qui est précisément l'opérateur intervenant dans l'élément de matrice (78).

Pour  $n \neq 0$ , on déduit de (99) :

$$E_q^{(n)} \langle \nabla_q u_q^{(0)} | u_q^{(n)}\rangle + \frac{\hbar}{m} \langle u_q^{(0)} | (\hat{p} + \hbar q) | u_q^{(n)}\rangle + E_q^{(0)} \langle u_q^{(0)} | \nabla_q u_q^{(n)}\rangle = 0 \quad (101)$$

que l'on associe à

$$\langle u_q^{(0)} | u_q^{(n)}\rangle = \delta_{n,0} \quad \Rightarrow \quad \langle \nabla_q u_q^{(0)} | u_q^{(n)}\rangle + \langle u_q^{(0)} | \nabla_q u_q^{(n)}\rangle = 0 \quad (102)$$

pour trouver le résultat (95)

$$\frac{\hbar}{m} \langle u_q^{(0)} | (\hat{p} + \hbar q) | u_q^{(n)}\rangle = (E_q^{(0)} - E_q^{(n)}) \langle \nabla_q u_q^{(0)} | u_q^{(n)}\rangle. \quad (103)$$

Pour  $n = 0$ , on associe (99) et (102) pour trouver

$$\frac{\hbar}{m} \langle u_q^{(0)} | (\hat{p} + \hbar q) | u_q^{(0)}\rangle = \nabla_q E_q^{(0)}, \quad (104)$$

qui constitue le résultat (96).

## Références

- ATALA, Marcos, Monika AIDELSBURGER, Julio T. BARREIRO, Dmitry ABANIN, Takuya KITAGAWA, Eugene DEMLER & Immanuel BLOCH (2013), « Direct measurement of the Zak phase in topological Bloch bands », in *Nat Phys* **9**, p. 795–800.
- COOPER, NR, J DALIBARD & IB SPIELMAN (2018), « Topological Bands for Ultracold Atoms », in *arXiv :1803.00249*.
- HATSUGAI, Y. & T. FUKUI (2016), « Bulk-edge correspondence in topological pumping », in *Phys. Rev. B* **94** (4), p. 041102.
- LOHSE, M., C. SCHWEIZER, O. ZILBERBERG, M. AIDELSBURGER & I. BLOCH (2016), « A Thouless quantum pump with ultracold bosonic atoms in an optical superlattice », in *Nat Phys* **12**, p. 350–354.
- LU, H.-I, M. SCHEMMER, L. M. AYCOCK, D. GENKINA, S. SUGAWA & I. B. SPIELMAN (2016), « Geometrical Pumping with a Bose-Einstein Condensate », in *Phys. Rev. Lett.* **116**, p. 200402.
- NAKAJIMA, Shuta, Takafumi TOMITA, Shintaro TAIE, Tomohiro ICHINOSE, Hideki OZAWA, Lei WANG, Matthias TROYER & Yoshiro TAKAHASHI (2016), « Topological Thouless pumping of ultracold fermions », in *Nature Physics* **12**, p. 296.
- OZAWA, Tomoki, Hannah M PRICE, Alberto AMO, Nathan GOLDMAN, Mohammad HAFEZI, Ling LU, Mikael RECHTSMAN, David SCHUSTER, Jonathan SIMON, Oded ZILBERBERG et al. (2018), « Topological Photonics », in *arXiv :1802.04173*.
- RICE, MJ & EJ MELE (1982), « Elementary excitations of a linearly conjugated diatomic polymer », in *Physical Review Letters* **49**, p. 1455.
- SU, W. P., J. R. SCHRIEFFER & A. J. HEEGER (1979), « Solitons in Polyacetylene », in *Phys. Rev. Lett.* **42**, p. 1698–1701.
- THOULESS, D. J. (1983), « Quantization of particle transport », in *Phys. Rev. B* **27**, p. 6083–6087.
- WIMMER, Martin, Hannah M PRICE, Iacopo CARUSOTTO & Ulf PESCHEL (2017), « Experimental measurement of the Berry curvature from anomalous transport », in *Nature Physics* **13**, p. 545.
- XIAO, Di, Ming-Che CHANG & Qian NIU (2010), « Berry phase effects on electronic properties », in *Rev. Mod. Phys.* **82** (3), p. 1959–2007.