

La matière topologique et son exploration avec les gaz quantiques

Jean Dalibard
Collège de France, chaire *Atomes et rayonnement*

Cours 2017-18

Table des matières

Introduction	4	5	Pompe adiabatique et nombre de Chern	68
I De la phase de Berry à la topologie d'une bande d'énergie	9	IV Topologie et courbure de Berry dans un réseau 2D		77
1 La phase géométrique en physique quantique	9	1 Réseaux bi-partites et points de Dirac		77
2 L'exemple d'un spin 1/2	14	2 Caractérisation "géométrique" de la topologie		86
3 Potentiel périodique en physique quantique	16	3 Caractérisation "physique" de la topologie		89
4 Le modèle SSH (Su-Schrieffer-Heeger)	20	4 La courbure de Berry dans un réseau 2D		95
II Topologie à 1D : du modèle SSH aux modes de Majorana	27	V Bandes topologiques et états de bord		101
1 Etats de bord dans le modèle SSH	27	1 Le modèle de Haldane		102
2 Le modèle SSH en photonique	36	2 Modulation temporelle et topologie		109
3 Le modèle de Kitaev	38	3 Les états de bord		114
4 Les modes de Majorana	43	VI Le modèle de Harper-Hofstadter : l'effet Hall retrouvé		127
III Les pompes adiabatiques	51	1 Le modèle de Harper-Hofstadter		127
1 Réseaux 1D au delà du modèle SSH	51	2 Le modèle de HH avec des atomes		134
2 Réseaux et super-réseaux optiques	53	3 L'effet Hall en photonique		139
3 Pompe adiabatique dans le modèle RM	59	4 Utilisation de la structure interne atomique		143
4 Pompe adiabatique et phase de Berry	63	Références		150

Introduction

Le cours de cette année constitue une introduction à l'étude des phases topologiques de la matière. Il s'agit d'une branche de recherche en développement très rapide dont les précurseurs, David J. Thouless, F. Duncan M. Haldane et J. Michael Kosterlitz, ont été récompensés par le prix Nobel de physique 2016. La contribution de Kosterlitz et Thouless a été de dégager la notion de *transition de phase topologique*. Nous l'avons étudiée en détail dans le cours de l'an dernier et nous n'y reviendrons pas ici. La contribution de Haldane et Thouless a été de montrer que certains états de la matière pouvaient être classés par un ordre différent de l'ordre géométrique habituel. C'est ce thème général qui va nous intéresser ici.

L'ordre géométrique fait référence à des propriétés simples de symétrie spatiale, comme l'invariance par rotation ou la symétrie par rapport à un point. L'ordre topologique, plus délicat à mettre en évidence, établit une équivalence entre différents types de formes ou, pour le physicien, de phases de la matière *a priori* dissemblables. Deux objets sont dits topologiquement équivalents pourvu que l'on puisse transformer l'un en l'autre par une déformation continue, sans passer par un point de singularité. Ainsi, une sphère, une orange et un bol appartiennent à la classe topologique des *objets sans trou*, alors qu'un tore, un beignet ou une tasse de café appartiennent à la classe des *objets à un trou* (figure 1). Un exemple célèbre de la manifestation d'un ordre topologique en physique est la quantification de la résistivité de Hall dans l'effet Hall quantique, représentée en figure 2.

Bien souvent, la nature topologique d'une phase donnée reste cachée si l'on regarde seulement le cœur du matériau et ne se révèle que lorsqu'on place côte à côte deux phases non équivalentes de ce matériau. On voit alors apparaître à l'interface entre ces deux phases des points singuliers appelés *états de bord*. Ces derniers jouent un rôle important à la fois sur le



FIGURE 1. Classification topologique obtenue en comptant le nombre de "poignées" d'un objet. Cette classification est robuste, puisqu'un objet ne change pas de classe quand on le déforme légèrement, et elle ne dépend pas d'éventuelles symétries spatiales géométriques de l'objet.

plan fondamental et pour les applications, en particulier en photonique, comme nous en verrons plusieurs exemples dans les cours qui vont suivre.

Cette émergence de la topologie en physique est relativement récente. George Gamow, dans son ouvrage de vulgarisation célèbre paru en 1961, *The Great Physicists, from Galileo to Einstein*, citait la topologie comme la seule branche des mathématiques (avec la théorie des nombres) qui n'avait pas trouvé d'application en physique¹. La situation a radicalement changé

1. Gamow écrit : "When Einstein wanted to interpret gravity as the curvature of four-dimensional, space-time continuum, he found waiting for him Riemann's theory of curved multidimensional space. When Heisenberg looked for some unusual kind of mathematics to describe the motion of electrons inside of an atom, noncommutative algebra was ready for him. Only the number theory and topology (analysis situs) still remain purely mathematical disciplines without any application to physics. Could it be that they will be called to help in

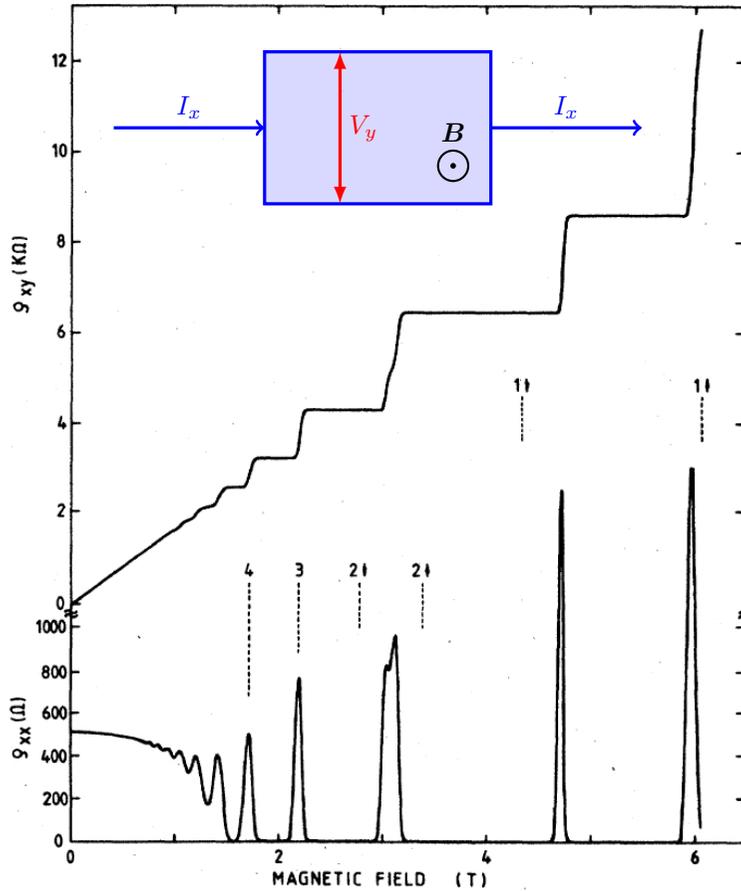


FIGURE 2. Exemple de manifestation d'un ordre topologique dans un gaz 2D d'électrons plongé dans un grand champ magnétique : la résistivité de Hall ρ_{xy} mesurée dans une expérience d'effet Hall quantique présente des plateaux quantifiés quand on varie le champ magnétique ; dans cette mesure, un courant I_x circule dans un échantillon rectangulaire $L_x \times L_y$ et on mesure une tension V_y aux bornes de l'échantillon. Cette quantification est robuste : elle subsiste en présence d'un désordre (modéré) dans l'échantillon. Figure extraite de VON KLITZING (1986).

au tournant des années 1980, notamment avec les travaux précurseurs de THOULESS, KOHMOTO et al. (1982) et HALDANE (1983). Les notions topologiques initialement apparues dans le contexte de l'effet Hall quantique et des chaînes magnétiques se sont développées pour donner naissance aux concepts d'isolants et de supra-conducteurs topologiques (HASAN & KANE 2010; QI & ZHANG 2011; BERNEVIG & HUGHES 2013). Elles irriguent désormais de nombreux domaines de la physique et on pourra consulter le *Commentary/Focus* que la revue *Nature Physics* a publié en juillet 2016 pour en avoir quelques exemples, avec les contributions de ASOREY (2016), BEENAKKER & KOUWENHOVEN (2016), HUBER (2016) et LU, JOANNOPOULOS et al. (2016) et GOLDMAN, BUDICH et al. (2016).

Un point essentiel de la classification par la topologie est la notion de robustesse. Une classe topologique, que ce soit en mathématiques ou en physique, est généralement caractérisée par un nombre entier. Un exemple typique est une ceinture, que l'on peut tordre avant de fermer sa boucle : une ceinture est généralement utilisée sans torsion, mais on peut bien sûr la tordre N fois avant de la boucler. Une fois la ceinture bouclée, il n'est plus possible de la détordre par des déformations douces. Le nombre de torsions N est donc robuste. Cette robustesse est particulièrement importante en physique. Elle nous indique qu'une phase topologique de la matière possèdera certaines propriétés qui resteront inchangées si l'on ajoute (de manière raisonnable) du désordre ou des impuretés. C'est ce qui permet d'utiliser l'effet Hall comme standard métrologique. Nous verrons dans la suite de ce cours comment cette robustesse est mise à profit pour réaliser des "lasers topologiques", dont les propriétés sont presque insensibles à leur environnement (ST-JEAN, GOBLOT et al. 2017; BANDRES, WITTEK et al. 2018).

Comme nous l'avons écrit plus haut, le sujet des phases topologiques de la matière est devenu extrêmement vaste et il n'est pas question de tenter de le couvrir de manière exhaustive². Nous allons restreindre notre domaine d'étude en nous intéressant aux systèmes formés par des gaz d'atomes ou des systèmes photoniques. Nous nous intéresserons tout particulièrement aux systèmes périodiques d'espace ; les atomes évolueront

our further understanding of the riddles of nature?"

2. En 2017, on recense 3115 articles déposés sur la base de données arXiv-physics contenant les mots *topology* ou *topological* dans leur titre ou leur résumé. Quelques exemples sont montrés en figure 3.



FIGURE 3. Trois couvertures récentes (2017 ou 2018) de journaux sur la topologie.

ainsi dans un réseau optique généré par des ondes lumineuses stationnaires, et les photons se propageront dans des réseaux périodiques de guides d'onde. On peut également utiliser les concepts de topologie dans des systèmes non périodiques comme les quasi-cristaux (voir par exemple KRAUS & ZILBERBERG (2016) et DAREAU, LEVY et al. (2017)), mais leur description est beaucoup plus délicate sur le plan mathématique. Une autre restriction porte sur la dimension d'espace que nous serons amenés à considérer : pour simplifier la discussion, nous nous intéresserons à des systèmes uni- ou bi-dimensionnels, même si les concepts de topologie peuvent être étendus à trois dimensions, voire plus (voir par exemple ZHANG & HU (2001)). Signalons enfin que la plupart des situations que nous serons amenés à considérer concernent des assemblées de particules sans interaction, pour lesquelles les propriétés de topologie se manifestent le plus simplement.

Même avec toutes ces restrictions, les thèmes que nous souhaitons couvrir restent vastes et nous ne pourrions pas citer tous les développements théoriques, ni toutes les expériences qui ont été faites dans le domaine de la photonique ou des gaz atomiques au cours des dernières années. Nous renvoyons les lecteurs désireux de disposer d'une bibliographie plus complète vers deux articles de revue récents, OZAWA, PRICE et al. (2018) et COOPER, DALIBARD et al. (2018).

Le plan du cours sera le suivant :

- Le premier chapitre va être consacré à la présentation des notions de base qui reviendront ensuite de manière récurrente, la notion de *phase géométrique* (BERRY 1984) d'une part, et la notion de bande d'énergie pour une particule évoluant dans un potentiel spatialement périodique.
- Nous étudierons dans le deuxième chapitre un modèle 1D simple proposé initialement par SU, SCHRIEFFER et al. (1979) (modèle SSH). Cette étude nous permettra de montrer l'importance des états de bord et de dire également quelques mots des supra-conducteurs topologiques avec les modes de Majorana dans le modèle 1D proposé par KITAEV (2001).
- Le troisième chapitre sera lui aussi consacré aux problèmes 1D (en particulier le modèle de RICE & MELE (1982)), mais cette fois avec une dépendance explicite en temps, ce qui fournira ensuite une transition naturelle vers les problèmes 2D. Nous y détaillerons en particulier la notion de pompe géométrique (THOULESS 1983).
- Nous aborderons à partir du chapitre 4 les problème 2D, en nous intéressant tout d'abord au réseau hexagonal de type graphène. En reprenant des arguments développés initialement pour l'effet Hall (THOULESS, KOHMOTO et al. 1982), nous étudierons à quelle condition sur la *courbure de Berry* une bande d'énergie à 2D peut être considérée comme topologiquement non triviale, et nous détaillerons comment cette courbure de Berry peut être mesurée expérimentalement.
- Le chapitre 5 sera consacré à la description du modèle proposé par HALDANE (1988) pour générer des bandes topologiques à 2D. Nous verrons comment cette idée peut être implémentée avec des systèmes atomiques et photoniques. Nous décrirons en détail la correspondance "cœur-bord" (*bulk-edge*) et nous expliquerons comment les canaux de bord peuvent être observés dans ces systèmes.
- Le dernier chapitre sera consacré à la réalisation atomique ou photonique de systèmes proches de l'effet Hall quantique "traditionnel", avec un champ magnétique uniforme appliqué à un échantillon. Nous expliquerons comment le nombre entier (nombre de Chern) qui caractérise une phase topologique peut être mesuré et nous concluons avec quelques perspectives de recherche de ce domaine.

Chapitre I

De la phase de Berry à la topologie d'une bande d'énergie

Ce premier chapitre est consacré à la mise en place de notions qui vont jouer un rôle central dans ce cours. La première concerne la *phase géométrique*, également appelée *phase de Berry*; elle nous indique comment évolue un système physique quand on varie lentement son (ou ses) paramètre(s) de contrôle; cette notion est particulièrement importante quand le paramètre revient à sa valeur initiale à l'issue de l'évolution. Nous utiliserons cette notion dans le cadre de la physique quantique, mais elle est également pertinente en physique classique, le pendule de Foucault en constituant une très belle illustration.

Nous serons souvent amenés à travailler avec des systèmes quantiques "à deux niveaux", c'est-à-dire des systèmes dont l'espace des états est de dimension 2. Nous allons donc également brièvement rappeler quelques éléments importants de la physique du spin 1/2, en particulier la représentation d'un état de ce spin ou pseudo-spin à l'aide de la *sphère de Bloch*.

Comme nous l'avons annoncé dans l'introduction générale, ce cours sera centré sur les propriétés topologiques qui apparaissent pour des particules en mouvement dans un potentiel périodique d'espace, c'est-à-dire $V(x) = V(x + a)$ pour un problème à une dimension. Nous résumerons donc les propriétés spécifiques de ces systèmes périodiques, en particulier le théorème de Bloch et la notion de bande d'énergie. Nous terminerons par la présentation d'un tout premier exemple de système topologique, le modèle SSH, dénommé ainsi à partir des noms de ceux qui l'ont proposé, Su, Schrieffer et Heeger.

1 La phase géométrique en physique quantique

L'ensemble du cours de cette année va utiliser de manière intensive la notion de phase géométrique, encore appelée *phase de Berry*. Cette notion, introduite¹ par Michael Berry en 1984, concerne l'évolution adiabatique d'un système quantique. Ce système est préparé à l'instant initial $t = 0$ dans l'état propre d'un hamiltonien dépendant d'un paramètre de contrôle extérieur que nous noterons λ et qui peut être un scalaire ou un vecteur à plusieurs composantes réelles $\lambda = (\lambda_1, \lambda_2, \dots)$. L'hamiltonien sera donc noté \hat{H}_λ . On s'intéresse au cas où le paramètre λ varie dans le temps [$\lambda = \lambda(t)$], mais cette variation est supposée arbitrairement lente; nous nous intéresserons plus particulièrement au cas où λ décrit une boucle fermée dans l'espace des paramètres pendant l'intervalle de temps T :

$$\lambda(T) = \lambda(0). \quad (\text{I.1})$$

Si l'état quantique suivi reste non dégénéré à tout instant t entre 0 et T , le théorème adiabatique nous indique que l'état final du système est le même que l'état initial à *une phase près* :

$$|\psi(T)\rangle = e^{i\Phi} |\psi(0)\rangle. \quad (\text{I.2})$$

Le facteur de phase Φ comporte deux termes :

1. Signalons aussi les travaux précurseurs de PANCHARATNAM (1956) en optique et MEAD & TRUHLAR (1979) en physique moléculaire.

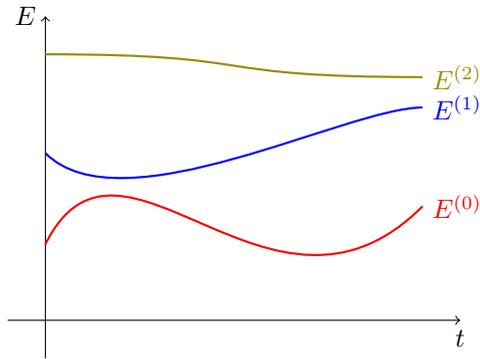


FIGURE I.1. Variation dans le temps des énergies propres d'un système quantique piloté par un paramètre extérieur λ . On suppose ici que les niveaux considérés ne sont dégénérés à aucun instant t .

- Le premier correspond à la *phase dynamique*, c'est-à-dire l'intégrale de l'énergie $E(t)$ sur le temps (à $1/\hbar$ près).
- Le second est la *phase géométrique*, qui ne dépend que de la boucle suivie par le paramètre $\lambda(t)$.

Le but de cette première partie est de mettre en place le formalisme permettant de calculer cette phase, qui reviendra ensuite sous plusieurs formes dans les cours qui vont suivre.

1-1 L'approximation adiabatique à l'ordre zéro

Partons donc d'un hamiltonien \hat{H}_λ dont on connaît pour chaque valeur de λ une base d'états propres $\{|\psi_\lambda^{(n)}\rangle\}$ (figure I.1) :

$$\hat{H}_\lambda |\psi_\lambda^{(n)}\rangle = E_\lambda^{(n)} |\psi_\lambda^{(n)}\rangle. \quad (\text{I.3})$$

Supposons que le système est préparé à l'instant initial $t = 0$ dans un état propre donné, par exemple l'état fondamental pour cette valeur de λ :

$$|\psi(0)\rangle = |\psi_{\lambda(0)}^{(0)}\rangle. \quad (\text{I.4})$$

Plaçons-nous de plus dans le cas où cet état reste non dégénéré pour toutes les valeurs de $\lambda(t)$ explorées entre les instants 0 et T .

Si le paramètre λ ne varie pas dans le temps, l'état du système à l'instant t est simplement donné par l'évolution libre que l'on déduit de l'équation de Schrödinger :

$$|\psi(t)\rangle = e^{i\Phi_{\text{dyn}}} |\psi_{\lambda(0)}^{(0)}\rangle \quad \text{avec} \quad \Phi_{\text{dyn}} = -E_{\lambda(0)}^{(0)} t/\hbar. \quad (\text{I.5})$$

Cet état reste égal à l'état initial, au facteur de *phase dynamique* près Φ_{dyn} . Cette "non-évolution" du système initialement préparé dans un état propre de l'hamiltonien est la raison de la terminologie souvent employée d'*états stationnaires*.

Supposons maintenant que le paramètre λ varie dans le temps, mais que cette variation est arbitrairement lente (le critère quantitatif sera donné un peu plus loin). Le théorème adiabatique stipule qu'en bonne approximation, l'état du système à l'instant t est donné par

$$|\psi(t)\rangle \approx e^{i\Phi(t)} |\psi_{\lambda(t)}^{(0)}\rangle. \quad (\text{I.6})$$

En d'autres termes, le système reste (à peu près) dans l'état fondamental de l'hamiltonien, bien que cet état fondamental ne soit plus le même à l'instant t qu'à l'instant 0 puisque les deux bases $\{|\psi_{\lambda(0)}^{(n)}\rangle\}$ et $\{|\psi_{\lambda(t)}^{(n)}\rangle\}$ ne coïncident pas.

La démonstration de ce théorème a été détaillée dans le cours 2013-14 (chapitre 3) et nous en donnons donc ici simplement les grandes lignes. Commençons par développer l'état $|\psi(t)\rangle$ du système sur la base "instantanée" $\{|\psi_{\lambda(t)}^{(n)}\rangle\}$:

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c^{(n)}(t) |\psi_{\lambda(t)}^{(n)}\rangle \quad (\text{I.7})$$

et reportons cette expression dans l'équation de Schrödinger

$$i\hbar \frac{d|\psi(t)\rangle}{dt} = \hat{H}_{\lambda(t)} |\psi(t)\rangle. \quad (\text{I.8})$$

En projetant cette équation sur les différents états $|\psi_{\lambda(t)}^{(n)}\rangle$, on en déduit un système différentiel du premier ordre pour les coefficients du développement $c_n(t)$:

$$i\hbar \dot{c}^{(n)} = E_\lambda^{(n)} c^{(n)} - \hbar \sum_\ell \alpha_\lambda^{(n,\ell)} c^{(\ell)}. \quad (\text{I.9})$$

Ce système fait notamment intervenir la dérivée par rapport au temps des vecteurs de base, par l'intermédiaire des coefficients

$$\alpha_{\lambda}^{(n,\ell)} = i \langle \psi_{\lambda}^{(n)} | \left(\frac{d}{dt} | \psi_{\lambda}^{(\ell)} \rangle \right), \quad (\text{I.10})$$

une quantité que nous noterons

$$\alpha_{\lambda}^{(n,\ell)} = i \langle \psi_{\lambda}^{(n)} | \partial_t \psi_{\lambda}^{(\ell)} \rangle. \quad (\text{I.11})$$

Cette notation est utile car très compacte, mais présente une certaine ambiguïté : les états $|\psi_{\lambda}^{(\ell)}\rangle$ ne dépendent pas explicitement du temps ; ils varient dans le temps parce qu'ils dépendent explicitement du paramètre λ qui lui-même dépend du temps. Il faut donc comprendre la notation ci-dessus comme

$$\langle \psi_{\lambda}^{(n)} | \partial_t \psi_{\lambda}^{(\ell)} \rangle \equiv \dot{\lambda} \cdot \langle \psi_{\lambda}^{(n)} | \nabla \psi_{\lambda}^{(\ell)} \rangle, \quad (\text{I.12})$$

où nous avons introduit la notation

$$|\nabla \psi_{\lambda}^{(\ell)}\rangle \equiv \left(\frac{\partial}{\partial \lambda_1} | \psi_{\lambda}^{(\ell)} \rangle, \frac{\partial}{\partial \lambda_2} | \psi_{\lambda}^{(\ell)} \rangle, \dots \right). \quad (\text{I.13})$$

De manière imagée, on peut dire que ces coefficients $\alpha_{\lambda}^{(n,\ell)}$ donnent la "vitesse de rotation" de la base des états propres dans l'espace de Hilbert quand le paramètre λ varie dans le temps.

L'approximation adiabatique consiste à résoudre de manière perturbative ce système différentiel en prenant comme petit paramètre le rapport

$$\epsilon \equiv \frac{|\alpha_{\lambda}^{(n,\ell)}|_{\max}}{|\alpha_{\lambda}^{(n,\ell)}|_{\min}} \quad \text{avec} \quad \hbar \omega_{\lambda}^{(n,\ell)} = E_{\lambda}^{(n)} - E_{\lambda}^{(\ell)}. \quad (\text{I.14})$$

Il faut que la "vitesse de rotation" de l'état occupé, ici $\ell = 0$, reste très petite devant toutes les fréquences de Bohr impliquant cet état (MESSIAH 1961). Quand la condition $\epsilon \ll 1$ est satisfaite à tout instant, le système différentiel mentionné plus haut se ramène à :

$$i\hbar \dot{c}^{(0)}(t) \approx \left[E_{\lambda(t)}^{(0)} - i\hbar \dot{\lambda} \cdot \langle \psi_{\lambda}^{(0)} | \nabla \psi_{\lambda}^{(0)} \rangle \right] c^{(0)}(t) \quad (\text{I.15})$$

$$c^{(n)}(t) \approx 0 \quad \text{si } n \neq 0. \quad (\text{I.16})$$

On notera que le terme intervenant dans le crochet [...] du membre de droite de (I.15) est toujours réel. En effet l'état propre $|\psi_{\lambda}^{(0)}\rangle$ est reste de norme 1 quand λ varie de sorte que

$$0 = \frac{d}{dt} \langle \psi_{\lambda}^{(0)} | \psi_{\lambda}^{(0)} \rangle = \dot{\lambda} \cdot \left(\langle \nabla \psi_{\lambda}^{(0)} | \psi_{\lambda}^{(0)} \rangle + \langle \psi_{\lambda}^{(0)} | \nabla \psi_{\lambda}^{(0)} \rangle \right) \quad (\text{I.17})$$

si bien que $\langle \psi_{\lambda}^{(0)} | \nabla \psi_{\lambda}^{(0)} \rangle$ est imaginaire pur. La réalité de ce terme entraîne que la solution de l'équation (I.15) est une fonction $c^{(0)}(t)$ qui est toujours de module 1. L'état $|\psi(t)\rangle$ reste donc de norme 1 et la solution trouvée à cet ordre correspond bien à la forme annoncée en (I.6).

1-2 Connexion de Berry et phase géométrique

Considérons l'évolution du coefficient complexe $c^{(0)}$, donnée en (I.15). Puisque le module de ce coefficient reste égal à 1, l'enjeu est simplement de déterminer sa phase. Pour manipuler des expressions compactes, introduisons pour chaque état propre de \hat{H}_{λ} la connexion de Berry (BERRY 1984; BERRY 1989)

$$\mathcal{A}_{\lambda}^{(n)} = i \langle \psi_{\lambda}^{(n)} | \nabla \psi_{\lambda}^{(n)} \rangle. \quad (\text{I.18})$$

Il s'agit d'un vecteur à composantes réelles, le nombre de composantes étant égal à la dimension de l'espace associé à λ . En pratique, cet espace sera pour nous de dimension 1, 2 ou 3.

L'équation du mouvement pour le coefficient $c^{(0)}$ se réécrit alors

$$\dot{c}^{(0)}(t) = i \left[-E_{\lambda}^{(0)}/\hbar + \dot{\lambda} \cdot \mathcal{A}_{\lambda}^{(0)} \right] c^{(0)}(t) \quad (\text{I.19})$$

avec

$$\dot{\lambda} \cdot \mathcal{A}_{\lambda}^{(0)} = i \langle \psi_{\lambda}^{(0)} | \partial_t \psi_{\lambda}^{(0)} \rangle. \quad (\text{I.20})$$

Elle s'intègre sous la forme

$$c^{(0)}(t) = e^{i\Phi_{\text{dyn}}} e^{i\Phi_{\text{geom}}} c^{(0)}(0). \quad (\text{I.21})$$

La *phase dynamique* provient de la contribution de l'énergie $E_{\lambda}^{(0)}$ à (I.19) :

$$\Phi_{\text{dyn}} = -\frac{1}{\hbar} \int_0^t E_{\lambda(t')}^{(0)} dt', \quad (\text{I.22})$$

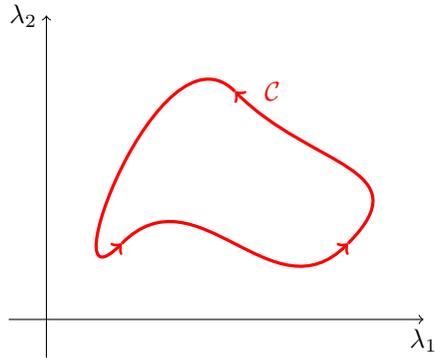


FIGURE I.2. Contour fermé C pour le paramètre λ , supposé évoluer ici dans un espace à deux dimensions.

et elle généralise le résultat (I.5) au cas où l'énergie $E_\lambda^{(0)}$ dépend du temps via le paramètre λ . La seconde contribution à la phase, appelée *phase géométrique*, s'écrit :

$$\Phi_{\text{geom}} = i \int_0^t \langle \psi_\lambda^{(0)} | \partial_t \psi_\lambda^{(0)} \rangle dt = \int_0^t \dot{\lambda} \cdot \mathcal{A}_\lambda^{(0)} dt, \quad (\text{I.23})$$

ou encore :

$$\Phi_{\text{geom}} = \int_{\lambda(0)}^{\lambda(t)} \mathcal{A}_\lambda^{(0)} \cdot d\lambda. \quad (\text{I.24})$$

Sous cette forme, on voit qu'elle ne dépend en fait que du chemin choisi dans l'espace des λ pour aller de $\lambda(0)$ à $\lambda(t)$, mais ne fait pas intervenir le temps mis pour parcourir ce chemin. Comme l'a joliment formulé Berry, la phase géométrique répond à la question "Par où le système est-il passé lors de son évolution adiabatique?" alors que la phase dynamique répond à la question complémentaire "Combien de temps a-t-il fallu pour parcourir ce chemin?"

1-3 Contour fermé et courbure de Berry

Dans la suite de ce cours, nous serons fréquemment amenés à considérer des situations où le chemin C parcouru par le paramètre $\lambda(t)$ est fermé

(figure I.2). Nous avons alors $\lambda(t_f) = \lambda(t_i)$, où t_i et t_f désignent respectivement l'instant initial et l'instant final (nous avons pris $t_i = 0$ dans tout ce qui précède). La phase géométrique s'exprime alors comme une intégrale sur un contour fermé dans l'espace des λ :

$$\Phi_{\text{geom}} = \oint_C \mathcal{A}_\lambda^{(0)} \cdot d\lambda. \quad (\text{I.25})$$

Ce type d'intégrale d'un champ de vecteur sur un contour fermé se calcule bien souvent par la formule de Stokes, en remplaçant l'intégrale de contour par l'intégrale sur une surface Σ s'appuyant sur ce contour. À deux ou trois dimensions, on introduit pour cela la *courbure de Berry* :

$$\Omega_\lambda^{(n)} = \nabla \times \mathcal{A}_\lambda^{(n)} \quad (\text{I.26})$$

où le rotationnel est pris (comme les gradients qui précèdent) par rapport à la variable $\lambda = (\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3)$. En utilisant (I.18), cette définition s'écrit encore

$$\Omega_\lambda^{(n)} = i \langle \nabla \psi_\lambda^{(n)} | \times | \nabla \psi_\lambda^{(n)} \rangle. \quad (\text{I.27})$$

En absence de singularité de $\mathcal{A}_\lambda^{(0)}$, on a alors

$$\Phi_{\text{geom}} = \iint_\Sigma \mathbf{n} \cdot \Omega_\lambda^{(n)} d\lambda \quad (\text{I.28})$$

où \mathbf{n} désigne la normale orientée par rapport à la surface.

Rôle de la dimension d'espace. À partir des formules (I.25-I.28), il semble qu'il faille un espace de dimension au moins égale à 2 pour avoir une phase géométrique non nulle sur un contour fermé. Intuitivement, dans un espace de dimension 1, un contour fermé constitue un simple aller-retour et les contributions de l'aller et du retour se compensent dans (I.25). Ce raisonnement est toutefois trop naïf pour être valable en toute généralité : l'étude des potentiels périodiques à une dimension nous en fournira un contre-exemple ; dans ce cas, le paramètre λ est le moment de Bloch q et l'espace dans lequel ce paramètre évolue possède une structure circulaire. On peut alors effectuer un contour fermé dans l'espace des paramètres sans avoir à y "rebrousser chemin".

Analogie avec l'effet Aharonov–Bohm. Quand une particule de charge q_e décrit une trajectoire fermée \mathcal{C} dans l'espace réel en présence d'un champ magnétique $\mathbf{B}(\mathbf{r})$ dérivant lui-même du potentiel vecteur $\mathbf{A}(\mathbf{r})$, sa fonction d'onde acquiert une phase géométrique, détectable par interférométrie. Cette phase est donnée par l'expression (voir AHARONOV & BOHM (1959), EHRENBERG & SIDAY (1949) et le cours 2013-14) :

$$\Phi_{AB} = \frac{q_e}{\hbar} \oint_{\mathcal{C}} \mathbf{A}(\mathbf{r}) \cdot d\mathbf{r} = \frac{q_e}{\hbar} \iint_{\Sigma} \mathbf{n} \cdot \mathbf{B}(\mathbf{r}) d^2r \quad (\text{I.29})$$

Il y a une analogie claire entre les résultats qui précèdent et ceux du magnétisme orbital, sur laquelle nous aurons l'occasion de revenir dans un chapitre ultérieur.

Changement de jauge. Il est intéressant de regarder les modifications apportées à la connexion et à la courbure de Berry quand on modifie la définition des états propres $|\psi_{\lambda}^{(n)}\rangle$ en les multipliant chacun par un facteur de phase $\chi^{(n)}$ dépendant de λ :

$$|\psi_{\lambda}^{(n)}\rangle \longrightarrow |\tilde{\psi}_{\lambda}^{(n)}\rangle = e^{i\chi^{(n)}} |\psi_{\lambda}^{(n)}\rangle. \quad (\text{I.30})$$

Supposons pour l'instant que la fonction $\chi^{(n)}$ est régulière en tout point λ . La connexion de Berry est donc changée en :

$$\mathcal{A}_{\lambda}^{(n)} \longrightarrow \tilde{\mathcal{A}}_{\lambda}^{(n)} = \mathcal{A}_{\lambda}^{(n)} - \nabla\chi_{\lambda}^{(n)} \quad (\text{I.31})$$

alors que la courbure de Berry est inchangée, comme on le voit en prenant le rotationnel de l'expression qui précède :

$$\Omega_{\lambda}^{(n)} \longrightarrow \tilde{\Omega}_{\lambda}^{(n)} = \Omega_{\lambda}^{(n)}. \quad (\text{I.32})$$

La courbure de Berry est donc invariante dans le changement de jauge (IV.75); il en va de même pour la phase géométrique accumulée sur un contour fermé puisque celle-ci s'écrit comme l'intégrale de Ω_{λ} sur la surface Σ s'appuyant sur le contour [eq. (I.28)].

Il peut également arriver que la fonction $\chi^{(n)}$ soit régulière le long du contour \mathcal{C} , mais pas sur l'ensemble de la surface Σ . On ne peut alors pas utiliser (I.28) car la connexion de Berry \mathcal{A}_{λ} peut elle aussi être singulière

en certains points de Σ . En revanche, le résultat (I.25) reste correct et on en déduit :

$$\tilde{\Phi}_{\text{geom}} = \oint_{\mathcal{C}} \tilde{\mathcal{A}}_{\lambda}^{(0)} \cdot d\lambda = \Phi_{\text{geom}} - \oint_{\mathcal{C}} \nabla\chi_{\lambda}^{(n)} \cdot d\lambda. \quad (\text{I.33})$$

Or la fonction $e^{i\chi_{\lambda}^{(n)}}$ est supposée mono-valuée pour que la nouvelle jauge soit bien définie. On a donc

$$\oint_{\mathcal{C}} \nabla\chi_{\lambda}^{(n)} \cdot d\lambda = \chi^{(n)} \Big|_{\text{fin}} - \chi^{(n)} \Big|_{\text{init}} = 2n\pi \quad (\text{I.34})$$

où "init" et "fin" correspondent au même paramètre λ du contour. On en déduit donc le comportement de la phase géométrique dans une transformation de jauge *non singulière sur le contour \mathcal{C}* :

$$e^{i\tilde{\Phi}_{\text{geom}}} = e^{i\Phi_{\text{geom}}}. \quad (\text{I.35})$$

1-4 Ordre suivant de l'approximation adiabatique

Nous avons besoin à plusieurs reprises de l'ordre suivant du développement fait ci-dessus. Plus précisément, il est souvent utile de connaître la réponse linéaire du système, c'est-à-dire la valeur des amplitudes $c^{(n)}(t)$ des états initialement non peuplés à l'ordre en 1 en la perturbation λ .

L'équation d'évolution approchée d'un coefficient $c^{(n)}$ s'écrit pour $n \neq 0$:

$$i\hbar \dot{c}^{(n)}(t) \approx E_{\lambda}^{(n)} c^{(n)}(t) - i\hbar \dot{\lambda} \cdot \langle \psi_{\lambda}^{(n)} | \nabla \psi_{\lambda}^{(0)} \rangle c^{(0)}(t). \quad (\text{I.36})$$

A priori la solution de cette équation différentielle dépend de l'ensemble de "l'histoire" du paramètre λ et pas seulement de sa valeur à l'instant t . Toutefois la théorie de la réponse linéaire suppose généralement, au moins de manière implicite, que le système est couplé à un réservoir, ce qui implique l'existence d'un processus de dissipation. Nous pouvons prendre ce processus de dissipation en compte en ajoutant, de manière purement phénoménologique, un (faible) terme d'amortissement dans l'équation d'évolution de $c^{(n)}(t)$:

$$i\hbar \dot{c}^{(n)}(t) \approx (E_{\lambda}^{(n)} - i\hbar\gamma^{(n)}) c^{(n)}(t) - i\hbar \dot{\lambda} \cdot \langle \psi_{\lambda}^{(n)} | \nabla \psi_{\lambda}^{(0)} \rangle c^{(0)}(t). \quad (\text{I.37})$$

Pour simplifier les calculs, plaçons-nous dans le cas où $E^{(n)}$ et $\gamma^{(n)}$ n'évo- luent pas au cours du temps. Cette équation différentielle du premier ordre

avec un terme source s'intègre en

$$c^{(n)}(t) = c^{(n)}(0) e^{-i(E^{(n)} - i\hbar\gamma^{(n)})t/\hbar} - \int_0^t e^{-i(E^{(n)} - i\hbar\gamma^{(n)})(t-t')/\hbar} \left\{ \dot{\lambda} \cdot \langle \psi_{\lambda}^{(n)} | \nabla \psi_{\lambda}^{(0)} \rangle c^{(0)}(t') \right\} dt'. \quad (\text{I.38})$$

Supposons que l'amortissement décrit par le paramètre $\gamma^{(n)}$ vérifie simultanément les deux conditions suivantes :

- Ce paramètre est petit devant toutes les fréquences de Bohr $(E^{(n)} - E^{(0)})/\hbar$ de sorte qu'il ne perturbe que très peu la dynamique "libre".
- En revanche, il est assez grand pour que le temps de mémoire $1/\gamma^{(n)}$ soit court devant le temps caractéristique de variation de λ .

Dans ces conditions, on peut approcher $c_0(t')$ dans le terme entre accolades dans l'intégrale de (I.38) par

$$c_0(t') \approx c_0(t) e^{iE_0(t-t')/\hbar} \quad (\text{I.39})$$

et remplacer les autres termes de cette accolade, en principe évalués à l'instant t' , par leur valeur à l'instant t . Supposons de plus que le temps t soit grand devant $1/\gamma^{(n)}$; l'intégrale restante se calcule aisément pour donner :

$$\int_0^t e^{-i(E^{(n)} - E^{(0)} - i\hbar\gamma^{(n)})(t-t')/\hbar} dt' \approx \frac{-i\hbar}{E^{(n)} - E^{(0)}} \quad (\text{I.40})$$

ce qui donne finalement à l'ordre 1 en λ :

$$c^{(n)}(t) \approx i\hbar \dot{\lambda} \cdot \frac{\langle \psi_{\lambda}^{(n)} | \nabla \psi_{\lambda}^{(0)} \rangle}{E_{\lambda}^{(n)} - E_{\lambda}^{(0)}}. \quad (\text{I.41})$$

Cette expression décrit la *réponse linéaire* du système à la variation dans le temps du paramètre λ . Le terme phénoménologique d'amortissement en $-\gamma^{(n)}$, supposé petit devant les fréquences de Bohr $\omega^{(n,0)}$, mais suffisamment grand pour "effacer" la mémoire des valeurs $\lambda(t')$ notablement différentes de $\lambda(t)$, n'apparaît pas dans le résultat, au moins à cet ordre du calcul.

2 L'exemple d'un spin 1/2

Dans ce cours, nous allons fréquemment faire appel à la modélisation la plus simple possible d'un système quantique, le système à deux niveaux que l'on peut considérer comme un (pseudo-)spin 1/2. Nous allons résumer dans ce paragraphe quelques propriétés importantes pour la suite, en lien avec la phase géométrique et sa représentation sur la *sphère de Bloch*.

2-1 Hamiltonien d'un système à deux niveaux

En considérant un système à deux niveaux comme un spin 1/2, notons les deux états de base du système $|+\rangle$ et $|-\rangle$. Ces états sont par définition les états propres de la projection du spin selon un axe de quantification donné, par exemple \hat{S}_z .

L'hamiltonien le plus général pour un tel système est de la forme

$$\hat{H} = E_0 \hat{1} - \mathbf{h} \cdot \hat{\sigma}, \quad (\text{I.42})$$

où E_0, h_x, h_y, h_z sont des nombres réels ayant la dimension d'une énergie et où les $\hat{\sigma}_i, i = x, y, z$, sont les trois matrices de Pauli :

$$\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (\text{I.43})$$

Le terme en $E_0 \hat{1}$ affecte les deux états $|\pm\rangle$ de la même façon et constitue une simple définition de l'origine des énergies. Le terme $-\mathbf{h} \cdot \hat{\sigma}$ correspond par exemple à une interaction magnétique dans le cas où le spin 1/2 est associé à un moment magnétique $\hat{\mu}$:

$$\hat{\mu} = \mu \hat{\sigma}, \quad (\text{I.44})$$

Si ce moment magnétique est plongé dans un champ magnétique extérieur \mathbf{B} , l'hamiltonien s'écrit en effet

$$\hat{H} = -\mathbf{B} \cdot \hat{\mu} = -\mathbf{h} \cdot \hat{\sigma} \quad \text{avec} \quad \mathbf{h} = \mu \mathbf{B}. \quad (\text{I.45})$$

2-2 La sphère de Bloch

Il est souvent utile de repérer le vecteur \mathbf{h} intervenant dans l'hamiltonien (I.42) par son module $|\mathbf{h}|$ et ses angles en coordonnées sphériques (θ, ϕ) :

$$\mathbf{h} = |\mathbf{h}| \mathbf{n} \quad \text{avec} \quad \mathbf{n} = \begin{pmatrix} \cos \phi \sin \theta \\ \sin \phi \sin \theta \\ \cos \theta \end{pmatrix}, \quad 0 \leq \phi < 2\pi, \quad 0 \leq \theta \leq \pi. \quad (\text{I.46})$$

L'hamiltonien s'écrit avec cette paramétrisation

$$\hat{H} = E_0 \hat{1} - |\mathbf{h}| \begin{pmatrix} \cos \theta & e^{-i\phi} \sin \theta \\ e^{i\phi} \sin \theta & -\cos \theta \end{pmatrix}. \quad (\text{I.47})$$

Les énergies propres ne dépendent que de E_0 et du module de \mathbf{h} :

$$E^{(\pm)} = E_0 \pm |\mathbf{h}| \quad (\text{I.48})$$

alors que les états propres ne dépendent que de l'orientation de \mathbf{h} :

$$|\psi^{(-)}\rangle = \begin{pmatrix} \cos(\theta/2) \\ e^{i\phi} \sin(\theta/2) \end{pmatrix} \quad |\psi^{(+)}\rangle = \begin{pmatrix} \sin(\theta/2) \\ -e^{i\phi} \cos(\theta/2) \end{pmatrix}. \quad (\text{I.49})$$

Nous serons souvent amenés à représenter l'un de ces états propres, $|\psi^{(-)}\rangle$ par exemple, de manière géométrique. Puisque cet état ne dépend que des angles θ et ϕ avec le domaine de variation donné en (I.46), il est naturel de lui associer de manière biunivoque un point de la surface de la sphère de rayon unité appelée dans ce contexte *sphère de Bloch* (figure II.5). Les coordonnées de ce point sont égales à celles du vecteur unitaire \mathbf{n} introduit en (I.46).

La représentation en terme de sphère de Bloch est biunivoque : chaque point de la sphère de Bloch correspond à un vecteur \mathbf{n} unique, donc un état propre unique $|\psi^{(-)}\rangle$ de l'hamiltonien général d'un spin 1/2. Par ailleurs, pour un point donné de la sphère, on peut presque toujours associer un unique couple (θ, ϕ) . Les seules exceptions à cette règle sont les pôles nord et sud, qui correspondent respectivement à $\theta = 0$ et $\theta = \pi$, et pour lesquels ϕ peut prendre n'importe quelle valeur.

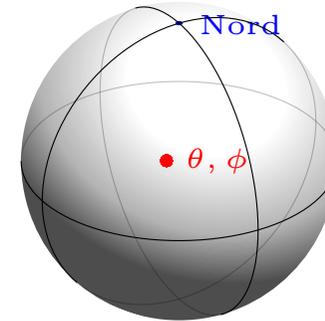


FIGURE I.3. Sphère de Bloch. Sur cette sphère de rayon unité, un point est repéré par ses angles en coordonnées sphériques (θ, ϕ) . À tout point de la surface de la sphère, on peut associer un et un seul état du spin 1/2, qui est état propre de l'hamiltonien (I.47) avec l'énergie la plus basse $E^{(-)} = E_0 - |\mathbf{h}|$.

2-3 Courbure de Berry et phase géométrique (spin 1/2)

Le concept de suivi adiabatique pour un (pseudo-)spin 1/2 décrit par l'hamiltonien $-\mathbf{h} \cdot \hat{\sigma}$ s'applique de manière directe en considérant que le vecteur \mathbf{h} lui-même joue le rôle de paramètre extérieur, c'est-à-dire

$$\lambda \equiv \mathbf{h}. \quad (\text{I.50})$$

Dans ce cas, un calcul direct, relativement long mais sans difficulté, donne (BERRY 1984)

$$\Omega^{(\pm)} = \pm \frac{\mathbf{h}}{2|\mathbf{h}|^3}. \quad (\text{I.51})$$

Cette formule permet d'évaluer directement la phase géométrique acquise par le spin quand \mathbf{h} parcourt lentement un contour fermé²

$$\mathcal{C} : \quad \mathbf{h}(0) \rightarrow \mathbf{h}(t) \rightarrow \mathbf{h}(T) = \mathbf{h}(0), \quad (\text{I.52})$$

2. Rappelons l'hypothèse nécessaire pour l'utilisation du théorème adiabatique : il n'y a pas de dégénérescence entre les niveaux d'énergie de \hat{H} , ce qui signifie dans ce cas que le contour ne passe pas par le champ nul $\mathbf{h} = 0$.

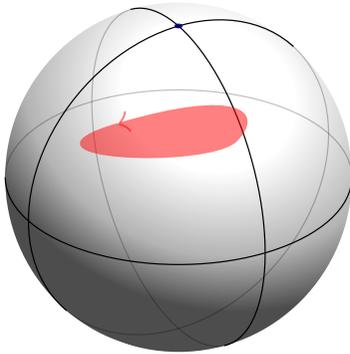


FIGURE I.4. Angle solide α sous-tendu par le vecteur unitaire $\mathbf{n} = \mathbf{h}/|\mathbf{h}|$ quand le paramètre λ parcourt le contour fermé \mathcal{C} . La phase géométrique pour un spin $1/2$ est égale $\alpha/2$.

On obtient dans ce cas :

$$\Phi_{\text{geom.}}^{(\pm)}(\mathcal{C}) = \iint_{\mathcal{S}} \boldsymbol{\Omega}^{(\pm)} \cdot d^2\mathbf{S} = \pm \frac{1}{2} \iint_{\mathcal{S}} \frac{\mathbf{h}}{|\mathbf{h}|^3} \cdot d^2\mathbf{S}, \quad (\text{I.53})$$

où la surface \mathcal{S} s'appuie sur le contour \mathcal{C} . Ce résultat peut également s'écrire en fonction du vecteur unitaire $\mathbf{n} = \mathbf{h}/|\mathbf{h}|$ reporté sur la sphère de Bloch :

$$\Phi_{\text{geom.}}^{(\pm)}(\mathcal{C}) = \pm \frac{1}{2} \iint_{\mathcal{S}} \mathbf{n} \cdot d^2\mathbf{s} \quad (\text{I.54})$$

où $d^2\mathbf{s} = d^2\mathbf{S}/|\mathbf{h}|^2$ représente l'élément de surface orienté sur la sphère de rayon unité. On arrive ainsi à

$$\Phi_{\text{geom.}}^{(\pm)}(\mathcal{C}) = \pm \frac{\alpha}{2} \quad (\text{I.55})$$

où α désigne l'angle solide sous-tendu par le vecteur unitaire \mathbf{n} depuis le centre de la sphère de Bloch (figure I.4).

Plus généralement, si λ est une paramétrisation quelconque du vecteur \mathbf{h} , et en particulier de ses angles polaires (θ, ϕ) , on obtient à partir de l'expression des vecteurs propres (I.49) :

$$\mathcal{A}^{(\pm)} = -\frac{1}{2}(1 \pm \cos \theta) \nabla_{\lambda}(\phi), \quad \boldsymbol{\Omega}^{(\pm)} = \pm \frac{1}{2} \nabla_{\lambda}(\phi) \times \nabla_{\lambda}(\cos \theta). \quad (\text{I.56})$$

Remarquons que le résultat (I.51) peut être retrouvé à partir de ces expressions générales en utilisant le fait que pour $\lambda = \mathbf{h}$, on a :

$$\nabla_{\mathbf{h}}(\cos \theta) = \frac{1}{|\mathbf{h}|^3} \begin{pmatrix} -h_x h_z \\ -h_y h_z \\ h_x^2 + h_y^2 \end{pmatrix}, \quad \nabla_{\mathbf{h}}(\phi) = \frac{1}{|\mathbf{h}_{\perp}|^2} \begin{pmatrix} -h_y \\ h_x \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{I.57})$$

avec $|\mathbf{h}_{\perp}|^2 = h_x^2 + h_y^2$.

3 Potentiel périodique en physique quantique

Nous passons maintenant au second ingrédient central de ce cours : le mouvement de particules dans un potentiel périodique. Nous allons brièvement rappeler le théorème de Bloch et la façon dont émerge la notion de bande d'énergie. Nous nous placerons à une dimension pour simplifier les notations, mais le formalisme se généralise sans difficulté aux dimensions supérieures.

3-1 Le théorème de Bloch

Considérons le mouvement uni-dimensionnel d'une particule de masse m dans le potentiel $V(x)$. Ce mouvement est décrit par l'hamiltonien

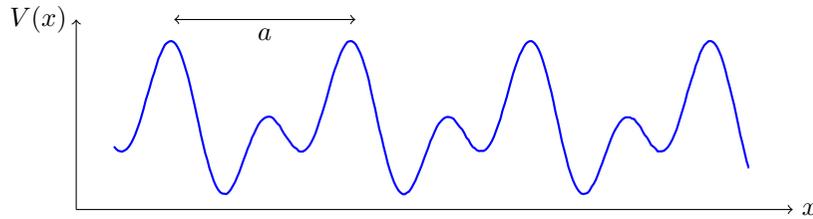
$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x}) \quad (\text{I.58})$$

où \hat{p} est l'opérateur impulsion de la particule, dont l'action sur une fonction d'onde $\psi(x, t)$ s'écrit

$$\hat{p} \psi(x, t) = -i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial x} \quad \text{encore noté } -i\hbar \partial_x \psi. \quad (\text{I.59})$$

Nous nous intéressons dans tout ce cours à des potentiels $V(x)$ qui sont périodiques dans l'espace, de période a (figure I.5) :

$$V(x+a) = V(x). \quad (\text{I.60})$$


 FIGURE I.5. Potentiel périodique uni-dimensionnel de période a .

Cette hypothèse vient simplifier considérablement la recherche des fonctions propres de l'hamiltonien, qui sont les états d'énergie bien définie. L'invariance par translation de \hat{H} s'écrit mathématiquement comme

$$[\hat{H}, \hat{\mathcal{T}}_a] = 0 \quad (\text{I.61})$$

où $\hat{\mathcal{T}}_a$ est l'opérateur translation de la quantité a :

$$\hat{\mathcal{T}}_a \psi(x) = \psi(x - a). \quad (\text{I.62})$$

On peut donc chercher une base de fonctions propres communes à \hat{H} et $\hat{\mathcal{T}}_a$, ou plus précisément chercher les états propres de \hat{H} à l'intérieur des sous-espaces propres de $\hat{\mathcal{T}}_a$ (ASHCROFT & MERMIN 1976).

Or il est aisé de trouver ces sous-espaces propres. Puisque l'opérateur $\hat{\mathcal{T}}_a$ est unitaire ($\hat{\mathcal{T}}_a^{-1} = \hat{\mathcal{T}}_a^\dagger = \hat{\mathcal{T}}_{-a}$), on sait que ses valeurs propres³ sont les nombres complexes de module 1, que l'on note traditionnellement e^{iqa} . La quantité q , qui a la dimension d'un nombre d'onde, est appelée *moment (ou quasi-moment) de Bloch*. Nous allons préciser son espace de variation pertinent au paragraphe suivant, mais q peut pour l'instant être représenté par n'importe quel nombre réel entre $-\infty$ et $+\infty$. Une fonction propre de $\hat{\mathcal{T}}_a$ vérifie donc par définition

$$\hat{\mathcal{T}}_a \psi_q(x) = e^{iqa} \psi_q(x) \quad (\text{I.63})$$

ce qui, combiné avec (I.62), entraîne que $\psi_q(x)$ peut se mettre sous la forme

$$\psi_q(x) = e^{iqx} u_q(x) \quad \text{avec} \quad u_q \text{ périodique : } u_q(x + a) = u_q(x). \quad (\text{I.64})$$

3. On se limite ici aux fonctions propres ne divergeant pas exponentiellement vite en $\pm\infty$.

C'est donc sous cette forme, appelée *forme de Bloch*, que nous chercherons les états propres d'un hamiltonien périodique dans l'espace. La signification physique de cette forme est claire : les fonctions de Bloch sont le produit d'une onde plane e^{iqx} (que l'on trouverait comme état propre pour une particule libre) et d'une fonction $u_q(x)$ périodique, de même période que le potentiel $V(x)$.

3-2 L'hamiltonien \hat{H}_q

Intéressons-nous à un état propre commun à l'hamiltonien \hat{H} et à l'opérateur translation $\hat{\mathcal{T}}_a$. Cet état propre est donc de la forme de Bloch (I.64), et nous noterons son énergie E_q . L'équation aux valeurs propres portant sur ψ_q peut se réécrire pour la fonction périodique $u_q(x)$:

$$\hat{H} \psi_q(x) = E_q \psi_q(x) \quad \Rightarrow \quad \hat{H}_q u_q(x) = E_q u_q(x) \quad (\text{I.65})$$

où l'opérateur \hat{H}_q est donné par :

$$\hat{H}_q = \frac{(\hat{p} + \hbar q)^2}{2m} + V(x) = \frac{\hbar^2}{2m} (-i\partial_x + q)^2 + V(x). \quad (\text{I.66})$$

\hat{H}_q est un opérateur hermitien, comme l'hamiltonien de départ \hat{H} , et nous l'appellerons *hamiltonien pour la partie périodique* ou encore *hamiltonien périodique*.

Nous arrivons ainsi à un point important : l'hamiltonien \hat{H}_q dépend d'un paramètre continu, le quasi-moment q . Pour chaque valeur de q , on s'attend à trouver une famille d'états propres et d'énergies propres pour l'équation (I.65) associée à la condition de périodicité $u_q(x + a) = u_q(x)$:

$$\{u_q^{(n)}(x)\}, \quad \{E_q^{(n)}\}, \quad (\text{I.67})$$

où l'indice entier n repère les états par énergie croissante

$$E_q^{(0)} \leq E_q^{(1)} \leq E_q^{(2)} \leq \dots \quad (\text{I.68})$$

On a donc par définition :

$$\hat{H}_q u_q^{(n)}(x) = E_q^{(n)} u_q^{(n)}(x) \quad (\text{I.69})$$

et

$$\hat{H} \psi_q^{(n)}(x) = E_q^{(n)} \psi_q^{(n)}(x) \quad \text{avec} \quad \psi_q^{(n)}(x) = e^{iqx} u_q^{(n)}(x). \quad (\text{I.70})$$

Comme q est un paramètre réel, on s'attend – sauf singularité – à ce que les états propres $u_q^{(n)}(x)$ et les énergies propres $E_q^{(n)}$ soient des fonctions continues de q , avec la possibilité de suivre ces états adiabatiquement si le paramètre q peut être contrôlé et varié de manière douce. C'est cette dépendance continue de l'hamiltonien \hat{H}_q vis à vis du paramètre q qui est à la base de la topologie que l'on va pouvoir assigner aux niveaux d'énergie d'une particule dans un potentiel périodique.

3-3 La zone de Brillouin

Jusqu'ici, nous n'avons rien dit sur le paramètre q , si ce n'est qu'il devait être réel pour que la valeur propre e^{iqa} de l'opérateur translation soit un nombre de module 1. En fait, l'expression même de cette valeur propre montre immédiatement que les deux valeurs du quasi-moment

$$q_1 = q \quad \text{et} \quad q_2 = q + \frac{2\pi}{a} \quad (\text{I.71})$$

correspondent à la même valeur de e^{iqa} .

Cette identification est également valable au niveau des fonctions d'onde associées à ces deux quasi-moments :

$$\psi_{q_1}(x) = e^{iq_1 x} u_{q_1}(x) \quad \text{et} \quad \psi_{q_2}(x) = e^{iq_2 x} u_{q_2}(x) \quad (\text{I.72})$$

puisque ψ_{q_2} peut se réécrire :

$$\begin{aligned} \psi_{q_2}(x) &= e^{iq_1 x} e^{i2\pi x/a} u_{q_2}(x) \\ &= e^{iq_1 x} v(x) \quad \text{avec} \quad v(x) = e^{i2\pi x/a} u_{q_2}(x), \end{aligned} \quad (\text{I.73})$$

où la fonction $v(x)$ est elle-même périodique de période a . Les deux espaces dans lesquels on va chercher les états propres de \hat{H} coïncident donc si les deux quasi-moments q_1 et q_2 diffèrent de $2\pi/a$ (ou d'un des ses multiples).

Comme toujours en physique quantique, il est important d'identifier une base des états propres de l'hamiltonien, c'est-à-dire un ensemble de vecteurs propres $\{|\psi_\alpha\rangle\}$ orthogonaux entre eux sur lequel un état physique du système $|\psi\rangle$ possède une décomposition unique

$$|\psi\rangle = \sum_{\alpha} c_{\alpha} |\psi_{\alpha}\rangle. \quad (\text{I.74})$$

Il est pour cela essentiel de ne pas incorporer plusieurs fois les mêmes vecteurs dans l'ensemble $\{|\psi_\alpha\rangle\}$. Il faut donc restreindre la variation du paramètre q à un intervalle de largeur $2\pi/a$ en imposant par exemple :

$$-\frac{\pi}{a} \leq q < +\frac{\pi}{a}. \quad (\text{I.75})$$

La zone ainsi délimitée dans l'espace des q est appelée (*première*) *zone de Brillouin*. Notons que deux fonctions ψ_{q_1} et ψ_{q_2} choisies dans cette zone sont toujours orthogonales puisqu'elles sont états propres de l'opérateur translation \hat{T}_a avec des valeurs propres différentes. L'indice α apparaissant de manière formelle dans (I.74) doit alors être compris comme le couple formé par le quasi-moment q dans l'intervalle (I.75) et l'indice n repérant les états propres à q donné :

$$\alpha \equiv (q, n). \quad (\text{I.76})$$

Structure géométrique de la zone de Brillouin. Une fois la valeur du quasi-moment restreinte à l'intervalle $[-\pi/a, \pi/a]$, on peut s'interroger sur la correspondance à établir entre les deux extrémités de cet intervalle. En fait, comme nous l'avons dit plus haut, une fonction de Bloch $\psi_q(x)$ associée à l'indice q peut également être vue comme une fonction de Bloch $\psi_{q+2\pi/a}$ associée à l'indice $q + 2\pi/a$. Supposons que les états propres $\psi_q^{(n)}(x)$ de l'hamiltonien \hat{H} soient non dégénérés pour une valeur de q fixée (c'est généralement le cas, au moins à une dimension). Les deux fonctions $\psi_{-\pi/a}^{(n)}(x)$ et $\psi_{\pi/a}^{(n)}(x)$ ne peuvent alors différer que par un facteur de phase

$$\psi_{\pi/a}^{(n)}(x) = e^{i\alpha_n} \psi_{-\pi/a}^{(n)}(x). \quad (\text{I.77})$$

et les énergies propres sont égales entre les deux bords de zone :

$$E_{\pi/a}^{(n)} = E_{-\pi/a}^{(n)}. \quad (\text{I.78})$$

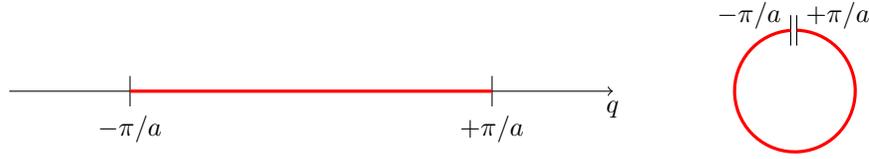


FIGURE I.6. Restriction du quasi-moment q à la première zone de Brillouin, puis représentation de cette zone de Brillouin comme un cercle fermé (ou un tore en dimension supérieure à 1).

Le problème de la recherche des états propres et des valeurs propres de l'hamiltonien est donc identique aux deux bords de la zone de Brillouin. Ceci signifie que la représentation que l'on doit se faire de cette zone est celle d'un cercle (ou d'un tore en dimension plus élevée) plutôt que d'un segment semi-ouvert (figure I.6).

Bandes d'énergie. Quand q varie dans l'intervalle $[-\pi/a, \pi/a]$, chaque énergie $E_q^{(n)}$ décrit un segment

$$E_{\min}^{(n)} \leq E_q^{(n)} \leq E_{\max}^{(n)}. \quad (\text{I.79})$$

Ce segment représente la *bande d'énergie* n , de largeur

$$\Delta E^{(n)} = E_{\max}^{(n)} - E_{\min}^{(n)}. \quad (\text{I.80})$$

Un exemple est donné sur la figure I.7 pour le potentiel sinusoidal $V(x) \propto \sin^2(\pi x/a)$. À une dimension, les bandes d'énergie que nous serons amenés à considérer seront généralement disjointes : le bas de la bande $n+1$ sera supérieur au haut de la bande n . Cette propriété ne se généralise pas aux cas 2D et 3D.

3-4 La phase de Zak

Nous avons vu en § 1 que la notion de phase géométrique apparaît pour un contour fermé dans l'espace des paramètres décrits sous le terme générique λ . Comme nous l'avons déjà signalé, on pourrait naïvement penser

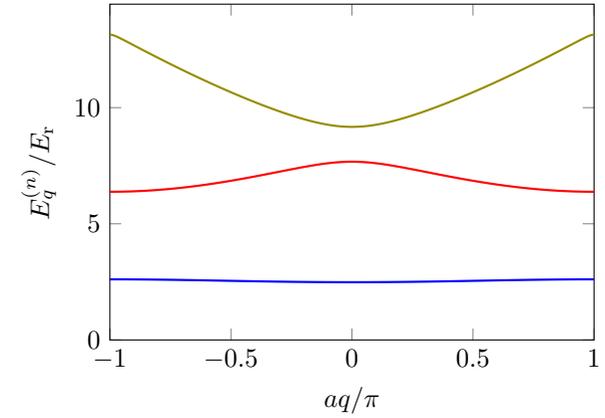


FIGURE I.7. Les trois premières bandes d'énergie ($n = 0, 1, 2$) pour le potentiel sinusoidal $V(x) = V_0 \sin^2(\pi x/a)$, tracées ici pour $V_0 = 8E_r$, avec l'énergie de recul E_r définie par $E_r = \pi^2 \hbar^2 / (2ma^2)$.

qu'en dimension 1 les contours fermés sont composés d'un ou plusieurs allers-retours à partir d'un point donné; la notion de phase de Berry perdrait alors tout intérêt puisque les deux parties (aller, puis retour) de l'intégrale de la connexion de Berry sur ce contour s'annulent.

Il y a néanmoins une exception à ce résultat, qui porte précisément sur le cas de la zone de Brillouin d'un potentiel périodique. Cette exception, formulée par ZAK (1989), tire parti de la structure circulaire de la zone de Brillouin. Si le paramètre q effectue le chemin

$$q_i \longrightarrow q_f = q_i + \frac{2\pi}{a}, \quad (\text{I.81})$$

les situations physiques décrites par les deux hamiltoniens \hat{H}_{q_i} et \hat{H}_{q_f} sont identiques⁴. On est donc en présence d'un chemin fermé, avec en particulier une même base d'états propres $\{|u_q^{(n)}\rangle\}$ (à une phase près) au début et à la fin du chemin. Bien que la situation soit unidimensionnelle, il n'y a alors

4. Les deux hamiltoniens \hat{H}_{q_i} et \hat{H}_{q_f} peuvent être différents ou identiques, selon la paramétrisation choisie pour la cellule unité.

pas de raison pour que la phase géométrique acquise par une particule⁵

$$\Phi_{\text{geom}}^{(n)} = i \int_{-\pi/a}^{+\pi/a} \langle u_q^{(n)} | \partial_q u_q^{(n)} \rangle dq \quad (\text{I.82})$$

soit nulle, puisque le paramètre q n'a pas effectué un aller-retour.

On comprend donc que les potentiels périodiques, même à une dimension, soient propices à l'apparition de ces phases géométriques. Dans ce qui suit, nous allons même pouvoir aller un cran plus loin et montrer que cette phase peut être *topologique* si le problème physique possède certaines symétries. Plus précisément, nous allons montrer dans le cadre du modèle SSH que cette phase géométrique, appelée *phase de Zak* dans ce contexte, est quantifiée en multiples de π et qu'elle n'est donc en général pas modifiée par une petite déformation du réseau, pourvu que cette déformation respecte la symétrie en question.

4 Le modèle SSH (Su–Schrieffer–Heeger)

Nous abordons maintenant le modèle 1D le plus simple possible qui présente ce type de topologie non triviale (SU, SCHRIEFFER et al. 1979). Il s'agit d'un modèle discrétisé, dans lequel une particule peut sauter d'un site donné vers les deux sites adjacents, à gauche ou à droite. Nous commencerons par le cas où tous les sites et tous les éléments de matrice tunnels sont équivalents, c'est-à-dire le modèle de Hubbard pour lequel aucune topologie n'est présente. Mais nous verrons qu'il suffit d'apporter une légère modification aux hypothèses de départ pour voir des propriétés topologiques apparaître.

Nous ne reprendrons pas ici la procédure permettant de justifier un hamiltonien discrétisé à partir de l'hamiltonien continu (I.58). Cette procédure est basée sur l'approximation *des liaisons fortes*, qui a été décrite en détail dans le cours 2012-13. Nous nous contenterons d'en présenter ici les hypothèses, d'ailleurs très intuitives.

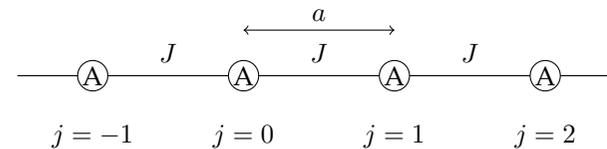


FIGURE I.8. Modèle de Hubbard 1D, dans lequel tous les sites sont équivalents, avec la même amplitude tunnel d'un site au site voisin.

4-1 Le modèle de Hubbard

Considérons la chaîne infinie représentée sur la figure I.8, composée de sites identiques espacés de a . Nous supposons qu'une particule est placée sur ce réseau et nous notons $|j\rangle$ l'état correspondant à la particule localisée sur le site j ($j \in \mathbb{Z}$). Tous les sites ont la même énergie, que nous prendrons nulle par convention. L'amplitude de saut tunnel d'un site à l'autre est notée $-J$, où le coefficient J est choisi positif. L'hamiltonien s'écrit donc

$$\hat{H} = -J \sum_j |j+1\rangle\langle j| + \text{h.c.} \quad (\text{I.83})$$

Le théorème de Bloch prend une forme remarquablement simple dans ce cas. Il n'y a (à un facteur multiplicatif près) qu'un seul état périodique sur le réseau :

$$|u\rangle = \sum_j |j\rangle \quad (\text{I.84})$$

et toutes les fonctions $|u_q\rangle$ sont donc égales entre elles. La forme d'un état de Bloch est

$$|\psi_q\rangle = \sum_j e^{ijqa} |j\rangle. \quad (\text{I.85})$$

On vérifiera que cet état est bien état propre de l'hamiltonien (I.83) avec l'énergie

$$E_q = -2J \cos(qa). \quad (\text{I.86})$$

Il s'agit donc d'un modèle à une bande (figure I.9). Comme $|u_q\rangle$ ne dépend pas de q , la courbure de Berry $\mathcal{A}_q = i \langle u_q | \partial_q u_q \rangle$ associée à cette bande est nulle.

5. Pour un problème 1D, on remplace le symbole gradient ∇_q par ∂_q .

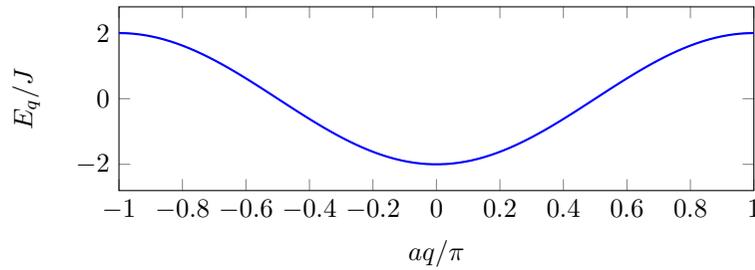
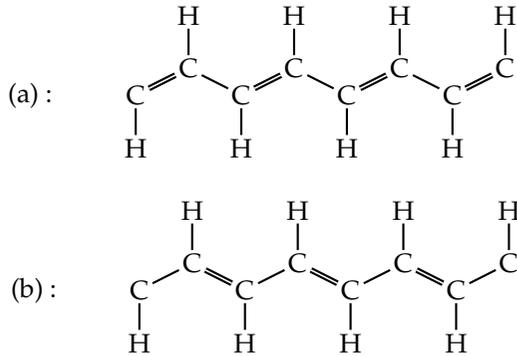

 FIGURE I.9. Bande d'énergie E_q pour le modèle de Hubbard.


FIGURE I.10. Molécule de polyacétylène, pouvant exister sous les deux forme dimérisées (a) et (b).

4-2 Le modèle SSH et son hamiltonien

Le modèle introduit par SU, SCHRIEFFER et al. (1979) avait pour but d'étudier la formation d'ondes solitoniques dans de longues chaînes de polymères, comme le polyacétylène représenté sur la figure I.10. Cette molécule présente une alternance de simples et doubles liaisons et peut se présenter sous les deux formes dimérisées (a) et (b). Le point central de l'article de SSH était l'étude de la jonction entre ces deux formes, représentée sur la figure I.11, avec la possibilité de voir apparaître des états localisés (solitons ou états de bord) à cette jonction. Nous verrons au cours prochain comment on peut implémenter ce modèle de manière précise avec des sys-

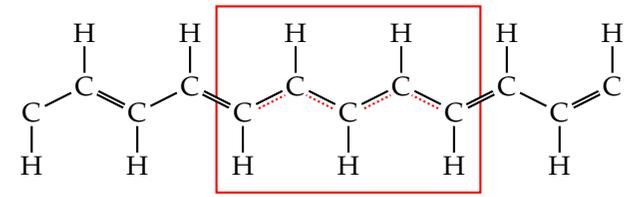


FIGURE I.11. Jonction entre les deux phases (a) et (b) de la figure I.10.

tèmes atomiques ou photoniques.

La modélisation la plus simple de cette chaîne est fondée sur un modèle de liaisons fortes directement inspiré du modèle de Hubbard, la seule modification étant que l'on peut avoir deux valeurs J et J' pour le coefficient tunnel correspondant aux simples et aux doubles liaisons. Nous considérons donc la chaîne représentée sur la figure I.12, avec deux types de sites notés A et B . Pour ce choix de dimérisation, les sites A sont reliés à leur voisin de gauche par le coefficient tunnel J et à leur voisin de droite par le coefficient J' (et inversement pour les sites B). La cellule unité de ce réseau 1D comporte donc un couple AB , et la distance entre deux cellules adjacentes est comme précédemment notée a .

Les fonctions périodiques sur le réseau ont par définition la même amplitude α (resp. β) sur tous les sites A (resp. B) du réseau et s'écrivent

$$|u_q\rangle = \alpha_q \left(\sum_j |A_j\rangle \right) + \beta_q \left(\sum_j |B_j\rangle \right), \quad (\text{I.87})$$

où l'on choisira par convention

$$|\alpha_q|^2 + |\beta_q|^2 = 1. \quad (\text{I.88})$$

Dans ce modèle de cellule à deux sites, une fonction $|u_q\rangle$ peut donc être vue formellement comme l'état d'un spin $1/2$:

$$|u_q\rangle \equiv \begin{pmatrix} \alpha_q \\ \beta_q \end{pmatrix}. \quad (\text{I.89})$$

Les fonctions de Bloch associées sont

$$|\psi_q\rangle = \sum_j e^{ijqa} (\alpha_q |A_j\rangle + \beta_q |B_j\rangle). \quad (\text{I.90})$$

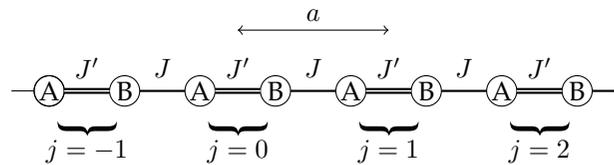


FIGURE I.12. Représentation simplifiée du modèle SSH.

La fonction de Bloch $|\psi_q\rangle$ est par définition état propre avec l'énergie E_q de l'hamiltonien de la chaîne

$$\hat{H} = -J' \sum_j |B_j\rangle \langle A_j| - J \sum_j |B_{j-1}\rangle \langle A_j| + \text{h.c.} \quad (\text{I.91})$$

Ceci permet d'établir la contrainte sur les coefficients α_q et β_q sous forme matricielle :

$$\hat{H}_q \begin{pmatrix} \alpha_q \\ \beta_q \end{pmatrix} = E_q \begin{pmatrix} \alpha_q \\ \beta_q \end{pmatrix} \quad (\text{I.92})$$

où l'hamiltonien périodique \hat{H}_q est la matrice 2×2 :

$$\hat{H}_q = - \begin{pmatrix} 0 & J' + J e^{-iqa} \\ J' + J e^{iqa} & 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{I.93})$$

Cet hamiltonien est bien de la forme générale proposée pour un spin 1/2 avec $E_0 = 0$ et

$$h(q) \equiv h_x(q) + ih_y(q) = J' + J e^{iqa}. \quad (\text{I.94})$$

Le vecteur h vaut

$$h(q) = \begin{pmatrix} J' + J \cos(qa) \\ J \sin(qa) \\ 0 \end{pmatrix} \quad (\text{I.95})$$

est confiné ici au plan xy et peut être représenté par le nombre complexe $h(q)$. Les états propres de l'hamiltonien \hat{H}_q du modèle SSH sont donc toujours localisés sur l'équateur de la sphère de Bloch.

Nous obtenons pour chaque valeur de q les deux énergies propres :

$$E_q^{(\pm)} = \pm |J' + J e^{iqa}| = \pm [J^2 + J'^2 + 2JJ' \cos(qa)]^{1/2}, \quad (\text{I.96})$$

qui donnent naissance à deux bandes d'énergie quand q décrit la zone de Brillouin $[-\pi/a, +\pi/a[$:

$$\begin{aligned} \mathcal{B}^{(+)} &: |J - J'| \leq E \leq J + J' \\ \mathcal{B}^{(-)} &: -(J + J') \leq E \leq -|J + J'|. \end{aligned} \quad (\text{I.97})$$

Ces bandes d'énergie, représentées en figure I.13, sont disjointes sauf si $J = J'$, auquel cas on retrouve le modèle de Hubbard du paragraphe précédent⁶. Les niveaux d'énergie pour les deux cas $J' > J$ et $J' < J$ ont des tracés similaires et rien ne permet à ce stade d'assigner une topologie différente à ces deux situations. Mais toute la physique n'est pas contenue dans la position des niveaux d'énergie : la variation avec q des états propres contient une information supplémentaire, que nous allons maintenant examiner.

Remarque : formes des fonctions de Bloch. Nous avons choisi en (I.90) une forme des fonctions de Bloch qui garantit que l'hamiltonien \hat{H}_q est périodique :

$$\hat{H}_q = \hat{H}_{q+2\pi/a}. \quad (\text{I.98})$$

Ce choix permet de simplifier l'analyse, même s'il subsiste un arbitraire dans la définition de la cellule unité que nous examinerons en §4.4. Nous aurions également pu "encoder" la position relative du site B par rapport au site A de la même cellule. Si on note b la distance AB , ce choix conduit à prendre des fonctions de Bloch du type :

$$|\psi_q\rangle = \sum_j \left(e^{ijaq} \alpha'_q |A_j\rangle + e^{i(ja+b)q} \beta'_q |B_j\rangle \right). \quad (\text{I.99})$$

et mène à

$$\hat{H}'_q = - \begin{pmatrix} 0 & J' e^{iqb} + J e^{-iq(a-b)} \\ J' e^{-iqb} + J e^{iq(a-b)} & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{I.100})$$

qui n'est généralement plus une fonction périodique de q . Les énergies ne sont évidemment pas affectées par ce changement de définition des états de Bloch, mais les vecteurs propres le sont. En pratique, cet encodage

6. Noter que la zone de Brillouin est alors deux fois plus petite du fait du doublement de la période du réseau.

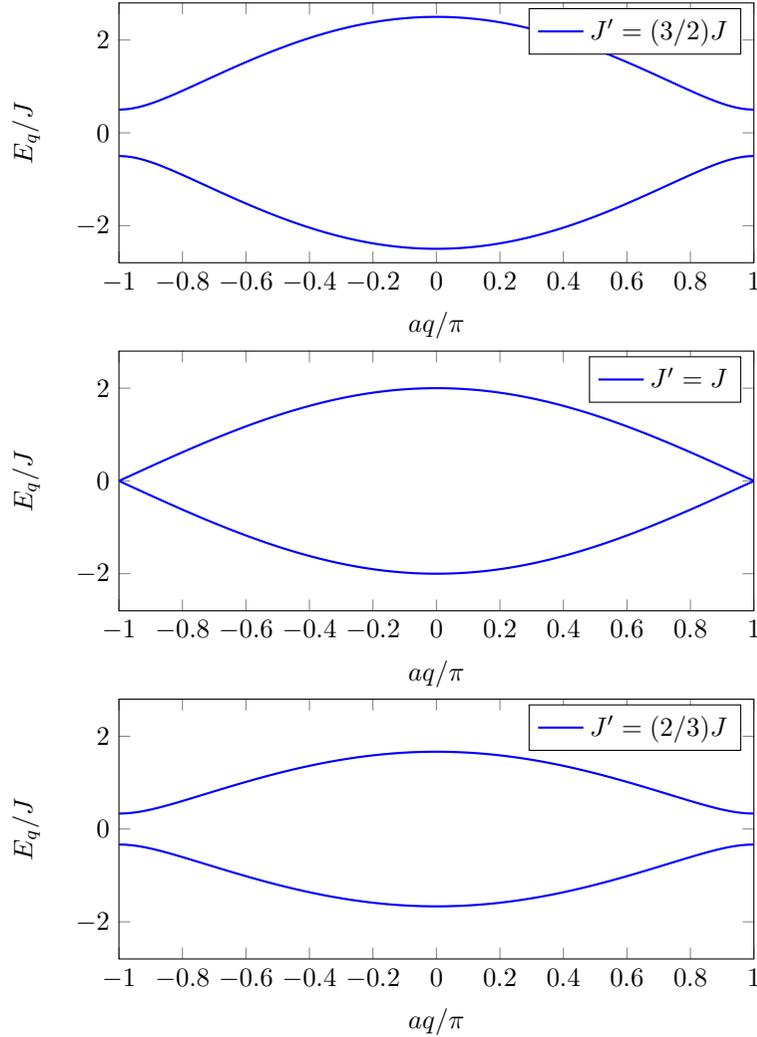


FIGURE I.13. Bandes d'énergies (1.96) du modèle SSH pour $J' = (3/2)J$ (haut), $J' = J$ (milieu) et $J' = (2/3)J$ (bas).

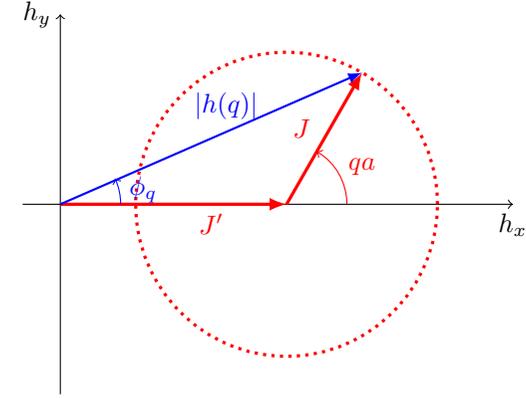


FIGURE I.14. Tracé dans le plan complexe de $h(q) \equiv J' + J e^{iqa} = |h(q)| e^{i\phi_q}$ pour le cas $J' > J$. Le contour décrit par $h(q)$ n'entoure pas l'origine et la phase ϕ_q commence et termine à la même valeur $\phi_q = 0$ quand q décrit la zone de Brillouin $[-\pi/a, \pi/a[$.

conduit à des expressions plus compliquées du point de vue de l'étude de la topologie des bandes et nous ne l'utiliserons pas. Il peut néanmoins être pertinent quand une force uniforme est appliquée aux particules en plus du potentiel périodique. Cette force dérive en effet du potentiel $-Fx$, et il est alors commode d'encoder la position exacte de chaque site, $x = ja$ ou $x = ja + b$, dans l'expression des fonctions de Bloch.

4-3 États propres et topologie

Les états propres de la matrice \hat{H}_q associés à $E_q^{(\pm)}$ sont

$$|u_q^{(\pm)}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \mp e^{i\phi_q} \end{pmatrix} \quad (\text{I.101})$$

où nous avons introduit l'argument complexe ϕ_q du coefficient non-diagonal intervenant dans \hat{H}_q (figure I.14) :

$$h(q) \equiv J' + J e^{iqa} = |h(q)| e^{i\phi_q}. \quad (\text{I.102})$$

Cet argument complexe est bien défini pour toute valeur de q tant que $|h(q)|$ ne s'annule pas sur la zone de Brillouin, c'est-à-dire tant que $J \neq J'$.

Il est alors simple de calculer la connexion de Berry

$$\mathcal{A}_q^{(\pm)} = i \langle u_q^{(\pm)} | \partial_q u_q^{(\pm)} \rangle = -\frac{1}{2} \frac{d\phi_q}{dq} \quad (\text{I.103})$$

et la phase de Zak obtenue en intégrant cette connexion de Berry sur la zone de Brillouin :

$$\Phi_{\text{Zak}} = \int_{-\pi/a}^{+\pi/a} \mathcal{A}_q^{(\pm)} dq = -\frac{1}{2} \int_{-\pi/a}^{+\pi/a} \frac{d\phi_q}{dq} dq. \quad (\text{I.104})$$

Ce résultat a une interprétation géométrique claire : la phase de Zak, ou plus précisément la quantité

$$N \equiv -\frac{1}{\pi} \Phi_{\text{Zak}} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi/a}^{+\pi/a} \frac{d\phi_q}{dq} dq = \frac{1}{2\pi} [\phi_{+\pi/a} - \phi_{-\pi/a}] \quad (\text{I.105})$$

mesure le nombre d'enroulements que le nombre complexe $h(q)$ fait autour de 0 quand q parcourt la zone de Brillouin.

Les figures I.14 et I.15 montrent les trajectoires possibles dans le plan complexe de $h(q) = J' + Je^{iqa}$ quand le quasi-moment q varie depuis $-\pi/a$ jusqu'à π/a . Cette trajectoire est un cercle centré en $(J', 0)$ et de rayon J . Deux cas sont donc possibles pour la variation de ϕ_q quand q parcourt la zone de Brillouin :

- Si $J' > J$ (figure I.14), le cercle est entièrement situé dans la zone du plan de partie réelle positive. Ce cercle n'entoure donc pas l'origine : $N = 0$ et $\Phi_{\text{Zak}} = 0$ pour chacune des deux sous-bandes (figure I.16). On dira dans ce cas que les bandes sont *topologiquement triviales*.
- Si $J' < J$ (figure I.15), le cercle est parcouru dans le sens direct (trigonométrique) et entoure une fois l'origine. On a alors : $N = 1$ et $\Phi_{\text{Zak}} = -\pi$ pour chacune des deux sous-bandes (figure I.16). On dira dans ce cas que les deux bandes sont *topologiquement non triviales*.

Le nombre N est un invariant topologique, au sens où il ne change pas quand on modifie légèrement les paramètres du réseau SSH (période a , coefficients tunnel J et J') du moment que l'on ne franchit pas la frontière $J = J'$.

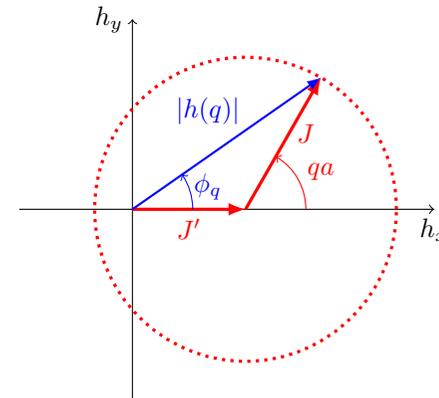


FIGURE I.15. Tracé dans le plan complexe de $h(q) \equiv J' + Je^{iqa} = |h(q)| e^{i\phi_q}$ pour le cas $J' < J$. Le contour décrit par $h(q)$ entoure l'origine et la phase ϕ_q varie continuellement de $\phi_q = -\pi$ à $\phi_q = \pi$ quand q décrit la zone de Brillouin $[-\pi/a, \pi/a]$.

Du point de vue du pseudo-spin associé à $|u_q\rangle$, la phase de Zak est reliée à l'angle solide dessiné par ce spin le long de l'équateur de la sphère de Bloch quand q parcourt la zone de Brillouin (figure I.17). Dans le cas topologiquement trivial, ce pseudo-spin effectue un aller-retour sur l'équateur. Dans l'autre cas, il effectue un tour complet de la sphère de Bloch.

4-4 Quelle réalité physique pour cette topologie ?

La distinction que nous venons de faire entre les deux régimes $J' > J$ et $J' < J$ semble convaincante, mais elle mérite malgré tout une analyse un peu plus approfondie. En effet, la manière dont les sites A_j et B_j ont été assignés à une cellule unité donnée est arbitraire. Au lieu du choix représenté sur la figure I.12 et repris sur la figure I.18a, on aurait tout aussi bien pu choisir la paramétrisation de la figure I.18b. Dans cette paramétrisation, la cellule j est composée du site A_j et du site B_{j-1} . La forme des fonctions de Bloch avec cette nouvelle paramétrisation est

$$|\psi_q\rangle = \sum_j e^{ijqa} \left(\tilde{\alpha}_q |A_j\rangle + \tilde{\beta}_q |B_{j-1}\rangle \right) \quad (\text{I.106})$$

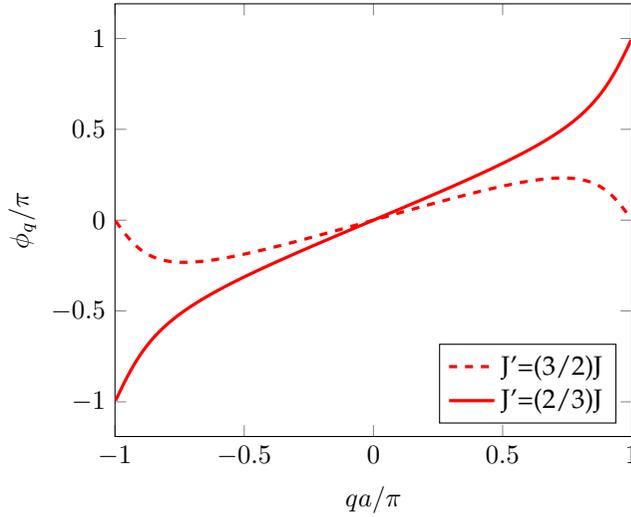


FIGURE I.16. Variation de la phase ϕ_q quand q parcourt la zone de Brillouin $[-\pi/a, \pi/a]$, pour les deux cas $J' > J$ (pas d'enroulement) et $J' < J$ (nombre d'enroulement $N = 1$).

avec des coefficients $(\tilde{\alpha}_q, \tilde{\beta}_q)$ qui sont reliés aux coefficients précédents (α_q, β_q) par

$$\tilde{\alpha}_q = \alpha_q, \quad \tilde{\beta}_q = e^{-iqa} \beta_q. \quad (\text{I.107})$$

Cette transformation n'est pas une transformation de jauge comme celle envisagée en (IV.75) car elle ne correspond pas à une multiplication globale de la fonction $|u_q\rangle$ par un coefficient e^{ix_q} . Il n'est donc pas évident de prévoir ses conséquences sur la phase de Zak.

Reprenons la démarche suivie pour la première paramétrisation. En écrivant que ψ_q est état propre de \hat{H} (qui est inchangé), on trouve que les coefficients $(\tilde{\alpha}_q, \tilde{\beta}_q)$ sont solutions de :

$$\hat{H}_q \begin{pmatrix} \tilde{\alpha}_q \\ \tilde{\beta}_q \end{pmatrix} = E_q \begin{pmatrix} \tilde{\alpha}_q \\ \tilde{\beta}_q \end{pmatrix} \quad \text{avec} \quad \hat{H}_q = - \begin{pmatrix} 0 & J + J' e^{iqa} \\ J + J' e^{-iqa} & 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{I.108})$$

Ce nouvel hamiltonien est lui aussi périodique en q , mais les rôles de J et J' y sont inversés (comme on pouvait s'y attendre) et q est changé en $-q$.

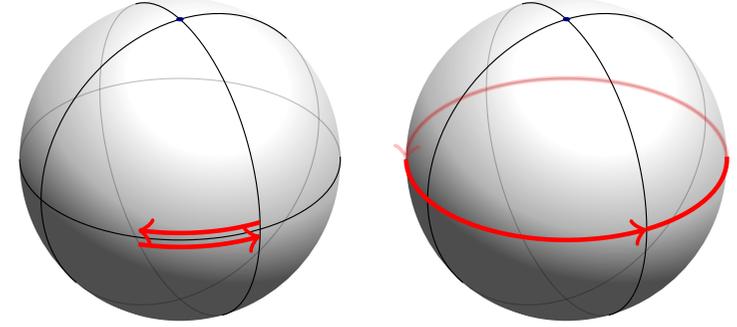


FIGURE I.17. Trajectoires sur la sphère de Bloch de l'état $|u_q^{(-)}\rangle$ quand q parcourt l'ensemble de la zone de Brillouin. Gauche : cas topologiquement trivial, $N = 0$; Droit : cas topologiquement non trivial, $N = 1$.

Ce changement de paramétrisation ne change bien sûr pas la forme des bandes d'énergie. En revanche, elle affecte la forme des états propres et la phase de Zak. On trouve maintenant que :

- Pour $J' < J$, $\tilde{\Phi}_{\text{Zak}} = 0$, c'est-à-dire qu'il n'y a pas d'enroulement du nombre complexe $J + J' e^{-iqa}$ autour de l'origine.
- Pour $J' > J$, $\tilde{\Phi}_{\text{Zak}} = +\pi$, c'est-à-dire qu'il y a un enroulement dans le sens négatif du nombre complexe $J + J' e^{-iqa}$ autour de l'origine.

La leçon à retenir est que la notion "absolue" de phase topologiquement triviale ou non-triviale n'a pas de sens pour cette chaîne infinie unidimensionnelle. La seule conclusion physiquement pertinente est que les deux phases obtenues en basculant entre les situations $J' > J$ et $J' < J$ sont différentes :

$$\Phi_{\text{Zak}}^{[J'>J]} - \Phi_{\text{Zak}}^{[J'<J]} = \pi. \quad (\text{I.109})$$

Pour révéler cette différence, nous verrons au prochain chapitre que l'on peut échanger physiquement au cours d'une séquence expérimentale les valeurs de J et J' , comme cela a été fait par ATALA, AIDELSBURGER et al. (2013). On peut également s'intéresser à une chaîne de taille finie, avec un nombre donné de cellules, par exemple trois cellules sur la figure I.19. Il n'est alors pas équivalent d'avoir un grand ou un petit élément de matrice

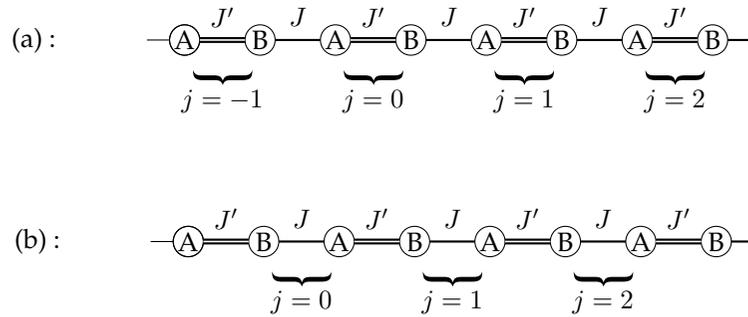


FIGURE I.18. Deux paramétrisations possibles pour le modèle SSH.

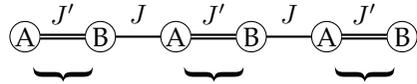


FIGURE I.19. Chaîne SSH finie, avec trois cellules unités. Les deux configurations $J' > J$ et $J' < J$ se comportent différemment vis à vis de l'existence d'états de bord.

tunnel aux extrémités de la chaîne. On peut enfin connecter les deux phases [$J' > J$] et [$J' < J$], comme indiqué sur la figure I.11, et étudier les états localisés susceptibles d'apparaître au voisinage du point de jonction. Nous verrons au chapitre suivant comment ces états de bord émergent pour le modèle SSH pour une chaîne finie ou semi-infinie, ainsi que leurs applications possibles en photonique.

Remarque : retour sur l'encodage de la position. Nous avons donné en (I.100) l'expression de l'hamiltonien \hat{H}'_q quand on encode la distance b entre les sites A et B dans l'expression des fonctions de Bloch. On pourra remarquer que cet hamiltonien \hat{H}'_q permet de passer continument de \hat{H}_q à \hat{H}_q en variant b de 0 à a . Si on reprend le formalisme précédent avec cet hamiltonien, on trouve que la phase ϕ_q est remplacée par $\phi_q - qb$, de sorte que Φ_{Zak} devient $\Phi_{\text{Zak}} + \pi b/a$. La phase de Zak n'est alors plus un multiple de π . En effet l'hamiltonien \hat{H}'_q n'est pas périodique en q et le nombre $h'(q)$ qui

lui est associé ne décrit pas une trajectoire fermée dans le plan complexe quand q parcourt la zone de Brillouin. Toutefois, la relation (I.109) donnant une différence de phase égale à π entre les deux situations $J' < J$ et $J' > J$ reste valable.

Chapitre II

Topologie à une dimension : du modèle SSH aux modes de Majorana

Après la mise en place au cours précédent du formalisme nécessaire pour aborder l'étude de phases topologiques de la matière, nous passons maintenant à la recherche de manifestations concrètes de cette topologie. Le point central que nous voulons établir porte sur l'existence d'états de bord robustes apparaissant à l'interface entre deux phases de topologies différentes.

Nous allons dans un premier temps nous concentrer sur le modèle SSH introduit par SU, SCHRIEFFER et al. (1979) pour décrire une chaîne moléculaire de polyacétylène. Nous allons approfondir la caractérisation de la topologie d'une bande que nous avons déjà esquissée dans le chapitre 1 en terme d'enroulement autour de la sphère de Bloch. Nous montrerons sur ce modèle l'existence possible d'états de bord robustes, pour un segment fini de la chaîne ou dans une géométrie semi-infinie.

Nous aborderons ensuite la description d'une expérience récente menée avec de la lumière qui a mis en évidence ces caractéristiques topologiques, et tiré parti des états de bords pour réaliser un *laser topologique* (ST-JEAN, GOBLOT et al. 2017).

Dans la dernière partie, nous allons comparer cette chaîne SSH avec un autre système modèle remarquable, introduit par KITAEV (2001) pour décrire un supraconducteur topologique à une dimension. Nous verrons que les états de bord ont alors des propriétés très particulières, décrites par

des modes de quasi-particules pour lesquelles opérateurs de création et de destruction coïncident. Ces modes sont baptisés *modes de Majorana*, par analogie avec le formalisme présenté par MAJORANA (1937) pour analyser l'équation de Dirac.

L'étude de ces deux modèles va nous donner l'occasion d'aborder l'importance des symétries dans la stabilité des phases topologiques (voir aussi l'appendice 2 de ce chapitre). Il s'agira de la symétrie de sous-réseau pour le modèle SSH, et de la symétrie particule-trou pour le modèle de Kitaev. Tant que le système possède cette symétrie, les phases topologiques que nous allons trouver seront robustes : elles ne pourront se transformer en une phase normale qu'en fermant un gap entre deux bandes d'énergie, ce qui impose une modification importante des paramètres de l'hamiltonien. En revanche, comme nous le verrons au cours 3, la robustesse topologique peut disparaître sans avoir à fermer de gap si on perd cette symétrie.

1 Etats de bord dans le modèle SSH

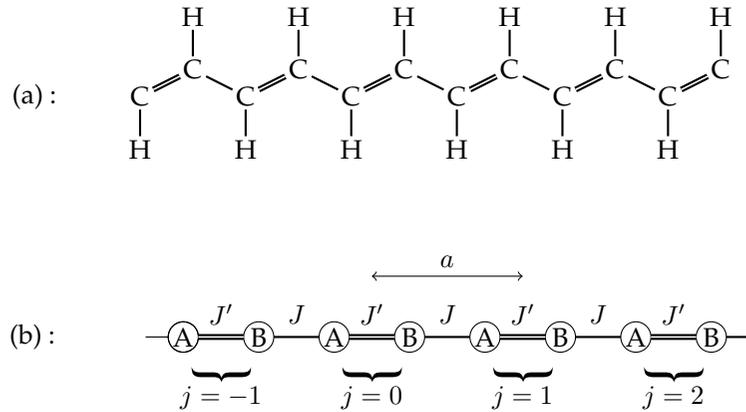


FIGURE II.1. (a) Molécule de polyacétylène. (b) Modélisation dans le cadre d'un modèle de liaisons fortes.

1-1 Retour sur l'hamiltonien SSH

Comme nous l'avons vu au chapitre 1, le modèle SSH vise à décrire une longue chaîne de polymère comme le polyacétylène (figure II.1 a). Cette chaîne est unidimensionnelle et comporte deux types de liaisons, simple ou double, entre atomes de carbone adjacents. On la modélise en décrivant le mouvement d'un électron sur cette chaîne par un traitement à la Hubbard, avec une ligne de sites A et B alternés, la particule pouvant sauter d'un site aux deux sites voisins avec des coefficients tunnel J et J' (figure II.1 b).

Un point essentiel du modèle SSH est de supposer que les deux sites A et B ont la même énergie, que l'on prend nulle par convention. L'hamiltonien d'un électron sur la chaîne s'écrit donc :

$$\hat{H} = -J' \sum_j |B_j\rangle \langle A_j| - J \sum_j |B_{j-1}\rangle \langle A_j| + \text{h.c.} \quad (\text{II.1})$$

La chaîne infinie constitue un système spatialement périodique que l'on peut traiter avec le formalisme des ondes de Bloch. On cherche les états propres de l'hamiltonien sous la forme

$$|\psi_q\rangle = \sum_j e^{ijqa} (\alpha_q |A_j\rangle + \beta_q |B_j\rangle). \quad (\text{II.2})$$

où q est le quasi-moment de Bloch, dont la valeur est restreinte à la zone de Brillouin $-\pi/a \leq q < \pi/a$ avec identification des deux extrémités $q = \pm\pi/a$. Les coefficients α_q et β_q sont déterminés en écrivant que $|\psi_q\rangle$ est état propre de l'hamiltonien de la chaîne, ce qui donne :

$$\hat{H}_q \begin{pmatrix} \alpha_q \\ \beta_q \end{pmatrix} = E_q \begin{pmatrix} \alpha_q \\ \beta_q \end{pmatrix} \quad (\text{II.3})$$

où l'hamiltonien périodique \hat{H}_q est la matrice 2×2 :

$$\hat{H}_q = - \begin{pmatrix} 0 & J' + J e^{-iqa} \\ J' + J e^{iqa} & 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{II.4})$$

Ses valeurs propres sont

$$E_q^{(\pm)} = \pm [J^2 + J'^2 + 2JJ' \cos(qa)]^{1/2}, \quad (\text{II.5})$$

ce qui conduit aux deux bandes d'énergie :

$$\begin{aligned} \mathcal{B}^{(+)} &: & |J - J'| \leq E \leq J + J' \\ \mathcal{B}^{(-)} &: & -(J + J') \leq E \leq -|J - J'|. \end{aligned} \quad (\text{II.6})$$

Un exemple de la variation de $E_q^{(\pm)}$ en fonction de q est tracé en figure II.2 pour $J' = (3/2)J$. Ces deux bandes sont disjointes sauf si $J = J'$ (cf. figure II.3).

Rappelons la notation compacte introduite au chapitre 1 pour un hamiltonien représenté par une matrice 2×2 . En utilisant les trois matrices de Pauli

$$\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (\text{II.7})$$

nous pouvons écrire toute matrice hermitienne sous la forme

$$\hat{H}_q = E_0(q) \hat{1} - \mathbf{h}(q) \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}}, \quad (\text{II.8})$$

où les fonctions $h_\alpha(q)$, $\alpha = x, y, z$ sont réelles. Dans le cas du modèle SSH, on a pris la référence d'énergie $E_0 = 0$ et

$$h_x(q) + ih_y(q) = J' + J e^{iqa}, \quad h_z = 0. \quad (\text{II.9})$$

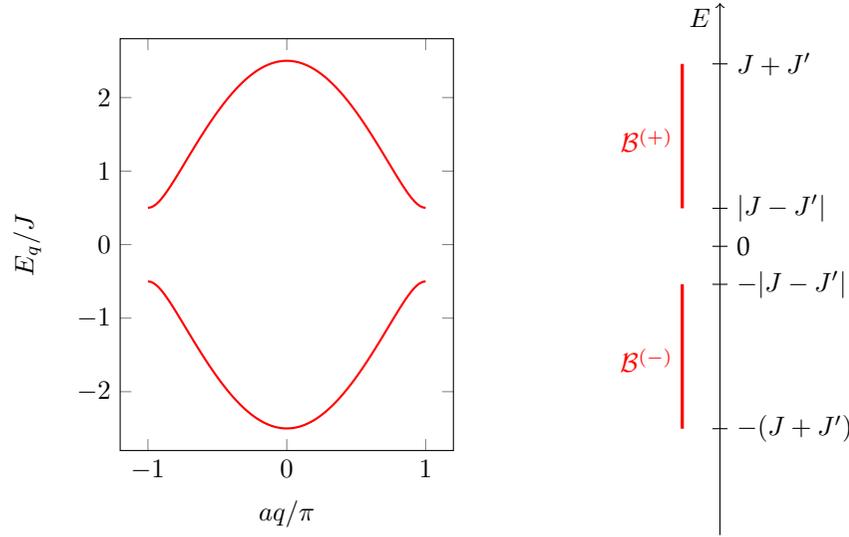


FIGURE II.2. Bandes d'énergie pour une chaîne infinie du modèle SSH dans le cas $J' = (3/2)J$.

La forme (II.8) obtenue pour \hat{H}_q pour chaque valeur de q peut être vue comme l'hamiltonien d'une particule de spin 1/2 dans un champ magnétique $\mathbf{h}(q)$. Les deux états propres s'écrivent

$$|u_q^{(-)}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ e^{i\phi_q} \end{pmatrix}, \quad |u_q^{(+)}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -e^{i\phi_q} \end{pmatrix} \quad (\text{II.10})$$

où l'on a introduit le nombre de module 1

$$e^{i\phi_q} = \frac{J' + J e^{iqa}}{|J' + J e^{iqa}|}, \quad (\text{II.11})$$

définition qui est valable tant que le dénominateur ne s'annule pas, donc tant que $J' \neq J$.

Dans ce qui va suivre, nous utiliserons la représentation de l'état quantique $|u\rangle$ d'un système à deux niveaux sur la sphère de Bloch, également introduite au chapitre 1. Cette représentation tire parti du fait que cet état

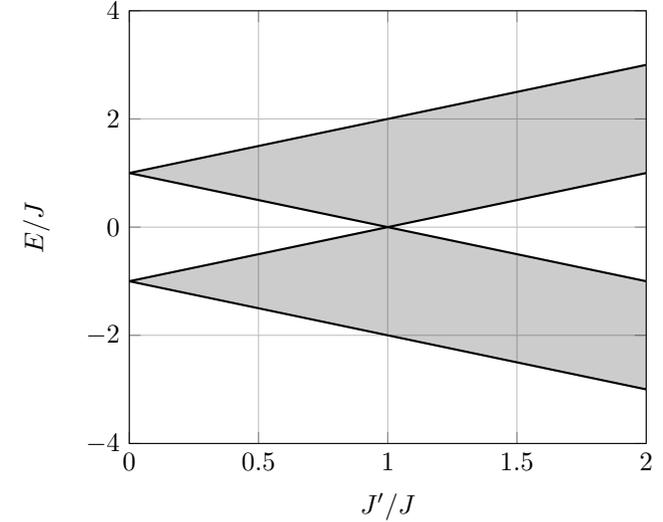


FIGURE II.3. Bandes d'énergie pour une chaîne infinie du modèle SSH en fonction du rapport J'/J . On obtient deux bandes disjointes sauf pour $J' = J$.

peut s'écrire de manière unique (à une phase globale près) :

$$|u\rangle = \begin{pmatrix} \cos(\theta/2) \\ e^{i\phi} \sin(\theta/2) \end{pmatrix} \quad (\text{II.12})$$

où $\theta \in [0, \pi]$ et $\phi \in [-\pi, \pi]$. La représentation sur la sphère de Bloch consiste alors à voir cet état comme le point d'angle polaire θ et d'angle azimutal ϕ . Dans cette représentation, les deux états propres $|u_q^{(\pm)}\rangle$ du modèle SSH sont situés sur l'équateur de la sphère de Bloch, d'azimut ϕ_q pour $|u_q^{(-)}\rangle$ et $\phi_q \pm \pi$ pour $|u_q^{(+)}\rangle$.

Rappelons enfin que la topologie des deux bandes d'énergie du modèle SSH est directement liée au nombre d'enroulement de la phase ϕ_q du nombre complexe $J' + J e^{iqa}$:

$$\mathcal{N} \equiv \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi/a}^{+\pi/a} \frac{d\phi_q}{dq} dq. \quad (\text{II.13})$$

Comme ϕ_q n'est autre que l'angle azimutal de $|u_q^{(-)}\rangle$, ce nombre d'enroule-

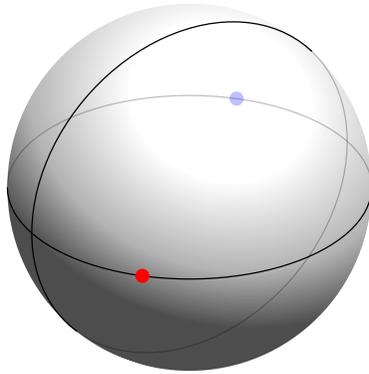


FIGURE II.4. Représentation des deux états propres $|u_q^{(\pm)}\rangle$ sur la sphère de Bloch de rayon 1. Pour le modèle SSH, ces deux états propres sont toujours localisés sur l'équateur.

ment s'interprète géométriquement à partir de la trajectoire de cet état (ou de son partenaire $|u_q^{(+)}\rangle$) quand q décrit la zone de Brillouin $[-\pi/a, \pi/a[$:

- Si \mathbf{h} effectue un aller-retour le long de l'équateur, $\phi_q = 0$ pour $qa = \pm\pi$ et $\mathcal{N} = 0$. Cela correspond au cas $J' > J$ (figure II.5a). Nous qualifierons cette configuration de *normale* ou *non topologique*.
- Si \mathbf{h} effectue un tour complet le long de l'équateur, $\phi_q = \pm\pi$ pour $qa = \pm\pi$ et $\mathcal{N} = 1$. Cela correspond au cas $J' < J$ (figure II.5b). Nous qualifierons cette configuration de *topologique*.

Puisque les états $|u_q^{(\pm)}\rangle$ sont contraints de rester sur l'équateur, on ne peut pas déformer continuellement un type de trajectoire en l'autre ; c'est l'origine de la protection topologique du nombre d'enroulement (ou de la phase de Zak $\Phi_{\text{Zak}}^{(-)} = -\pi\mathcal{N}$).

1-2 Le cas d'une chaîne finie

Commençons notre analyse des états de bord en considérant une chaîne finie, comportant un nombre donné de paires AB (figure II.6). Puisque le système n'est plus invariant par translation, le théorème de Bloch ne s'applique plus et il n'est pas possible de procéder à un traitement analytique.

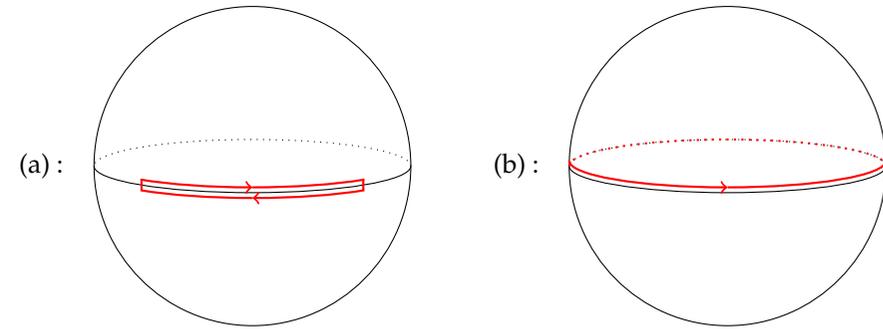


FIGURE II.5. Trajectoire suivie par $|u_q^{(-)}\rangle$ dans le modèle SSH quand le quasi-moment q parcourt la zone de Brillouin $[-\pi/a, \pi/a]$. Les cas (a) et (b) correspondent respectivement à $J' > J$ (non topologique) et $J' < J$ (topologique).

Nous donnons en figure II.7 le résultat d'une diagonalisation numérique de l'hamiltonien pour une chaîne de 10 paires.

Plusieurs points remarquables apparaissent sur cette figure :

- La majeure partie des énergies trouvées par diagonalisation se trouvent à l'intérieur des bandes permises trouvées analytiquement pour une chaîne infinie, et ces énergies remplissent la zone ainsi délimitée : dans la limite où la longueur de la chaîne devient très grande, on va retrouver toutes les énergies E_q obtenues plus haut.
- Le spectre en énergie est symétrique par rapport à l'énergie nulle.
- Pour $J' \lesssim J$, c'est-à-dire dans la région "topologique", on trouve deux états d'énergie quasi-nulle, à l'extérieur de la zone grisée correspondant aux bandes d'énergie permises.

Ces états situés à l'intérieur du gap interdit sont les états de bord que nous souhaitons discuter. Nous avons représenté sur la figure II.8 les amplitudes de probabilité (a_j, b_j) pour ces deux états dans le cas particulier $J' = J/2$. On trouve que ces deux états sont effectivement localisés aux extrémités de la chaîne, avec une probabilité supérieure à 3/4 de trouver la particule sur l'un des sites extrêmes, A_1 ou B_{10} . La chaîne étant symétrique, les distributions de probabilité associées à ces deux états sont elles aussi symétriques. Toutefois, cette symétrie spatiale est facilement brisée. Il suffit de modifier l'énergie sur site d'une des extrémités (A_1 par exemple)

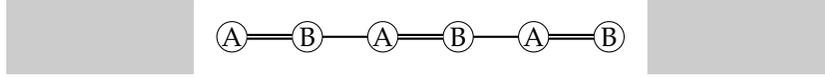


FIGURE II.6. Chaîne SSH de taille finie (avec ici 6 sites, donc 3 paires AB).

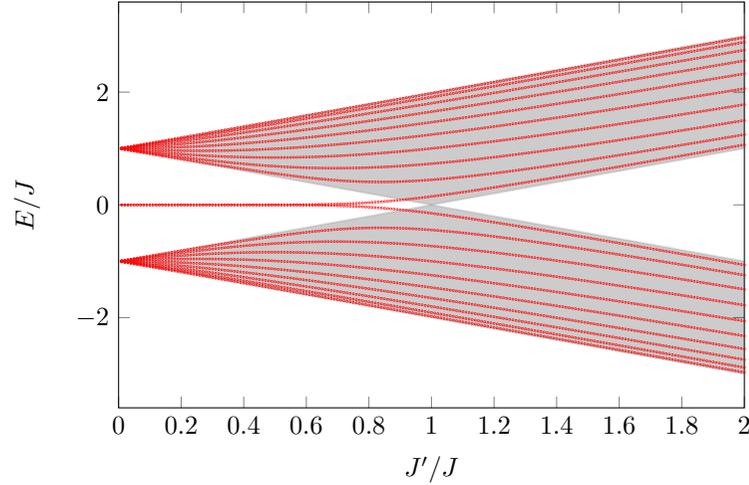


FIGURE II.7. Énergies propres d'une chaîne SSH à 20 sites, donc 10 paires AB. Pour $J' < J$, deux états de bords d'énergie quasi-nulle sont présents. Ces états disparaissent graduellement quand on passe dans la région $J' > J$. La zone grisée correspond aux bandes d'énergies de la chaîne infinie, déjà tracées en figure II.3.

d'une faible quantité pour qu'un des états de bord se localise presque entièrement sur A_1 et l'autre sur B_{10} . Pour illustrer ce point, on a représenté sur la figure II.9 le résultat obtenu quand l'énergie du site A_1 passe de 0 à $-J/100$. Cette sensibilité est à contraster avec celle des modes de Majorana que nous rencontrerons un peu plus loin.

DELPLACE, ULLMO et al. (2011) ont proposé une méthode simple et efficace pour établir de manière quantitative la correspondance *cœur-bord* (*bulk-edge*) pour la chaîne SSH, c'est-à-dire le lien direct entre l'enroulement de la phase ϕ_q et l'existence d'états d'énergie en dehors du gap pour une chaîne finie. L'idée est de compter le nombre d'états que l'on peut former à partir des fonctions de Bloch de cœur, et voir si on en obtient $2N$,

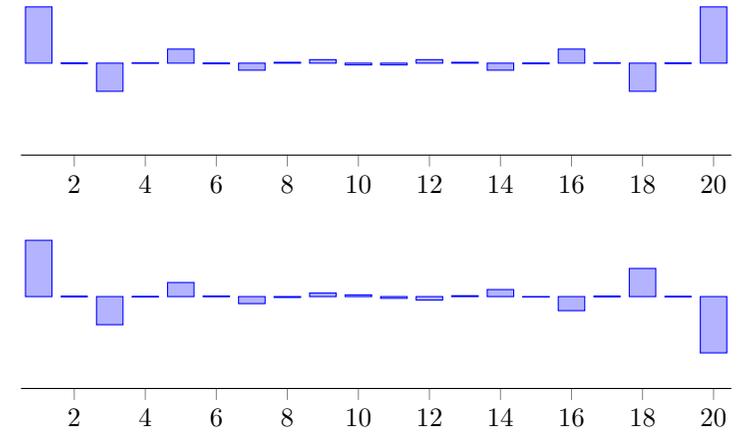


FIGURE II.8. Chaîne SSH finie à 20 sites, donc 10 cellules unité, pour $J' = J/2$. On a représenté les amplitudes de probabilité $a_1, b_1, a_2, b_2, \dots$ pour les deux états situés à l'intérieur du gap. Les distributions de probabilité pour ces deux états sont symétriques, du fait de la symétrie de la chaîne elle-même.

comme attendu d'après la taille de l'espace de Hilbert. Si ce n'est pas le cas, cela signifie que des états supplémentaires sont nécessaires pour obtenir une base : ce sont précisément les états de bord que nous avons trouvés numériquement.

Les états que nous pouvons former à partir des états de cœur sont des ondes stationnaires, obtenues en superposant deux ondes de Bloch de moment q et $-q$ avec des poids égaux et un facteur de phase α indéterminé à ce stade :

$$\text{onde stationnaire : } e^{i\alpha}|\psi_q^{(-)}\rangle + e^{-i\alpha}|\psi_{-q}^{(-)}\rangle. \quad (\text{II.14})$$

Nous avons choisi ici $q \geq 0$ par convention et nous nous sommes limités pour l'instant à la bande inférieure. Le fait que l'on ait une chaîne finie impose de prendre en compte des conditions aux limites "ouvertes". Si la chaîne est constituée des sites $1, 2, \dots, N$, nous devons imposer une amplitude nulle sur les sites "fictifs" $|B_0\rangle$ et $|A_{N+1}\rangle$, ce qui conduit à

$$\cos(\alpha + \phi_q) = 0, \quad \cos[\alpha + (N+1)qa] = 0, \quad (\text{II.15})$$

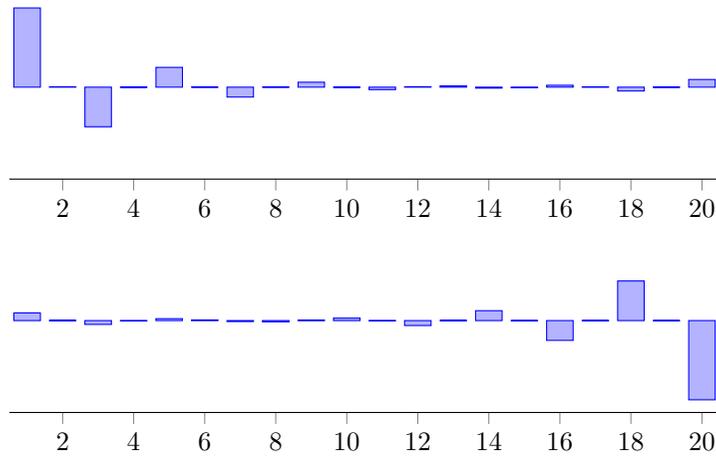


FIGURE II.9. Chaîne SSH finie à 20 sites, donc 10 cellules unité, pour $J' = J/2$ avec un léger décalage de $-J/100$ du site A_1 . On a représenté les amplitudes de probabilité $a_1, b_1, a_2, b_2, \dots$ pour les deux états situés à l'intérieur du gap. Le décalage en énergie du site A_1 entraîne une localisation presque complète des états de bord d'un côté ou l'autre de la chaîne.

où nous avons utilisé $\phi_{-q} = -\phi_q$. En éliminant α de ces deux équations, nous arrivons à la condition sur le moment q :

$$F(q) \equiv (N + 1)qa - \phi_q = 0 \text{ modulo } \pi \quad (\text{II.16})$$

qui se prête bien à une résolution graphique (figure II.10).

Pour un nombre de sites N assez grand, la fonction $F(q)$ est strictement croissante entre $q = 0$ et $q = \pi/a$ [rappelons que q est supposé positif pour éviter le double comptage des ondes stationnaires (II.14)]. Elle vaut toujours 0 en $q = 0$ et sa valeur en $q = \pi/a$ dépend de la topologie de la bande :

- Dans le cas normal, $\phi_q = 0$ pour $qa = \pi$ et $F(q)$ vaut donc $(N + 1)\pi$ en ce point. Il y a donc N solutions physiquement acceptables à l'équation (II.16), sachant que les points $q = 0$ et $qa = \pi$ conduisent à une onde stationnaire identiquement nulle.
- Dans le cas topologique, $\phi_q = \pi$ pour $qa = \pi$ du fait de l'enroulement

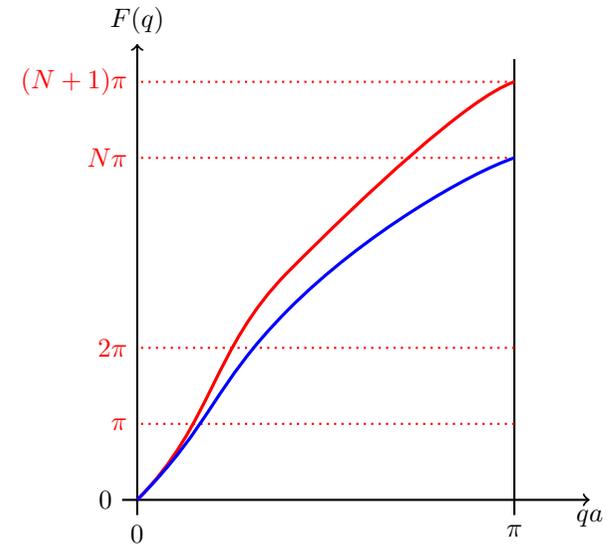


FIGURE II.10. Solution graphique de l'équation (II.16) permettant de déterminer les états propres de la chaîne SSH ouverte, fabriqués à partir d'états de Bloch de cœur. Dans le cas normal, en rouge, on trouve N solutions physiquement acceptables pour chacune de deux bandes d'énergie : ceci permet de former une base. Dans le cas topologique, en bleu, on ne trouve que $N - 1$ états par bande. Les deux états manquants sont les états de bord, situés à l'intérieur du gap de la chaîne infinie.

autour de la sphère de Bloch et $F(q)$ vaut donc $N\pi$ en ce point. Il n'y a alors que $N - 1$ solutions physiquement acceptables à l'équation (II.16).

Un raisonnement identique peut être fait pour les états de la bande supérieure et on arrive ainsi au nombre d'états de cœur que l'on peut former : $2N$ dans le cas normal, ce qui permet d'obtenir une base complète, et $2N - 2$ dans le cas topologique, ce qui entraîne l'existence de deux états en dehors du cœur : ce sont les états de bord proches de l'énergie nulle qui apparaissent sur la figure II.7.

1-3 La symétrie de sous-réseau

Nous allons maintenant expliquer la symétrie du spectre en énergie de la chaîne SSH, qu'elle soit finie ou infinie. Une caractéristique importante de l'hamiltonien $\hat{H}_q = -\mathbf{h}(q) \cdot \hat{\sigma}$ est que le vecteur unitaire $\mathbf{n}(q) = \mathbf{h}(q)/|\mathbf{h}(q)|$ reste en permanence sur l'équateur de la sphère de Bloch, ce qui permet de classer les bandes d'énergie par le nombre d'enroulement autour de la sphère de Bloch. La protection topologique de l'hamiltonien SSH est donc assurée par la symétrie entre les deux sous-réseaux A et B , assurant que $h_z = 0$.

Cette *symétrie de sous-réseau*, présente également dans des modèles beaucoup plus élaborés que le modèle SSH, est souvent appelée *symétrie chirale* pour des raisons liées à la théorie des champs. Sa transcription mathématique est très simple dans le cas présent. Introduisons les projecteurs \hat{P}_A et \hat{P}_B sur chacun des deux sous-réseaux. L'opérateur (unitaire)

$$\hat{S} \equiv \hat{P}_A - \hat{P}_B \quad (\text{II.17})$$

anti-commute avec l'hamiltonien SSH :

$$\hat{H}\hat{S} = -\hat{S}\hat{H}. \quad (\text{II.18})$$

Soulignons la structure particulière de la manifestation de cette symétrie. Pour les symétries traduisant une invariance géométrique (translation, rotation), on est plutôt habitué à disposer d'un opérateur \hat{O} qui *commute* avec l'hamiltonien : c'est ce qui permet de chercher une base propre commune à \hat{H} et \hat{O} et de trouver ainsi des états de Bloch pour l'invariance par translation, ou des états d'énergie et de moment cinétique bien définis pour l'invariance par rotation.

Explicitons les conséquences de la relation d'anti-commutation (II.18). En la multipliant à gauche et à droite par \hat{P}_A et en utilisant le fait que \hat{P}_A et \hat{P}_B sont des projecteurs orthogonaux ($\hat{P}_A^2 = \hat{P}_A$, $\hat{P}_A\hat{P}_B = 0$), on en déduit que

$$\hat{P}_A\hat{H}\hat{P}_A = 0, \quad (\text{II.19})$$

et de même pour \hat{P}_B :

$$\hat{P}_B\hat{H}\hat{P}_B = 0. \quad (\text{II.20})$$

C'est exactement la contrainte de ne pas avoir de coefficient diagonaux pour la matrice \hat{H}_q ($\forall q$), ce qui garantit que le vecteur $\mathbf{h}/|\mathbf{h}|$ reste confiné

sur l'équateur de la sphère unité. On peut également montrer la réciproque de cette propriété : si l'on impose les deux contraintes $\hat{P}_A\hat{H}\hat{P}_A = 0$ et $\hat{P}_B\hat{H}\hat{P}_B = 0$, on trouve¹ la relation d'anti-commutation (II.18).

Cette relation a pour conséquence la symétrie du spectre en énergie autour de $E = 0$. En effet si $|\Psi\rangle$ est état propre de \hat{H} avec la valeur propre E , alors

$$\hat{H}(\hat{S}|\psi\rangle) = -\hat{S}(\hat{H}|\psi\rangle) = -E(\hat{S}|\psi\rangle) \quad (\text{II.23})$$

ce qui indique que $\hat{S}|\psi\rangle$ est également état propre de \hat{H} avec la valeur $-E$.

Cette symétrie appliquée aux états de bord a des conséquences importantes :

- Si cet état de bord est unique, comme celui qui apparaît pour une chaîne semi-infinie (cf. la diagonalisation exacte effectuée en § 1-4), alors son énergie est nulle.
- Toujours dans l'hypothèse de l'unicité de cet état de bord $|\psi_0\rangle$, $\hat{S}|\psi_0\rangle$ qui est également état propre d'énergie nulle doit être colinéaire avec $|\psi_0\rangle$, ce qui veut dire que $|\psi_0\rangle$ est état propre de \hat{S} . Comme on a

$$\hat{S}^2 = 1 \quad (\text{II.24})$$

les valeurs propres de \hat{S} sont $+1$ et -1 . Si c'est la valeur propre $+1$ qui est réalisée, on a

$$\hat{S}|\psi_0\rangle = |\psi_0\rangle \Rightarrow \hat{P}_B|\psi_0\rangle = 0 \quad (\text{II.25})$$

et l'état $|\psi_0\rangle$ est localisé uniquement sur les sites A . Si c'est la valeur propre -1 qui est réalisée, alors $|\psi_0\rangle$ est localisé uniquement sur les sites B . Nous retrouverons ce résultat au paragraphe suivant en analysant le cas particulier d'une chaîne semi-infinie (§ 1-4).

1. La démonstration est simple si on utilise $\hat{P}_A + \hat{P}_B = \hat{1}$:

$$\hat{H}\hat{S} = \hat{H}(\hat{P}_A - \hat{P}_B) = (\hat{P}_A + \hat{P}_B)\hat{H}(\hat{P}_A - \hat{P}_B) = \hat{P}_B\hat{H}\hat{P}_A - \hat{P}_A\hat{H}\hat{P}_B \quad (\text{II.21})$$

et

$$\hat{S}\hat{H} = (\hat{P}_A - \hat{P}_B)\hat{H} = (\hat{P}_A - \hat{P}_B)\hat{H}(\hat{P}_A + \hat{P}_B) = \hat{P}_A\hat{H}\hat{P}_B - \hat{P}_B\hat{H}\hat{P}_A = -\hat{H}\hat{S}. \quad (\text{II.22})$$

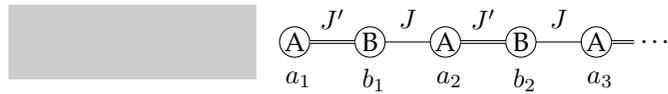


FIGURE II.11. chaîne SSH semi-infinie.

1-4 La chaîne semi-infinie

Pour comprendre comment les états de bord apparaissent dans ce système uni-dimensionnel, il est intéressant d'étudier le modèle exactement soluble de la chaîne SSH semi-infinie. Considérons donc le système représenté sur la figure II.11. Comme dans le cas de la chaîne finie, le système n'est pas périodique et on ne peut pas utiliser le théorème de Bloch pour chercher ses états propres. Toutefois, il est relativement simple de les trouver directement. Ecrivons un état propre d'énergie E sous la forme

$$|\psi\rangle = \sum_{j=1}^{+\infty} (a_j |A_j\rangle + b_j |B_j\rangle). \quad (\text{II.26})$$

Quand on reporte ce développement dans l'équation aux valeurs propres $\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$, on obtient un système infini d'équations :

$$-J'b_1 = E a_1 \quad (\text{II.27})$$

$$-J'a_1 - J a_2 = E b_1 \quad (\text{II.28})$$

et pour $j \geq 2$:

$$-J'b_j - J b_{j-1} = E a_j \quad (\text{II.29})$$

$$-J'a_j - J a_{j+1} = E b_j. \quad (\text{II.30})$$

La résolution de ce système se fait par des méthodes standard d'algèbre linéaire (voir appendice) et il y a suivant les cas un ou deux types de solutions (cf. figure II.12) :

— Quand l'énergie E est choisie dans un des deux domaines

$$[-(J+J'), -|J-J'|] \quad \text{ou} \quad [|J-J'|, J+J'], \quad (\text{II.31})$$

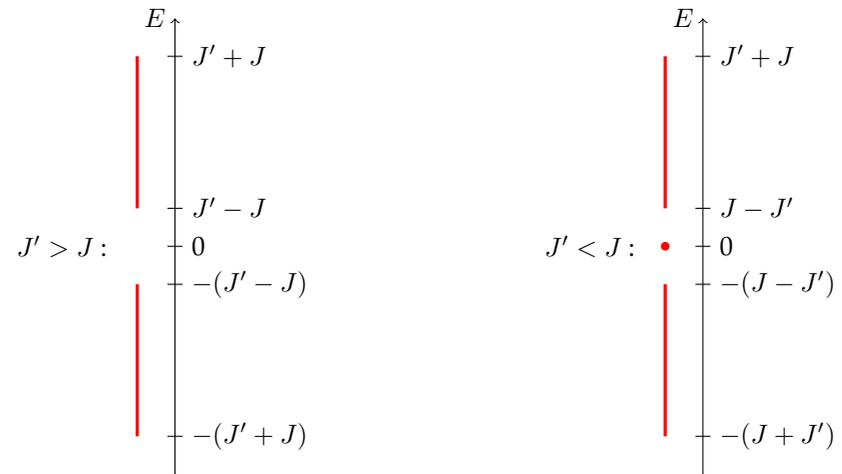


FIGURE II.12. Spectre en énergie d'une chaîne semi-infinie. En plus des deux bandes d'énergie trouvées pour le cas de la chaîne infinie, un état de bord d'énergie nulle apparaît dans le cas "topologique" $J' < J$.

on trouve toujours une solution avec des coefficients a_j et b_j de module (à peu près) constant quand $j \rightarrow \infty$. Cette solution représente une onde issue de $+\infty$, se propageant dans le sens des x négatifs, se réfléchissant sur le site A_1 et repartant en $+\infty$. Cette solution de type *onde stationnaire* existe si et seulement si on choisit une énergie dans les bandes autorisées trouvées plus haut [cf. (II.6)], ce qui est rassurant : il s'agit d'une solution de cœur (*bulk*), dont l'existence n'est pas affectée par le fait que la chaîne soit coupée en $j = 1$.

— Si $J' < J$, une solution complémentaire apparaît pour l'énergie nulle, correspondant à un état discret. Cet état est donné (à un facteur de normalisation près) par :

$$a_j = (-J'/J)^j, \quad b_j = 0. \quad (\text{II.32})$$

Cet état est donc localisé uniquement sur les sites A , comme attendu du fait de la symétrie de sous-réseau (§1-3), et sa probabilité de présence $P_j = |a_j|^2$ décroît exponentiellement vite quand on s'éloigne du

bord A_1 , la distance caractéristique de décroissance étant

$$\ell = \frac{a}{2 \ln(J/J')}, \quad (\text{II.33})$$

ce qui est de l'ordre de a , sauf si J et J' sont très voisins. C'est l'état de bord recherché.

On notera que la position en énergie de cet état lié est différente de ce à quoi on est habitué pour des potentiels $V(x)$ localisés dans l'espace. Dans ce dernier cas, le spectre en énergie est formé d'états discrets pour la partie basse énergie, puis d'un continuum en énergie au dessus d'un certain seuil. Ici, l'état discret a une énergie intermédiaire, avec un continuum d'énergie à la fois en dessous et au dessus de lui.

Jonctions entre chaînes SSH. Comme nous l'avons déjà mentionné, l'existence des états de bord pour la chaîne finie ou semi-infinie dans le cas $J' < J$, et leur non-existence pour $J' > J$, est une illustration très simple de la correspondance cœur-bord (*bulk-edge*). Cette correspondance indique ce qui se produit à l'interface entre deux zones de topologies différentes ou identiques. Notre demi-chaîne peut être obtenue en partant d'une chaîne infinie, puis posant $J = 0$ dans la partie gauche ($j \leq 0$) de la chaîne. C'est ce qui est représenté par la zone grisée de la figure II.13. Cette partie grisée est donc dans la classe topologique $[J' > J]$. Si on choisit pour la chaîne réelle des coefficients tunnels également tels que $J' > J$, les deux parties de la chaîne seront dans la même classe topologique et il n'y aura pas d'état de bord, c'est-à-dire pas d'état localisé à la frontière entre les deux zones. En revanche, si on choisit pour la chaîne réelle $J' < J$, les deux zones grisées et non grisées seront dans deux classes topologiques différentes : un état de bord apparaîtra alors à l'interface entre les deux zones.

1-5 Etats de bord entre deux chaînes (cas continu)

Le caractère général de l'existence d'un état de bord entre deux régions de topologies différentes peut être montré simplement sur le modèle SSH. Considérons une chaîne de sites $A - B$ le long de laquelle les coefficients J et J' varient la région centrale située autour du site 0. Nous supposons

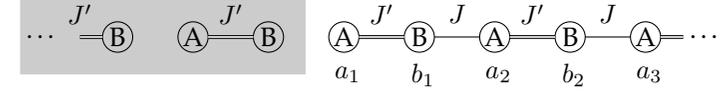


FIGURE II.13. La chaîne SSH semi-infinie peut être vue comme une chaîne infinie, mais avec un coefficient J dépendant de l'espace; plus précisément, la zone grisée représente une chaîne avec un coefficient $J = 0$, qui se trouve donc dans la classe topologique $J' > J$ alors que la chaîne "réelle" peut correspondre à la classe topologique $J' > J$ ou $J' < J$. Dans le deuxième cas, un état de bord, localisé essentiellement sur le site A_1 , apparaît.

que loin de cette région, le rapport J'/J tend vers une constante, mais que cette constante correspond à des topologies différentes à droite ($j \rightarrow +\infty$) et à gauche ($j \rightarrow -\infty$). Posons par exemple que

- $\lim_{j \rightarrow +\infty} (J'/J) = r_+ > 1$ à droite,
- $\lim_{j \rightarrow -\infty} (J'/J) = r_- < 1$ à gauche.

Il est alors simple de montrer qu'il y a toujours un état lié, d'énergie $E = 0$, localisé autour de la zone frontière $j = 0$. Pour cela, écrivons l'expression de cet état possible sous la forme

$$|\psi\rangle = \sum_{j=-\infty}^{+\infty} (a_j |A_j\rangle + b_j |B_j\rangle) \quad (\text{II.34})$$

avec

$$\sum_j |a_j|^2 + |b_j|^2 = 1, \quad (\text{II.35})$$

et posons qu'il est état propre de l'hamiltonien avec la valeur propre $E=0$. On aboutit au système d'équations [cf (II.29-II.30)] :

$$-J'a_{j+1} - Ja_j = 0, \quad -J'b_{j+1} - Jb_j = 0, \quad (\text{II.36})$$

où les coefficients J et J' dépendent eux-même de l'espace.

Quand on va dans la région $j \rightarrow +\infty$, on trouve donc

$$\frac{|a_{j+1}|}{|a_j|} = \frac{1}{r_+} < 1, \quad \frac{|b_{j+1}|}{|b_j|} = r_+ > 1. \quad (\text{II.37})$$

Les suites a_j et b_j sont donc des suites géométriques dans cette région. La suite a_j a une raison inférieure à 1, elle est donc décroissante et peut conduire à un état normalisable au sens de (II.35), au moins dans cette région. En revanche, la suite b_j de raison > 1 est croissante, ce qui nous oblige à poser $b_j = 0$. La relation (II.36) impose alors que tous les coefficients b_j sont nuls.

Quand on va dans la région $j \rightarrow 0$, on trouve

$$\frac{|a_{j-1}|}{|a_j|} = r_- < 1. \quad (\text{II.38})$$

Grâce à l'inversion $J' > J \rightarrow J' < J$, on aboutit donc de nouveau une suite géométrique décroissante pour a_j quand $j \rightarrow -\infty$. Partant par exemple de $a_0 = 1$, on peut donc construire une suite de nombres a_j pour $j \rightarrow \pm\infty$ qui satisfont l'équation de récurrence (II.36) et que l'on peut ensuite normaliser. Cet état propre d'énergie nulle est localisé sur les sites A_j et essentiellement concentré au voisinage de $j = 0$, sa probabilité de présence décroissant exponentiellement vite (comme $r_{\pm}^{\mp|j|}$) quand $j \rightarrow \pm\infty$.

Il est clair à partir du raisonnement précédent que l'on aurait trouvé un état localisé uniquement sur les sites B_j si on avait fait l'hypothèse inverse $r_+ < 1$ et $r_- > 1$. Par ailleurs, si l'on connecte deux régions de même topologie, même avec des paires de coefficients (J, J') très différentes, on ne trouve pas cet état lié d'énergie nulle car les suites géométriques pour les a_j et les b_j sont toutes deux forcément divergentes d'un côté ou de l'autre, $j \rightarrow +\infty$ ou $j \rightarrow -\infty$.

2 Le modèle SSH en photonique

2-1 Effets topologiques en photonique

L'idée d'étendre les concepts topologiques de l'effet Hall quantique aux ondes électromagnétiques a été suggérée par HALDANE & RAGHU (2008). Leur suggestion était fondée sur la propriété de non-réciprocité que l'on observe par exemple dans l'effet Faraday, un champ magnétique extérieur brisant l'invariance par renversement du temps d'un système optique. Depuis cette date, cette idée a été mise en œuvre dans toute une

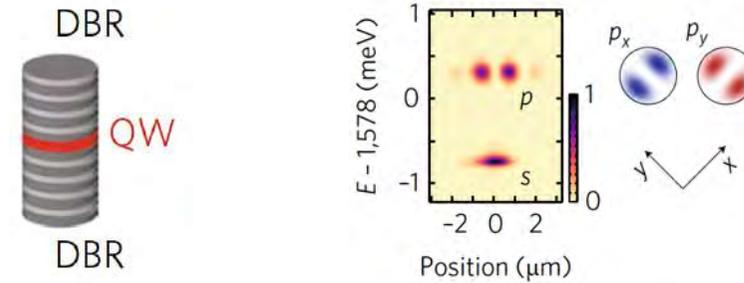


FIGURE II.14. Gauche : cellule élémentaire composée d'un puits quantique de GaAs placée entre deux miroirs de Bragg composés de plusieurs dizaines de couches de GaAlAs. Figure extraite de ST-JEAN, GOBLOT et al. (2017).

série d'expériences, à commencer par le travail de WANG, CHONG et al. (2009) mené avec un cristal photonique dans le domaine des micro-ondes. Faute de place, nous ne pourrions pas présenter toutes ces expériences dans ce cours et nous nous limiterons à la description de quelques unes, soit à une dimension dans ce chapitre, soit à deux dimensions dans des chapitres ultérieurs. Nous renvoyons le lecteur souhaitant disposer d'une liste exhaustive de ces travaux en photonique vers les articles de revues de LU, JOANNOPOULOS et al. (2014), LODAHL, MAHMOODIAN et al. (2017), KHANIKAEV & SHVETS (2017), OZAWA, PRICE et al. (2018).

Nous allons nous restreindre dans cette partie à l'implémentation du modèle SSH avec des ondes électromagnétiques. Cette implémentation a d'abord été faite dans le domaine des micro-ondes par POLI, BELLEC et al. (2015). Plus récemment, elle a été menée dans le domaine visible ou proche-infrarouge par WEIMANN, KREMER et al. (2017) et ST-JEAN, GOBLOT et al. (2017). C'est ce dernier projet que nous allons regarder plus en détail.

2-2 La cellule élémentaire et la chaîne SSH

Dans l'expérience de ST-JEAN, GOBLOT et al. (2017), la cellule élémentaire est constituée par un puits quantique circulaire de GaAs, placé entre deux miroirs (figure II.14, gauche). L'amplitude du champ dans cette cavité

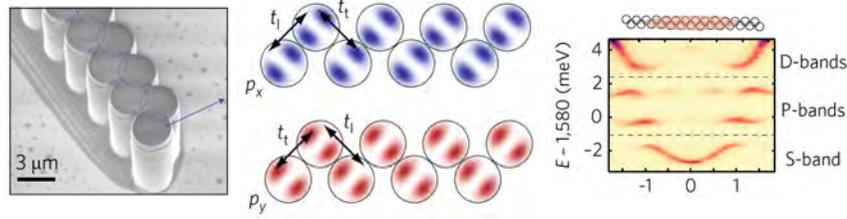


FIGURE II.15. Gauche : Chaîne de micropiliers disposés en zig-zag (distance entre piliers : $3.4 \mu\text{m}$). Milieu : Le couplage entre orbitales p_x (resp. p_y) se fait avec une alternance de coefficients J, J' (resp. J', J) notés ici t_l et t_t . Le rapport t_t/t_l est de l'ordre de 0.15. Droite : La mesure de la fréquence de la lumière de photoluminescence en fonction de l'angle d'émission (i.e. l'impulsion transverse des photons) révèle la structure de bande associée aux modes s, p, d . On a excité ici le cœur de la chaîne, mais pas ses extrémités. Figure extraite de ST-JEAN, GOBLOT et al. (2017).

résonnante en forme de piliers joue le rôle des coefficients complexes notés a_j ou b_j dans ce qui précède [cf. . eq. (II.26)]. On éclaire ce puits quantique par une lumière non-résonante et on observe la lumière de photoluminescence qui révèle l'amplitude du champ électromagnétique dans la cavité. On peut effectuer une mesure "dans l'espace réel" en imageant le (ou les) puits quantique sur la caméra, ou bien une mesure "dans l'espace de Fourier", pour mesurer ce qui est émis dans une direction donnée, indépendamment de la position précise du (ou des) puits quantique. Toutes ces expériences sont menées dans un environnement cryogénique à 4 K.

Le champ électromagnétique dans cette cavité peut exister dans plusieurs modes spatiaux transverses. Le mode de plus basse énergie est un mode de symétrie cylindrique, appelé orbitale s . Le mode suivant, qui est utilisé pour cette expérience, est doublement dégénéré. Une base de cet espace à deux états est composée des orbitales p_x et p_y , qui comportent deux lobes de signes opposés, avec un axe de symétrie selon x ou selon y (figure II.14, droite). Les modes supérieurs (le mode d par exemple) ne jouent pas de rôle significatif ici.

Pour construire une chaîne SSH, on dispose ces piliers de manière régulière pour former une ligne en zig-zag, représentée sur la figure II.15

(gauche). Le rôle du couplage tunnel entre sites voisins est joué ici par l'onde évanescente qui entoure les micro-piliers. Pour le champ électromagnétique dans l'onde s , tous les couplages entre proches voisins sont identiques et on réalise une chaîne de Hubbard simple, sans propriété topologique. On retrouve pour la bande d'énergie correspondante la relation de dispersion bien connue en $-2J \cos(qa)$ (figure II.15, droite).

En revanche, le couplage dans l'onde p permet de réaliser l'alternance désirée J, J' des couplages. Selon que les deux lobes de l'orbitale p de deux piliers adjacents sont alignés ou face à face, on ne trouve pas le même coefficient de couplage (figure II.15, milieu). Le rapport mesuré expérimentalement est $J'/J \approx 0.15$. Remarquablement, les deux orbitales p_x et p_y réalisent simultanément les deux configurations possibles : si deux piliers sont couplés par le coefficient J pour l'orbitale p_x , ils sont couplés par le coefficient J' pour l'orbitale p_y , et inversement.

Cette alternance des couplages conduit à la séparation de la bande d'énergie en deux sous-bandes disjointes, qui sont effectivement observées dans une mesure "dans l'espace de Fourier", comme montré sur la figure II.15, droite. Notons qu'à ce stade, l'irradiation lumineuse qui engendre la photoluminescence est concentrée sur le cœur de la chaîne et qu'aucun état de bord n'est excité.

2-3 Observation des états de bord et laser topologique

La figure II.16 (gauche) montre le résultat de la mesure de photoluminescence quand une extrémité de la chaîne est éclairée. On voit alors apparaître sur le spectre en énergie des états supplémentaires, au centre du gap pour la lumière émise par les modes en onde p . Il s'agit d'une observation directe des états de bord trouvés en figure II.7. L'imagerie en espace réel de la chaîne (figure II.16, droite) montre que l'état en jeu correspond à la polarisation p_y , pour lequel apparaît la bande topologiquement non triviale $J > J'$, c'est-à-dire ici $t_l > t_t$.

Un des intérêts pratiques de cette implémentation des concepts de topologie en photonique est de fabriquer des lasers "robustes", donc peu sensibles aux défauts ou aux imperfections qui peuvent survenir dans leur réalisation. Ce point est illustré en figure II.17, où l'on montre l'effet laser

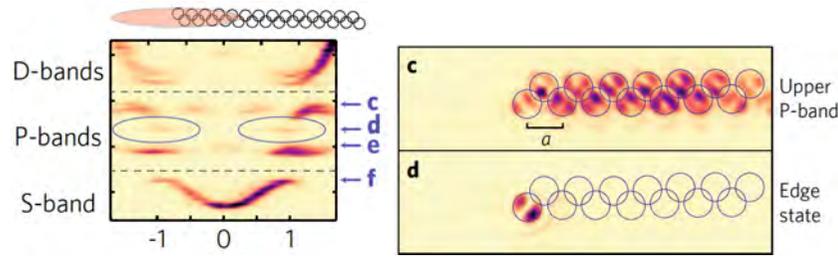


FIGURE II.16. Observation des états de bord pour l'onde p_y , correspondant à la bande topologiquement non triviale $J > J'$, c'est-à-dire $t_l > t_t$ pour les notations de la figure II.15. Figure extraite de ST-JEAN, GOBLOT et al. (2017).

qui se produit quand on augmente la puissance de la lumière qui pompe l'échantillon. Au dessus du seuil, la puissance émise dans le mode de bord dépasse très largement celle émise par l'ensemble des modes de cœur (*bulk*). La largeur spectrale du pic diminue, indiquant une augmentation de la cohérence temporelle de ce laser. Le fait que ce mode de bord soit privilégié par rapport aux modes de cœur s'explique par le fait que les polaritons occupant les modes de cœur ont une forte mobilité et s'éloignent rapidement de la zone de pompage.

3 Le modèle de Kitaev

Le reste de ce chapitre va être consacré à un problème de particules en interaction; nous allons considérer le système modèle introduit par KITAEV (2001) pour montrer comment une topologie non triviale peut apparaître dans une chaîne 1D de fermions, avec des interactions du type de celles conduisant à la supra-conductivité.

Dans cette partie, nous allons commencer par décrire le modèle proposé par Kitaev, puis présenter brièvement la méthode générale de Bogoliubov – de Gennes permettant de traiter ce type d'hamiltonien. En examinant le cas d'une chaîne infinie, donc invariante par translation, nous montrerons comment ce problème peut – tout comme la chaîne SSH – se ramener à celui d'un pseudo-spin 1/2. Les arguments développés plus haut et fon-

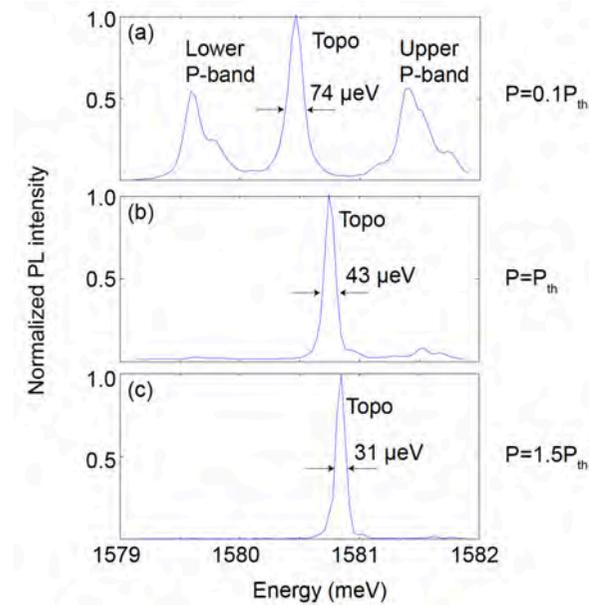


FIGURE II.17. Spectre d'émission mesuré quand on augmente la puissance de la lumière de pompe au dessus du seuil de l'effet laser pour le mode topologique. Figure extraite de ST-JEAN, GOBLOT et al. (2017), supplementary information.

dés sur l'enroulement des états propres sur la sphère de Bloch seront donc applicables, et ils nous fourniront une première indication de la nature topologique des phases susceptibles d'apparaître. Ce point sera ensuite approfondi dans la partie § 4.

3-1 L'hamiltonien de Kitaev

L'hamiltonien décrivant le modèle de KITAEV (2001) comporte trois termes (figure II.18) :

- Nous considérons des particules obéissant à la statistique de Fermi, mais sans degré de liberté de spin. Ces particules évoluent sur une chaîne 1D traitée dans le modèle des liaisons fortes, avec le coefficient tunnel J entre sites adjacents. Le premier terme de l'hamiltonien, qui

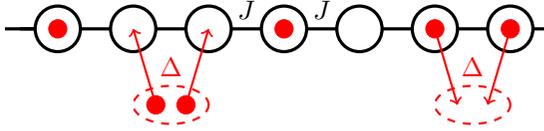


FIGURE II.18. La chaîne de Kitaev, caractérisée par le couplage tunnel J et le gap superfluide Δ . Un troisième paramètre, le potentiel chimique μ , permet d'ajuster le nombre moyen de particules sur la chaîne.

décrit le couplage tunnel entre deux sites, s'écrit dans le formalisme de la seconde quantification² :

$$-J \sum_j |j+1\rangle\langle j| + \text{h.c.} \longrightarrow -J \sum_j \hat{a}_{j+1}^\dagger \hat{a}_j + \text{h.c.} \quad (\text{II.39})$$

où \hat{a}_j (resp. \hat{a}_j^\dagger) détruit (créé) un fermion sur le site j , ces opérateurs vérifiant les relations d'anti-commutation standard pour des fermions :

$$\hat{a}_i \hat{a}_j + \hat{a}_j \hat{a}_i = 0, \quad \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j + \hat{a}_j \hat{a}_i^\dagger = \delta_{i,j}. \quad (\text{II.40})$$

— Nous supposons que cette chaîne est couplée de manière cohérente à un réservoir superfluide (ou supraconducteur) qui injecte des paires de fermions sur des sites adjacents. Ce couplage est caractérisé par le paramètre Δ qui représente le gap supraconducteur³ imposé par le réservoir et il s'écrit :

$$\sum_j \left(\Delta \hat{a}_{j+1}^\dagger \hat{a}_j^\dagger + \Delta^* \hat{a}_j \hat{a}_{j+1} \right) \quad (\text{II.41})$$

2. Nous avons utilisé jusqu'ici le formalisme de la première quantification, qui est bien adapté quand le nombre de particules est conservé. Nous sommes obligés de passer pour ce paragraphe au formalisme de la seconde quantification pour décrire la supraconductivité dans le formalisme de Bogoliubov-de Gennes.

3. L'existence d'un gap supra-conducteur suppose des interactions entre particules. En général, les interactions dans un supraconducteur se font entre fermions de spins opposés et se produisent dans l'onde partielle $\ell = 0$ (onde s) qui est favorisée à basse température. Ici, nous avons supposé le degré de liberté de spin gelé, et le principe de Pauli interdit ces interactions dans l'onde s . Les interactions ont donc nécessairement lieu dans les ondes impaires, l'onde p par exemple. Ce point apparaîtra clairement quand nous écrirons l'hamiltonien dans l'espace des moments [eq. (II.60)]. Nous trouverons en effet un terme d'interaction en $\Delta \sin(qa)$, qui est bien une fonction impaire de q .

Le paramètre Δ est *a priori* complexe, mais on peut le choisir réel sans perte de généralité en incorporant sa phase éventuelle dans la définition des \hat{a}_j .

— Il est clair que le couplage (II.41) ne conserve pas le nombre de particules ; pour imposer un nombre de particules moyen sur la chaîne, il faut ajouter un troisième terme $-\mu \hat{N}_p$ faisant intervenir le potentiel chimique μ du réservoir, où \hat{N}_p est l'opérateur nombre total de particules :

$$\hat{N}_p = \sum_j \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j \quad (\text{II.42})$$

On arrive alors à l'hamiltonien total :

$$\hat{H} = \sum_j \left\{ -J \left(\hat{a}_j^\dagger \hat{a}_{j+1} + \hat{a}_{j+1}^\dagger \hat{a}_j \right) - \mu \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j + \Delta \left(\hat{a}_j \hat{a}_{j+1} + \hat{a}_{j+1}^\dagger \hat{a}_j^\dagger \right) \right\}, \quad (\text{II.43})$$

dont nous souhaitons trouver les états propres et les énergies associées.

3-2 Le formalisme de Bogoliubov-de Gennes

Supposons que la chaîne considérée comporte N sites, avec des conditions aux limites à préciser, qui peuvent être par exemple périodiques ou ouvertes. L'espace des états est de dimension 2^N , puisque chaque site peut être vide ou occupé par une particule. Cette croissance exponentielle de la dimension de l'espace des états avec le nombre de sites rend très difficile le traitement général d'un hamiltonien à N corps. Fort heureusement, pour un hamiltonien quadratique en les $\hat{a}_i, \hat{a}_i^\dagger$ du type de (II.43), on peut utiliser une méthode qui ne fait intervenir qu'une matrice beaucoup plus petite, de taille $2N \times 2N$.

Pour construire cette matrice, considérons le vecteur ligne \hat{A}^\dagger et le vecteur colonne associé \hat{A} de longueur $2N$ définis par (spineurs de Nambu) :

$$\hat{A}^\dagger = \begin{pmatrix} \hat{a}_1^\dagger & \dots & \hat{a}_N^\dagger & \hat{a}_1 & \dots & \hat{a}_N \end{pmatrix} \quad \hat{A} = \begin{pmatrix} \hat{a}_1 \\ \vdots \\ \hat{a}_N \\ \hat{a}_1^\dagger \\ \vdots \\ \hat{a}_N^\dagger \end{pmatrix} \quad (\text{II.44})$$

Un hamiltonien \hat{H} quadratique en les $\hat{a}_i, \hat{a}_i^\dagger$ peut alors être mis sous la forme (à une constante additive près)

$$\hat{H} = \frac{1}{2} \hat{A}^\dagger \hat{H}_{\text{BdG}} \hat{A} \quad (\text{II.45})$$

où \hat{H}_{BdG} est une matrice $2N \times 2N$ que l'on peut écrire sous la forme de 4 blocs, chacun de taille $N \times N$

$$\hat{H}_{\text{BdG}} = \begin{pmatrix} \hat{M}_1 & \hat{M}_2 \\ -\hat{M}_2^* & -\hat{M}_1^* \end{pmatrix} \quad (\text{II.46})$$

Les matrices \hat{M}_1, \hat{M}_1^* (hermitiennes) permettent de prendre en compte les termes en $a_i^\dagger a_j$ qui conservent le nombre de particules, et les matrices \hat{M}_2, \hat{M}_2^* (antisymétriques) rendent compte des termes en $a_i a_j$ et $\hat{a}_j^\dagger \hat{a}_i^\dagger$ à l'origine du gap superfluide. Pour l'hamiltonien (II.43), on trouve que les matrices M_1 et M_2 sont les matrices de bande réelles

$$\hat{M}_1 = - \begin{pmatrix} \mu & J & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ J & \mu & J & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & & & & & & & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & J & \mu & J \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & J & \mu \end{pmatrix} \quad (\text{II.47})$$

et

$$\hat{M}_2 = \Delta \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & -1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ \vdots & & & & & & & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 1 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{II.48})$$

Une fois connues les énergies propres E_j de \hat{H}_{BdG} et les états propres associés, on peut mettre l'hamiltonien \hat{H} de départ sous la forme d'une somme de modes

$$\hat{H} = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{2N} E_j \hat{b}_j^\dagger \hat{b}_j, \quad (\text{II.49})$$

où les opérateurs \hat{b}_j^\dagger et \hat{b}_j sont des combinaisons linéaires des \hat{a}_j^\dagger et \hat{a}_j , avec des coefficients reliés aux vecteurs propres de \hat{H}_{BdG} . Chaque mode ($\hat{b}_j^\dagger, \hat{b}_j$) correspond à une quasi-particule de Bogoliubov, obéissant à la statistique fermionique. L'état fondamental de \hat{H} par exemple est obtenu en laissant vide les modes ($\hat{b}_j^\dagger, \hat{b}_j$) d'énergie E_j positive et en remplissant ceux d'énergie négative.

3-3 La symétrie particule-trou

La forme diagonale de l'hamiltonien \hat{H} semble à première vue paradoxale. En effet, nous sommes partis d'un espace de Hilbert de dimension 2^N et nous arrivons maintenant à $2N$ modes, pouvant chacun être vide ou occupé, ce qui semble correspondre à un espace des états de dimension 2^{2N} . D'où vient cette augmentation (considérable!) de la dimension de l'espace des états?

Elle trouve son origine dans la structure même du formalisme de Bogoliubov-de Gennes, qui entraîne que ces $2N$ modes ne sont pas indépendants, mais liés par paires. Dans (II.45), l'hamiltonien \hat{H}_{BdG} agit sur le vecteur \hat{A} qui est composé d'opérateurs de destruction pour sa première partie et de création pour sa seconde partie. Ces mêmes opérateurs interviennent dans l'ordre opposé dans \hat{A}^\dagger , de sorte que tout terme de type $\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j$ apparaît deux fois dans le développement que l'on peut faire à partir de (II.45). Sur le plan mathématique, ce doublement des termes se traduit par une propriété de symétrie de l'hamiltonien de Bogoliubov-de Gennes :

$$\hat{C} \hat{H}_{\text{BdG}} \hat{C}^\dagger = -\hat{H}_{\text{BdG}}, \quad (\text{II.50})$$

où nous avons introduit l'opérateur anti-unitaire de *symétrie particule-trou* :

$$\hat{C} = \hat{K}_0 \hat{\tau}_x \quad (\text{II.51})$$

où \hat{K}_0 est l'opérateur conjugaison complexe

$$\hat{K}_0\psi(x) = \psi^*(x), \quad (\text{II.52})$$

et où $\hat{\tau}_x$ échange les opérateurs création et annihilation sur un site donné :

$$\hat{\tau}_x = \begin{pmatrix} 0 & \hat{1} \\ \hat{1} & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{II.53})$$

où chaque sous-matrice est de taille $N \times N$.

La relation d'anti-commutation (II.50) a deux conséquences immédiates :

- Comme pour la symétrie de sous-réseau (chirale), elle entraîne la symétrie du spectre de \hat{H}_{BdG} autour de l'énergie nulle. Si une énergie $E \neq 0$ apparaît dans le spectre de \hat{H}_{BdG} , alors on sait que l'énergie $-E$ doit également apparaître.
- Elle entraîne également une relation simple entre les deux modes propres associés à une paire d'énergie $(E, -E)$. Si un certain mode propre $(\hat{b}_E, \hat{b}_E^\dagger)$ apparaît dans la diagonalisation de \hat{H}_{BdG} à l'énergie E avec

$$\hat{b}_E = \sum_{j=1}^N u_j \hat{a}_j + v_j \hat{a}_j^\dagger \quad (\text{II.54})$$

alors on sait que le mode obtenu par action de \hat{C} sur $(u_j, v_j)^T$, c'est-à-dire

$$\sum_{j=1}^N v_j^* \hat{a}_j + u_j^* \hat{a}_j^\dagger \quad (\text{II.55})$$

sera un mode propre $(\hat{b}_{-E}, \hat{b}_{-E}^\dagger)$ pour $-E$, c'est-à-dire

$$\hat{b}_{-E} = \hat{b}_E^\dagger, \quad \hat{b}_{-E}^\dagger = \hat{b}_E. \quad (\text{II.56})$$

En d'autres termes, détruire une quasi-particule d'énergie $-E$ est équivalent à créer une particule d'énergie E . En paraphrasant BEENAKKER (2015), on peut dire que la symétrie particule-trou traduit l'ambiguïté de la définition d'une quasi-particule, qui peut être vue comme une paire de Cooper à laquelle il manque une particule, ou une paire de Cooper ayant une particule en trop.

En utilisant

$$(-E) \hat{b}_{-E}^\dagger \hat{b}_{-E} = (-E) \hat{b}_E \hat{b}_E^\dagger = E \left(\hat{b}_E^\dagger \hat{b}_E - 1 \right), \quad (\text{II.57})$$

on peut donc réécrire l'hamiltonien \hat{H} donné en (II.49) sous la forme

$$\hat{H} = \sum_{j=1}^N E_j \left(\hat{b}_j^\dagger \hat{b}_j - 1/2 \right), \quad (\text{II.58})$$

où la somme ne porte plus que sur les modes d'énergie E_j positive. On a donc bien N modes de quasi-particules indépendants pour ce problème, avec chaque mode qui peut être occupé par 0 ou 1 quasi-particule, soit un espace de Hilbert de taille 2^N , comme attendu.

Remarque. Le cas d'un mode d'énergie nulle, donc doublement dégénéré, peut nécessiter un traitement particulier. C'est précisément l'objet du modèle de Kitaev sur lequel nous reviendrons dans la partie 4.

3-4 La chaîne de Kitaev infinie

Pour une chaîne infinie, ou pour une chaîne à N sites avec des conditions aux limites périodiques, l'invariance par translation permet (comme pour le modèle SSH) de simplifier le problème. On introduit l'opérateur⁴ création d'une particule avec le quasi-moment q :

$$\hat{a}_q^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j e^{iqja} \hat{a}_j^\dagger \quad (\text{II.59})$$

ce qui permet de mettre \hat{H} sous la forme

$$\hat{H} = \sum_q \left\{ -[2J \cos(qa) + \mu] \hat{a}_q^\dagger \hat{a}_q + i\Delta \sin(qa) \left(\hat{a}_{-q} \hat{a}_q - \hat{a}_q^\dagger \hat{a}_{-q}^\dagger \right) \right\}. \quad (\text{II.60})$$

4. Pour ne pas multiplier les notations, nous désignons par le même symbole $\hat{a}_{j/q}^\dagger$ l'opérateur de création sur le site j et l'opérateur de création avec le moment q ; ceci ne devrait pas créer de confusion dans la mesure où les sites sont toujours désignés par les lettres i ou j , alors que les moments sont toujours désignés par les lettres q ou q' .

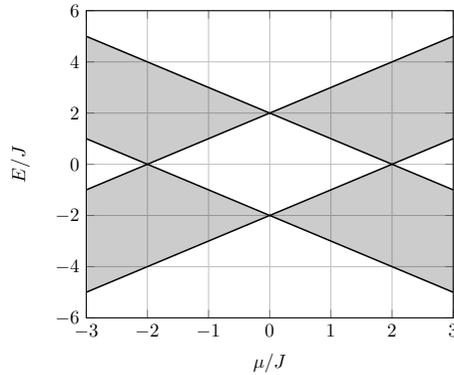


FIGURE II.19. Spectre des quasi-particules pour la chaîne de Kitaev infinie dans le cas particulier pour $\Delta = J$.

On obtient ainsi un hamiltonien quadratique en les $\hat{a}_q^\dagger, \hat{a}_q$ dans lequel le moment q n'est couplé qu'au moment $-q$.

La méthode de Bogoliubov–de Gennes peut être utilisée là aussi et elle prend en fait une forme particulièrement simple. Introduisons les vecteurs à deux composantes :

$$\hat{A}_q^\dagger = (\hat{a}_q^\dagger \quad \hat{a}_{-q}) \quad \hat{A}_q = \begin{pmatrix} \hat{a}_q \\ \hat{a}_{-q}^\dagger \end{pmatrix} \quad (\text{II.61})$$

ce qui donne

$$\hat{H} = \frac{1}{2} \sum_q \hat{A}_q^\dagger \hat{H}_q \hat{A}_q \quad (\text{II.62})$$

où \hat{H}_q est la matrice hermitienne 2×2 :

$$\begin{aligned} \hat{H}_q &= \begin{pmatrix} -[2J \cos(qa) + \mu] & -2i\Delta \sin(qa) \\ 2i\Delta \sin(qa) & 2J \cos(qa) + \mu \end{pmatrix} \\ &= -\mathbf{h}(q) \cdot \hat{\sigma} \quad \text{avec} \quad \begin{cases} h_x(q) = 0 \\ h_y(q) = -2\Delta \sin(qa) \\ h_z(q) = 2J \cos(qa) + \mu \end{cases} \end{aligned} \quad (\text{II.63})$$

Comme expliqué en § 3-2, la connaissance des états propres de \hat{H}_q et

des énergies associées $\pm E_q$ avec

$$E_q = |\mathbf{h}(q)| = \left\{ 4\Delta^2 \sin^2(qa) + [2J \cos(qa) + \mu]^2 \right\}^{1/2} \quad (\text{II.64})$$

permet d'écrire \hat{H} sous forme diagonale représentant une assemblée de quasi-particules sans interaction :

$$\hat{H} = \sum_q E_q (\hat{c}_q^\dagger c_q - 1/2) \quad (\text{II.65})$$

où la somme porte sur tous les q , mais seulement sur les énergies positives⁵ $+E_q$. Les opérateurs d'annihilation et de création $\hat{c}_q, \hat{c}_q^\dagger$ pour les quasi-particules sont des combinaisons linéaires des a_q et a_q^\dagger :

$$\hat{c}_q^\dagger = u_q \hat{a}_q^\dagger + v_q \hat{a}_{-q}, \quad (\text{II.66})$$

les coefficients (u_q, v_q) étant directement liés aux vecteurs propres de \hat{H}_q . Nous ne les explicitons pas ici car ils ne sont pas nécessaires pour notre discussion (voir par exemple ALICEA (2012)). L'état fondamental $|\psi_0\rangle$ est obtenu en résolvant $\hat{c}_q|\psi_0\rangle = 0$ pour tout q et il a pour énergie

$$-\frac{1}{2} \sum_q E_q \quad (\text{II.67})$$

Cet état est séparé par le gap $\min_q(E_q)$ du quasi-continuum (pour $N \gg 1$) formé par les états excités du système, ce gap s'annulant aux deux points $\mu = \pm 2J$. Pour le cas particulier $\Delta = J$, ce gap vaut $||\mu| - 2J|$ (figure II.19).

Structure topologique de ce modèle. Nous constatons que ce problème physique, bien que différent du modèle SSH, donne un hamiltonien \hat{H}_q dans l'espace des moments q qui a une structure similaire, en $-\mathbf{h}(q) \cdot \hat{\sigma}$. En particulier, la recherche des phases topologiques peut se faire en analysant la trajectoire du vecteur $\mathbf{h}(q)$ quand q parcourt la zone de Brillouin. Plus précisément, on voit sur (II.63) que le vecteur \mathbf{h} se trouve toujours dans un plan (ici yz), de sorte que la discussion est formellement identique à

5. On notera que dans l'espace des moments, la symétrie particule-trou consiste à assimiler la création d'une quasi-particule d'énergie $+E_q$ et de moment $+q$ avec la destruction d'une quasi-particule d'énergie $-E_q$ et de moment $-q$.

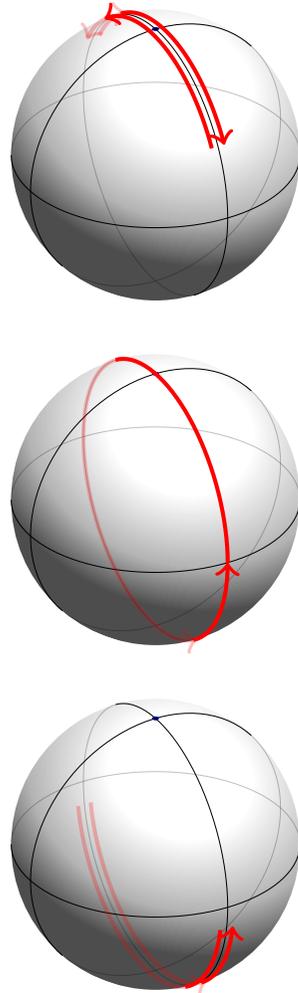


FIGURE II.20. Trajectoire du vecteur $\mathbf{n}(q) = \mathbf{h}(q)/|\mathbf{h}(q)|$ sur la sphère unité quand q parcourt la zone de Brillouin. Quand $\mu > 2J$ (haut) ou $\mu < -2J$ (bas), le nombre d'enroulement est nul et on s'attend à une phase normale. En revanche pour $|\mu| < 2J$ (milieu), le vecteur \mathbf{n} s'enroule autour de la sphère et on s'attend à trouver une phase topologique.

celle du modèle SSH. Puisque le spectre des excitations est donné par les E_q [eq. (II.64)], il présente toujours un gap sauf pour $|\mu| = 2J$ (en ce point, l'excitation pour $qa = 0$ ou π est d'énergie nulle). On peut donc s'attendre à observer deux phases topologiquement différentes (figure II.20) :

- Pour $\mu > 2J$ (chaîne à remplissage élevé) ou $\mu < -2J$ (remplissage faible), la trajectoire du vecteur $\mathbf{h}(q)$ n'entoure pas l'origine. C'est la phase *supraconducteur normal* pour laquelle on n'attend pas d'états de bord protégés topologiquement aux extrémités d'une chaîne finie.
- Pour $|\mu| < 2J$ (chaîne à remplissage "moyen"), la trajectoire du vecteur $\mathbf{h}(q)$ entoure l'origine avec un enroulement de 2π quand q parcourt la zone de Brillouin. Cela correspond à la phase *supraconducteur topologique*. Nous verrons au paragraphe suivant que pour une chaîne finie, cette phase donne naissance à des modes localisés aux deux extrémités de la chaîne.

Ces deux phases ne peuvent être connectées qu'en passant à travers le point singulier $|\mu| = 2J$ où le gap entre les deux bandes d'énergie s'annule.

4 Les modes de Majorana

Le but de cette dernière partie est double. D'une part, nous voulons montrer que la correspondance "cœur-bord" déjà trouvée pour le modèle SSH existe également pour le modèle de Kitaev ; pour cela, nous allons vérifier que la phase topologique que nous pressentons pour $|\mu| < 2J$ conduit bien à des états de bord qui sont absents en dehors de cette phase. D'autre part, nous souhaitons examiner la structure très particulière de ces modes de bord et montrer qu'ils présentent, du fait de leur nature collective, une robustesse spectaculaire qui en fait des candidats très sérieux pour le traitement quantique de l'information.

Pour simplifier notre analyse, nous allons nous concentrer dans toute cette partie sur le cas particulier

$$\Delta = J, \quad (\text{II.68})$$

déjà considéré sur la figure II.19 et qui va nous permettre de mener les calculs analytiquement.

4-1 La chaîne de Kitaev ouverte

Considérons une chaîne à N sites, avec des conditions aux limites qui peuvent être choisies ouvertes ou périodiques. Pour une chaîne ouverte, on perd la propriété de périodicité et on ne peut donc pas rechercher les états propres et leur énergies à l'aide du théorème de Bloch. Il nous faut revenir à la méthode générale de Bogoliubov–de Gennes et, pour une chaîne à N sites, diagonaliser numériquement la matrice $\hat{\mathcal{H}}_{\text{BdG}}$ de taille $2N \times 2N$. En pratique, nous allons considérer une chaîne de $N = 20$ sites, ce qui est suffisant pour dégager les points les plus importants.

Pour vérifier la cohérence de notre approche, commençons par prendre des conditions aux limites périodiques pour cette chaîne (figure II.21, haut). Pour chaque valeur de μ , on trouve alors $2N$ valeurs propres qui s'insèrent parfaitement dans les bandes d'énergie trouvées pour la chaîne infinie (figure II.19). On retrouve notamment la fermeture du gap aux deux points $\mu = \pm 2J$.

Passons maintenant au cas d'une chaîne ouverte. La variation des $2N$ valeurs propres en fonction de μ est montrée en figure II.21, bas. L'allure de ce spectre est voisine de celle trouvée pour des conditions aux limites périodiques, à une différence (majeure!) près : dans la zone pressentie "topologique" $|\mu| < 2J$, on voit apparaître une paire de valeurs propres $(E, -E)$ avec E très proche de 0, donc au centre du gap trouvé pour la chaîne infinie. L'examen des vecteurs propres correspondant confirme qu'il s'agit de modes localisés au voisinage des extrémités de la chaîne. Nous allons maintenant étudier plus en détail ces modes de bord, en nous concentrant sur le point particulier $\mu = 0$, au centre de la zone topologique.

4-2 L'état fondamental pour $\mu = 0$

Ce cas particulier, simple à traiter, a été mis en avant par KITAEV (2001) car il permet un traitement analytique complet du problème. Constatons tout d'abord que ce cas conduit à un spectre d'énergie plat pour une chaîne infinie, puisque le vecteur \mathbf{h} vaut alors :

$$\mathbf{h}(q) = 2J(\sin(qa) \mathbf{u}_y + \cos(qa) \mathbf{u}_z) \Rightarrow E_q = |\mathbf{h}(q)| = 2J. \quad (\text{II.69})$$

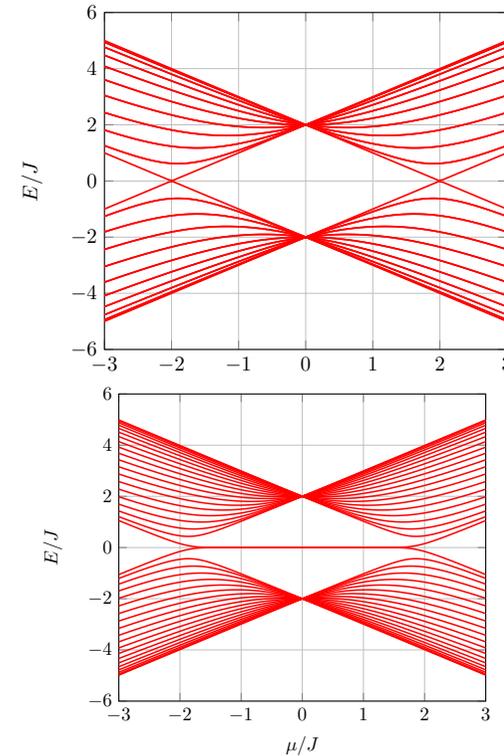


FIGURE II.21. Spectre des quasi-particules pour la chaîne de Kitaev pour $\Delta = J$ et pour une chaîne de $N = 20$ sites avec des conditions aux limites périodiques (haut) et ouvertes (bas). Dans le dernier cas, un mode $(E, -E)$ d'énergie quasi-nulle (Majorana) apparaît entre $\mu = -2J$ et $\mu = 2J$.

Ce point se vérifie directement sur la figure II.19, puisque les deux bandes d'énergies sont réduites chacune à un point pour la valeur $\mu = 0$.

Passons maintenant à une chaîne ouverte finie comportant N sites, pour laquelle l'hamiltonien s'écrit

$$\begin{aligned}\hat{H} &= J \sum_{j=1}^{N-1} \left(-\hat{a}_j^\dagger \hat{a}_{j+1} - \hat{a}_{j+1}^\dagger \hat{a}_j + \hat{a}_j \hat{a}_{j+1} + \hat{a}_{j+1}^\dagger \hat{a}_j^\dagger \right) \\ &= J \sum_{j=1}^{N-1} \left(\hat{a}_j - \hat{a}_j^\dagger \right) \left(\hat{a}_{j+1} + \hat{a}_{j+1}^\dagger \right)\end{aligned}\quad (\text{II.70})$$

D'une manière remarquable, il est possible de trouver analytiquement les états propres et les énergies de cet hamiltonien. Introduisons pour cela les N nouveaux opérateurs :

$$\hat{b}_j = \frac{i}{2} \left(\hat{a}_j^\dagger - \hat{a}_j + \hat{a}_{j+1}^\dagger + \hat{a}_{j+1} \right) \quad \text{pour } j = 1, \dots, N-1 \quad (\text{II.71})$$

$$\hat{b}_N = \frac{i}{2} \left(\hat{a}_N^\dagger - \hat{a}_N + \hat{a}_1^\dagger + \hat{a}_1 \right). \quad (\text{II.72})$$

Ce nouvel ensemble d'opérateurs $\{\hat{b}_j\}$ et leurs conjugués hermitiques $\{\hat{b}_j^\dagger\}$ vérifient les deux propriétés importantes suivantes :

- Les N paires d'opérateurs $\{\hat{b}_j, \hat{b}_j^\dagger\}$ satisfont les règles de commutation canoniques pour des fermions :

$$\hat{b}_i \hat{b}_j = -\hat{b}_j \hat{b}_i \quad \text{si } i \neq j, \quad \hat{b}_i \hat{b}_j^\dagger + \hat{b}_j^\dagger \hat{b}_i = \delta_{i,j}. \quad (\text{II.73})$$

Le passage

$$\{\hat{a}_j, \hat{a}_j^\dagger\} \longrightarrow \{\hat{b}_j, \hat{b}_j^\dagger\} \quad (\text{II.74})$$

est donc sur le plan mathématique une simple transformation unitaire de changement de base.

- Les opérateurs $\{\hat{b}_j, \hat{b}_j^\dagger\}$ "diagonalisent" l'hamiltonien (II.43), puisqu'il s'écrit

$$\hat{H} = \sum_{j=1}^N E_j \left(\hat{b}_j^\dagger \hat{b}_j - \frac{1}{2} \right) \quad (\text{II.75})$$

avec

$$E_j = 2J \quad \text{pour } j = 1, \dots, N-1 \quad (\text{II.76})$$

$$E_N = 0. \quad (\text{II.77})$$

Pour ce cas particulier, on a donc réalisé de manière analytique le programme de recherche des modes propres de l'hamiltonien quadratique, énoncé de manière générale en § 3-2.

Puisque toutes les énergies E_j sont positives ou nulles, un état fondamental $|\psi_0\rangle$ de \hat{H} est obtenu en laissant vides tous les modes de quasi-particules $(\hat{b}_j, \hat{b}_j^\dagger)$, c'est-à-dire en résolvant

$$\hat{b}_j |\psi_0\rangle = 0, \quad j = 1, \dots, N. \quad (\text{II.78})$$

Ce système d'équations admet une solution unique $|\psi_0\rangle$. Pour une chaîne à 4 sites, cette solution s'écrit dans la base des nombres d'occupation

$$\begin{aligned}\sqrt{8} |\psi_0\rangle &= |1000\rangle + |0100\rangle + |0010\rangle + |0001\rangle \\ &+ |1110\rangle + |1101\rangle + |1011\rangle + |0111\rangle.\end{aligned}\quad (\text{II.79})$$

C'est une superposition à amplitudes égales des 2^{N-1} états à nombre d'occupation impair. On peut vérifier, au prix d'un calcul un peu fastidieux, que cette forme se généralise à une chaîne de longueur N (paire) quelconque.

Si toutes les énergies E_j étaient strictement positives, cet état fondamental serait unique et les $2^N - 1$ états excités de la chaîne seraient obtenus en occupant les modes de quasi-particules, par action des opérateurs \hat{b}_j^\dagger sur $|\psi_0\rangle$. Mais nous devons prendre en compte le fait que $E_N = 0$. L'état obtenu par action de \hat{b}_N^\dagger sur $|\psi_0\rangle$

$$|\psi_1\rangle = \hat{b}_N^\dagger |\psi_0\rangle \quad (\text{II.80})$$

a donc la même énergie que $|\psi_0\rangle$, ce qui signifie que le niveau fondamental est doublement dégénéré, une base possible étant $\{|\psi_0\rangle, |\psi_1\rangle\}$. On remarquera que les états $|\psi_0\rangle$ et $|\psi_1\rangle$ correspondent à des parités différentes du nombre total de fermions sur la chaîne. Par exemple, pour la chaîne à 4 sites mentionnée plus haut, on a

$$\begin{aligned}\sqrt{8} |\psi_1\rangle &= |1100\rangle + |1010\rangle + |1001\rangle + |0110\rangle + |0101\rangle + |0011\rangle \\ &+ |0000\rangle + |1111\rangle\end{aligned}\quad (\text{II.81})$$

c'est-à-dire la superposition à amplitudes égales de tous les états à nombre pair de particules. Cette forme se généralise également à une chaîne de longueur N (paire) quelconque.

La situation est donc différente de celle d'un supraconducteur habituel, pour lequel l'état fondamental est non-dégénéré et représente un condensat de paires de Cooper, donc une superposition d'états avec un nombre pair de fermions.

Rappelons par ailleurs que ce niveau fondamental dégénéré est séparé par le gap $2J$ des premiers états excités. Ces derniers sont obtenus en faisant agir sur un des deux états fondamentaux $|\psi_{0,1}\rangle$ l'opérateur création \hat{b}_j^\dagger d'une quasi-particule pour un des modes $j = 1, \dots, N-1$. Ce gap correspond bien au résultat attendu à partir de l'analyse faite en § 3 pour une chaîne infinie.

4-3 Les opérateurs de Majorana

Dans ce dernier paragraphe, nous allons discuter la nature très particulière du niveau fondamental trouvé précédemment, liée à sa dégénérescence $\{|\psi_0\rangle, |\psi_1\rangle\}$ et au fait que l'opérateur \hat{b}_N permettant de passer de l'un à l'autre de ces états :

$$|\psi_1\rangle = \hat{b}_N^\dagger |\psi_0\rangle, \quad |\psi_0\rangle = \hat{b}_N |\psi_1\rangle \quad (\text{II.82})$$

est délocalisé entre les deux extrémités de la chaîne :

$$\hat{b}_N = \frac{i}{2} (\hat{a}_N^\dagger - \hat{a}_N + \hat{a}_1^\dagger + \hat{a}_1). \quad (\text{II.83})$$

Cette délocalisation, associée à la symétrie particule-trou, entraîne une grande robustesse du niveau fondamental vis à vis de perturbations extérieures, à contraster avec la fragilité trouvée pour la chaîne SSH. Pour lever la dégénérescence de ce niveau fondamental, il faut en effet transformer le mode d'énergie nulle de $\hat{\mathcal{H}}_{\text{BdG}}$ en une paire de modes $(E, -E)$ avec $E > 0$. Cela ne peut se faire qu'en agissant simultanément et de manière cohérente aux deux extrémités de la chaîne.

Pour mieux comprendre ce point essentiel, il est intéressant d'introduire pour chaque site j de la chaîne les deux opérateurs

$$\hat{\gamma}_{j,+} = \hat{a}_j + \hat{a}_j^\dagger, \quad \hat{\gamma}_{j,-} = i (\hat{a}_j^\dagger - \hat{a}_j). \quad (\text{II.84})$$

Chacun de ces $2N$ opérateurs est hermitien : $\hat{\gamma}^\dagger = \hat{\gamma}$. Si l'on avait affaire à des bosons, ces opérateurs ne seraient autres (à un facteur $\sqrt{2}$ près) que les opérateurs position et impulsion associés à l'algèbre d'oscillateur harmonique $\{\hat{a}_j, \hat{a}_j^\dagger\}$. Pour des fermions, les propriétés de ces opérateurs sont notablement différentes. On remarque d'abord qu'ils vérifient les règles de commutation canoniques ($\sigma = \pm$)

$$\hat{\gamma}_{j,\sigma} \hat{\gamma}_{j',\sigma'} = -\hat{\gamma}_{j',\sigma'} \hat{\gamma}_{j,\sigma} \quad \text{si } (j, \sigma) \neq (j', \sigma'). \quad (\text{II.85})$$

Par ailleurs, on trouve pour le carré de ces opérateurs

$$\hat{\gamma}^2 = \hat{\gamma}^\dagger \hat{\gamma} = \hat{1}. \quad (\text{II.86})$$

Si l'on interprète un opérateur $\hat{\gamma}_{j,\sigma}$ comme l'opérateur création d'une quasi-particule, la relation (II.86) indique que cette particule est sa propre anti-particule. On arrive donc à une description formellement similaire à celle introduite par MAJORANA (1937). Partant de l'équation de Dirac, qui décrit un champ complexe dans lequel particules et antiparticules jouent des rôles distincts, Majorana avait suggéré de séparer cette équation en deux parties, décrivant chacune l'évolution d'un champ réel pour lequel particules et antiparticules sont confondues. Par analogie, les opérateurs $\hat{\gamma}$ introduits ici sont donc appelés *opérateurs de Majorana*. Il y a bien sûr une différence essentielle entre les particules fondamentales auxquelles Majorana pensait appliquer sa théorie (le neutrino reste un candidat potentiel) et les modes qui apparaissent ici, qui sont des quasi-particules émergentes fabriquées à partir de fermions "normaux", des électrons dans une expérience de matière condensée ou des atomes neutres dans une expérience de gaz quantique.

L'utilisation des opérateurs $\hat{\gamma}_{j,\pm}$ plutôt que des opérateurs $\hat{a}_j^\dagger, \hat{a}_j$ n'est bien souvent qu'un simple jeu d'écriture. Ainsi l'opérateur donnant l'énergie $\pm \epsilon_j/2$ sur un site j selon qu'il est vide ou occupé s'écrit dans les deux points de vue :

$$\epsilon_j (\hat{a}_j^\dagger \hat{a}_j - 1/2) = \frac{i}{2} \epsilon_j \hat{\gamma}_{j,+} \hat{\gamma}_{j,-} \quad (\text{II.87})$$

Une perturbation locale se décrit donc comme produit d'opérateurs de Majorana voisins.

Revenons maintenant à la chaîne de Kitaev. Son hamiltonien (II.70)

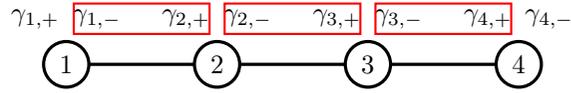


FIGURE II.22. Couplages entre modes de Majorana voisins correspondant à l'hamiltonien (II.88) pour une chaîne de $N = 4$ sites. Les deux modes extrêmes $\hat{\gamma}_{1,+}$ et $\hat{\gamma}_{N,-}$ ne sont pas couplés.

s'écrit en fonction des opérateurs de Majorana

$$\hat{H} = iJ \sum_{j=1}^N \hat{\gamma}_{j,-} \hat{\gamma}_{j+1,+} \quad (\text{II.88})$$

c'est-à-dire un couplage entre le mode $\hat{\gamma}_-$ de chaque site j au mode $\hat{\gamma}_+$ du site $j + 1$ (figure II.22). Remarquons que les deux opérateurs extrêmes $\hat{\gamma}_{1,+}$ et $\hat{\gamma}_{N,-}$ ne contribuent pas à cette expression.

Intéressons nous maintenant à une perturbation à \hat{H} et à son influence au premier ordre de la théorie des perturbations sur le niveau fondamental. Pour lever la dégénérescence de ce niveau, la perturbation doit contenir un terme en

$$\hat{V} = \epsilon \hat{b}_N^\dagger \hat{b}_N + \dots \quad \text{avec} \quad \hat{b}_N = \frac{1}{2} (\hat{\gamma}_{N,-} + i\hat{\gamma}_{1,+}) \quad (\text{II.89})$$

L'écriture en termes d'opérateurs de Majorana est alors pertinente car elle révèle immédiatement le caractère nécessairement non local de \hat{V} :

$$\hat{V} = \frac{i}{2} \epsilon \hat{\gamma}_{N,-} \hat{\gamma}_{1,+} + \dots \quad (\text{II.90})$$

Il faut donc agir de manière cohérente aux deux extrémités de la chaîne pour lever la dégénérescence entre $|\psi_0\rangle$ et $|\psi_1\rangle$. Une perturbation locale n'aura pas d'influence sur ce niveau fondamental, ce qui est à l'origine de sa robustesse.

Insistons sur le fait que ces deux modes de Majorana localisés chacun à une extrémité de la chaîne décrivent une seule excitation fermionique, avec le mode \hat{b}_N qui peut être vide ou occupé ; on parle ainsi de quasi-particule fractionnaire à propos de ces modes. Cette situation est à contraster avec celle trouvée plus haut dans le modèle SSH, pour lequel on avait un mode

(bosonique ou fermionique) localisé à chaque extrémité de la chaîne, chacun de ces deux modes pouvant être vide ou occupé (soit 4 possibilités pour des fermions sans spin, toutes d'énergie quasi-nulle).

Le fait que nous ayons considéré un modèle sans spin est essentiel pour arriver à ce mode fermionique unique. Si les fermions considérés ici avaient un spin 1/2, ceci doublerait le nombre de modes et conduirait à deux modes de Majorana à chaque extrémité. Un couplage spin-orbite pourrait alors coupler ces deux modes pour en faire une excitation fermionique "normale" et on retrouverait une situation semblable à celle du modèle SSH.

L'existence d'un niveau fondamental dégénéré et protégé du reste des niveaux d'énergie par un gap ouvre des possibilités nouvelles dans le cadre du traitement quantique de l'information. Considérons un réseau de n chaînes de Kitaev, ayant chacune un niveau fondamental deux fois dégénéré. Le niveau fondamental du réseau est dégénéré 2^n fois⁶ et une évolution adiabatique à l'intérieur de ce niveau donne naissance à une statistique non abélienne quand les modes de Majorana sont mélangés entre eux (ALICEA, OREG et al. 2011 ; ALICEA 2012).

La recherche de ces modes de Majorana dans des supraconducteurs topologiques fait actuellement l'objet d'une activité intense en physique de la matière condensée, avec les premières indications expérimentales décrites par MOURIK, ZUO et al. (2012) dans un nanofil d'antimoniure d'indium au voisinage d'une électrode supraconductrice et d'une électrode normale, et par NADJ-PERGE, DROZDOV et al. (2014) dans une chaîne d'atomes de fer déposés à la surface d'un supraconducteur. Nous ne les décrivons pas ici et nous renvoyons le lecteur intéressé à un des articles les plus récents sur le sujet, ZHANG, YAJI et al. (2018), et aux références qu'il contient.

Dans le cadre de la physique atomique, aucune réalisation expérimentale n'a encore été publiée, mais des propositions concrètes sont en cours de réalisation dans des différents laboratoires (ZHANG, TEWARI et al. 2008a ; NASCIMBENE 2013 ; YAN, WAN et al. 2015), y compris dans un environnement dissipatif (BARDYN, BARANOV et al. 2012). Signalons également la question importante de la transposition du modèle de Kitaev, dans lequel

6. ou plutôt 2^{n-1} fois si on ne considère que des opérations qui conservent la parité du nombre total de fermions sur les chaînes. Il faut donc au moins $n = 2$ chaînes pour réaliser de telles opérations.

le nombre de particules n'est pas conservé, à un système isolé où le nombre de particules est fixé, plus proche de ce qui est réalisé dans une expérience d'atomes froids; ainsi, IEMINI, MAZZA et al. (2015) ont proposé un modèle exactement soluble de cette nature dans lequel des modes d'énergie nulle et similaires aux modes de Majorana peuvent émerger (voir aussi RUHMAN, BERG et al. (2015)).

Appendice 1 : la chaîne SSH semi-infinie

Le système d'équations (II.29-II.30) peut s'écrire sous forme matricielle pour $j \geq 1$:

$$\begin{pmatrix} a_{j+1} \\ b_{j+1} \end{pmatrix} = \hat{M} \begin{pmatrix} a_j \\ b_j \end{pmatrix}, \quad (\text{II.91})$$

avec

$$\hat{M} = \begin{pmatrix} -J'/J & -E/J \\ E/J & E^2/(JJ') - J/J' \end{pmatrix} \quad (\text{II.92})$$

et la condition initiale (à un facteur de normalisation près) :

$$\begin{pmatrix} a_1 \\ b_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} J' \\ -E \end{pmatrix}. \quad (\text{II.93})$$

La matrice réelle \hat{M} est de déterminant 1 et sa trace vaut

$$T = \frac{E^2 - J^2 - J'^2}{JJ'}. \quad (\text{II.94})$$

Deux cas sont possibles pour les valeurs propres λ_{\pm} de cette matrice. Elles sont

- complexes de module 1 si le discriminant du polynôme caractéristique $\lambda^2 - T\lambda + 1$ est négatif ou nul, c'est-à-dire si $|T| \leq 2$. Il faut pour cela que l'énergie soit dans une des deux bandes d'énergie de la chaîne complète, eq. (II.6).
- réelles et telles que $|\lambda_-| < 1$, $|\lambda_+| > 1$ si le discriminant est strictement positif.

Une fois connus les valeurs propres λ_{\pm} et les vecteurs propres correspondants \mathbf{V}_{\pm} , on peut écrire la solution du système sous la forme

$$\begin{pmatrix} a_j \\ b_j \end{pmatrix} = \lambda_-^j \mathbf{V}_- + \lambda_+^j \mathbf{V}_+. \quad (\text{II.95})$$

Dans le premier cas, on peut écrire les valeurs propres sous la forme $e^{\pm iqa}$ et on trouve la solution "onde stationnaire" mentionnée dans le texte, avec des coefficients a_j et b_j dont le module reste borné et d'ordre 1 quand $j \rightarrow \infty$.

Dans le second cas, il faut impérativement annuler la contribution de la valeur propre λ_+ à l'expression (II.95) pour les coefficients a_j et b_j ne divergent pas à l'infini. Ceci impose que le vecteur (a_1, b_1) donné en (II.93) soit lui-même état propre de \hat{M} avec la valeur propre λ_- . Il suffit alors d'écrire que

$$\hat{M} \begin{pmatrix} a_1 \\ b_1 \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad \begin{pmatrix} a_1 \\ b_1 \end{pmatrix} \quad \text{sont colinéaires} \quad (\text{II.96})$$

pour arriver à la condition $EJ = 0$, donc $E = 0$.

Appendice 2 : topologie et symétries

Nous avons vu apparaître dans ce cours deux symétries pertinentes pour aborder les problèmes de topologie, la symétrie de sous-réseau (encore appelée symétrie chirale) et la symétrie particule-trou. Nous allons brièvement indiquer dans cet appendice comment ce type de symétrie peut conduire à une classification systématique des phases topologiques de la matière. Rappelons que les symétries qui interviennent ici ne sont pas les symétries géométriques habituelles, liées par exemple aux invariances par translation et par rotation. Ces symétries géométriques ne sont par définition pas adaptées pour décrire des invariances topologiques : une orange ou un ballon de rugby sont topologiquement équivalents à une sphère, mais ils ne sont pas invariants par rotation.

Mathématiquement, les symétries géométriques sont décrites par un opérateur unitaire \hat{U} qui commute avec l'hamiltonien \hat{H} , ce qui permet de trouver une base propre commune à ces deux opérateurs. La formulation mathématique est différente pour la classification topologique, soit parce que les opérateurs en jeu ne sont pas unitaires mais anti-unitaires, soit parce que leur lien avec l'hamiltonien ne sera pas une relation de commutation, mais d'anti-commutation.

A la base de la classification des isolants et des supraconducteurs topologiques, on trouve deux symétries discrètes (pour une description dé-

taillée, on pourra consulter l'article de revue très complet de CHIU, TEO et al. (2016)) :

- L'invariance par renversement du temps, décrite par un opérateur anti-unitaire $\hat{\mathcal{T}}$. L'opération de renversement du sens du temps consiste à garder les positions des particules inchangées et à renverser la direction de leur vitesse, donc de leur moment cinétique (orbital ou de spin). Un hamiltonien est invariant par renversement du temps si

$$\hat{H}\hat{\mathcal{T}} = \hat{\mathcal{T}}\hat{H}, \quad (\text{II.97})$$

opération qui se traduit donc par un commutateur "traditionnel" avec l'hamiltonien, mais pour un opérateur $\hat{\mathcal{T}}$ qui n'est pas unitaire comme pour les invariances géométriques, mais anti-unitaire. Pour une particule sans spin, l'opérateur renversement du temps est simplement la conjugaison complexe \hat{K}_0 :

$$\hat{K}_0 \psi(x) = \psi^*(x) \quad (\text{II.98})$$

qui a en particulier comme effet de transformer une onde plane $e^{ipx/\hbar}$ (impulsion p) en l'onde plane $e^{-ipx/\hbar}$, (impulsion $-p$). Dans ce cas sans spin, l'action de $\hat{\mathcal{T}}^2$ est toujours $+1$ pour un système invariant par renversement du temps. Quand on prend en compte le spin des particules, on montre que l'action de $\hat{\mathcal{T}}^2$ sur un état propre d'un hamiltonien satisfaisant (II.97) peut être $+1$ ou -1 (MESSIAH 2003). Pour cette opération, on a donc trois possibilités : $+1$ ou -1 par action de $\hat{\mathcal{T}}^2$, ou alors absence de symétrie.

- Pour des assemblées de fermions, la symétrie "particule-trou" consiste à échanger les rôles des opérateurs *création d'une particule au point r* et *destruction d'une particule au point r* . Nous avons vu cette symétrie apparaître dans le cadre de la méthode de Bogoliubov–de Gennes, où elle se décrit par l'opérateur anti-unitaire \hat{C} qui anti-commute avec l'hamiltonien \hat{H}_{BdG} (cf. § 3-3) :

$$\hat{H}_{\text{BdG}}\hat{C} = -\hat{C}\hat{H}_{\text{BdG}}. \quad (\text{II.99})$$

On trouve là aussi que l'action de $\hat{C}^2 = \pm 1$ quand la symétrie est présente.

On aboutit donc à $3 \times 3 = 9$ cas possibles, selon que ces deux symétries sont présentes ou non, et le signe ± 1 qui est associé à leur carré quand elles sont présentes.

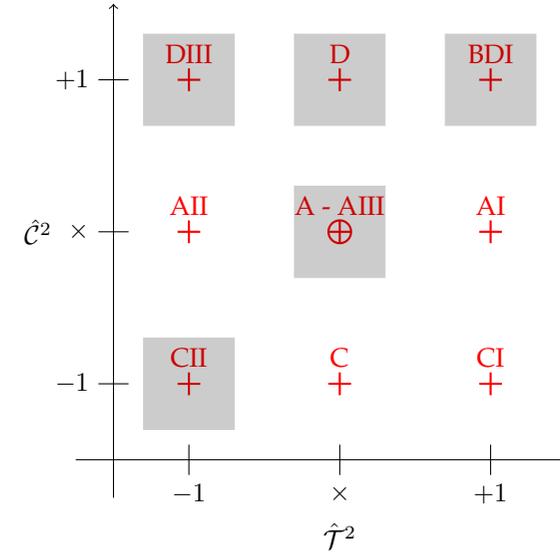


TABLE II.1. Classification en dix possibilités pour les hamiltoniens décrivant les isolants et les supraconducteurs topologiques. Le symbole \times indique l'absence de symétrie. Cette classification utilise la nomenclature proposée par Elie Cartan en 1926 pour les espaces symétriques. Les cases surlignées sont celles qui sont réalisables pour les systèmes de dimension 1, avec la classe AIII pour la case centrale, correspondant à la présence de la symétrie chirale.

La symétrie chirale que nous avons trouvée pour le modèle SSH est associée de manière générale au produit $\hat{S} = \hat{\mathcal{T}} \cdot \hat{C}$, qui est un opérateur unitaire (produit de deux anti-unitaires). Elle joue un rôle décisif dans un des neuf cas que nous venons de mentionner, celui où ni \hat{C} , ni $\hat{\mathcal{T}}$ ne sont pertinentes. Deux situations peuvent se produire selon qu'elle est elle-même pertinente ou non. On arrive alors à 10 situations possibles, le fameux *ten-fold way* (table II.1) (CHIU, TEO et al. 2016).

Pour une dimension d'espace donnée, toutes ces possibilités ne sont pas réalisées, mais seulement cinq d'entre elles. Pour la dimension 1 qui nous a intéressés jusqu'ici, il s'agit des possibilités grisées dans la table II.1. L'hamiltonien SSH sans spin que nous avons étudié en § 1 est réel et donc invariant par renversement du temps $\mathcal{T}^2 = +1$. Il respecte par ailleurs (tri-

vialement) la symétrie particule-trou puisqu'il ne contient pas de termes de gap supraconducteur ($\mathcal{C}^2 = +1$) et correspond donc à la classe BDI. Notons qu'il est toujours possible de redéfinir chaque site A_j ou B_j du réseau en multipliant sa phase par $e^{i\alpha_j}$ ou $e^{i\beta_j}$. Ce changement de jauge a pour effet immédiat de rendre les coefficients tunnel complexes (VELASCO & PAREDES 2017). On passe alors à la classe AIII tout en conservant la symétrie chirale. Le modèle de Kitaev que nous avons étudié porte sur des particules sans spin, et nous avons choisi un gap Δ réel. Il vérifie donc lui aussi tel que $\mathcal{C}^2 = +1$ et $\mathcal{T}^2 = +1$. Si le gap est complexe, on perd l'invariance par renversement du temps tout en conservant la symétrie particule-trou (classe D).

Pour terminer, insistons sur le fait que les quelques indications que nous venons de donner, avec les exemples des modèles sans spin SSH et Kitaev, ne constituent qu'un éclairage très partiel de la classification des isolants et supraconducteurs topologiques. Cette dernière ne prend toute sa pertinence qu'en présence du couplage spin-orbite, qui permet de générer des classes de matériau plus riches (et plus complexes !) que celles envisagées ici.

Chapitre III

Les pompes adiabatiques

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 π 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 décrirons 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 2×2 hermitienne. Nous avons déjà eu l'occasion de signaler que ce type de matrice s'écrit de manière géné-

rale comme une combinaison linéaire de l'identité et des trois matrices de Pauli

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

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 θ_q, ϕ_q .

La partie proportionnelle à l'identité, qui fait intervenir l'énergie α_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 (III.1)

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

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

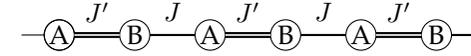
$$|u_q^{(-)}\rangle = \begin{pmatrix} \cos(\theta_q/2) \\ e^{i\phi_q} \sin(\theta_q/2) \end{pmatrix} \quad |u_q^{(+)}\rangle = \begin{pmatrix} \sin(\theta_q/2) \\ -e^{i\phi_q} \cos(\theta_q/2) \end{pmatrix}. \quad (\text{III.3})$$

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 $2\pi/a$:

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

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 parcourant 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 (III.3), nous avons fixé la phase de $|u_q^{(\pm)}\rangle$ en imposant que la première composante était réelle et positive ou



Énergie sur site : $-\Delta \quad +\Delta \quad -\Delta \quad +\Delta \quad -\Delta \quad +\Delta$

FIGURE III.1. Modèle de Rice–Mele

nulle (puisque θ_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 :

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

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

qui peut se mettre sous forme compacte :

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

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 III.1). L'hamiltonien \hat{H}_q devient alors

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

où l'on a posé

$$2\Delta = E_B - E_A. \quad (\text{III.9})$$

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

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

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

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

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

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

Ce modèle comporte bien sûr deux bandes d'énergie

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

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

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

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 :

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

Le premier terme était déjà présent pour le modèle SSH et il donne 0 ou π 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 III.2. Plus précisément, puisqu'une phase est une quantité définie modulo 2π , 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 π 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'écarte 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) : 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 α dépend de la longueur d'onde de la lumière.

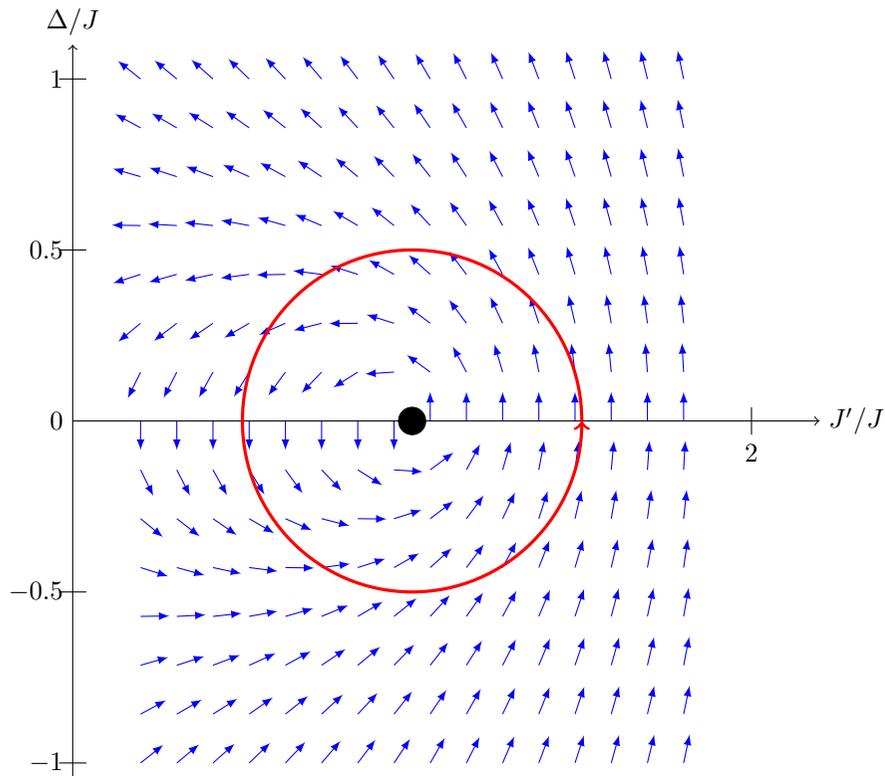


FIGURE III.2. Représentation vectorielle de la phase de Zak $\Phi_{\text{Zak}}^{(-)}$ pour la bande fondamentale du modèle de Rice–Mele. On a tracé en bleu le vecteur unitaire d'angle polaire $\Phi_{\text{Zak}}^{(-)} + \pi/2$ de sorte qu'une phase de Zak nulle (modulo 2π) est représentée par une flèche 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).

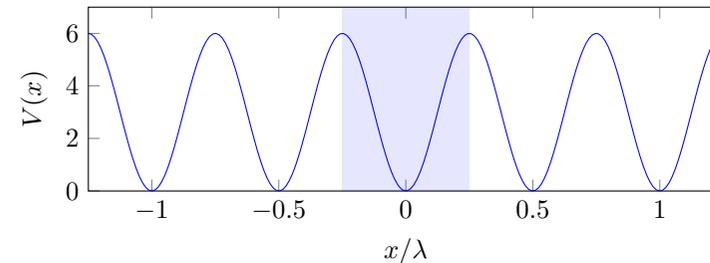


FIGURE III.3. Le potentiel sinusoidal (III.16) de période $a = \lambda/2$ et sa cellule unité.

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

$$V(x) = V_0 \sin^2(kx). \quad (\text{III.16})$$

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 λ sa longueur d'onde. Il impose également une échelle d'énergie, appelée *énergie de recul* :

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

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 :

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

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 :

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

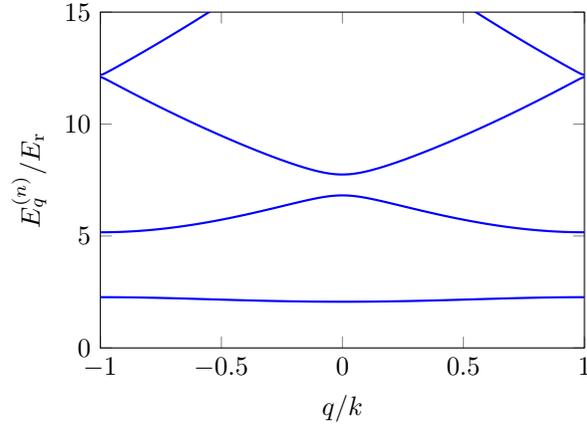


FIGURE III.4. Premières bandes d'énergie pour le réseau sinusoidal avec $V_0 = 6 E_r$.

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) :

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

Nous avons représenté sur la figure III.4 le spectre de bande obtenu pour $V_0 = 6 E_r$. Nous montrons en figure III.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

$$E_q = -2J \cos(qa) \quad (\text{III.21})$$

avec le taux tunnel $J \approx 0.05 E_r$. Notons que la formule (III.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.

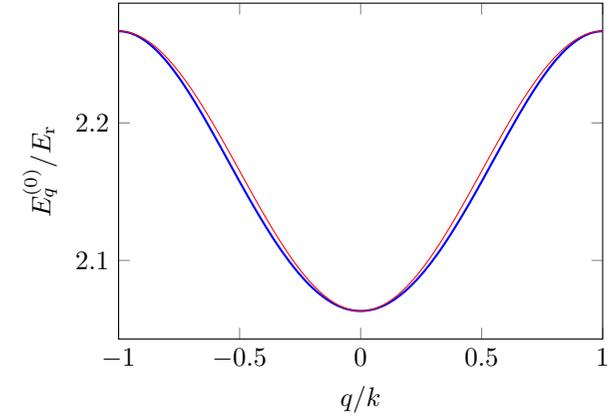


FIGURE III.5. Bleu : bande fondamentale du réseau sinusoidal avec $V_0 = 6 E_r$. Rouge : variation de E_q pour le modèle de Hubbard (III.21) avec $J = 0.05 E_r$ (décalé en énergie de $+2.16 E_r$).

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 III.6, et elle génère le potentiel de période λ :

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

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 λ 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



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

aux points $kx = n\pi$, c'est-à-dire $x = n\lambda/2$, n étant un entier positif ou négatif.

— Un réseau optique *secondaire*, d'intensité plus faible et de longueur d'onde 2λ , 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_{sec} . (supposée petite devant $V_{\text{princ.}}$) et son déphasage spatial ϕ 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 III.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 III.7 (a)];
- Pour $\phi = +\pi/2$, on a au contraire $J' < J$ [figure III.7 (c)];

En basculant la phase ϕ 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

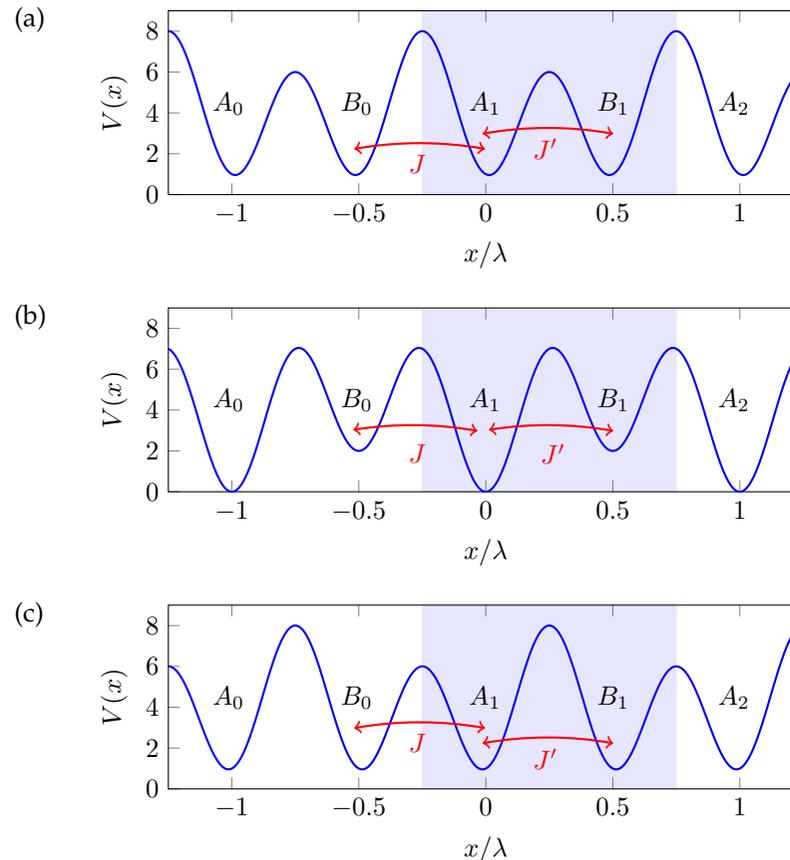


FIGURE III.7. Tracé du potentiel (III.22) du super-réseau permettant de réaliser les différentes phases du modèle Rice–Mele. (a) et (c) correspondent au cas particulier du modèle SSH, avec $\Delta = 0$ et : $\phi = -\pi/2$, $J' > J$ pour (a), $\phi = +\pi/2$, $J' < J$ pour (c). Le cas (b) est obtenu 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.

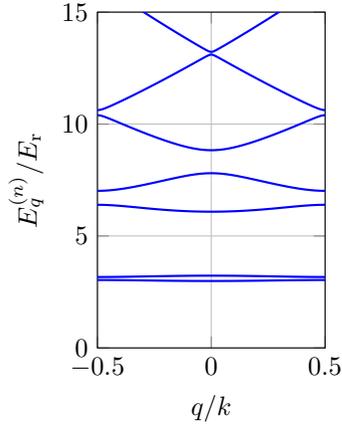


FIGURE III.8. Bandes d'énergie pour le super-réseau (III.22) pour $V_{\text{princ.}} = 6E_r$, $V_{\text{sec.}} = 2E_r$, $\phi = \pm\pi/2$.

figure III.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 ϕ , 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 λ , la zone de Brillouin est $q \in [-k/2, k/2]$. On a représenté ce spectre de bande sur la figure III.8 pour $V_0 = 6E_r$, $V_1 = 2E_r$, avec la phase $\phi = \pi/2$ qui conduit à une situation de SSH¹.

1. Ce spectre est voisin de celui trouvé pour le réseau purement sinusoïdal, si on trace ce dernier en configuration "repliée", obtenue en partant d'une cellule unité de taille λ , et donc une zone de Brillouin deux fois plus petite que celle de la figure III.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' .

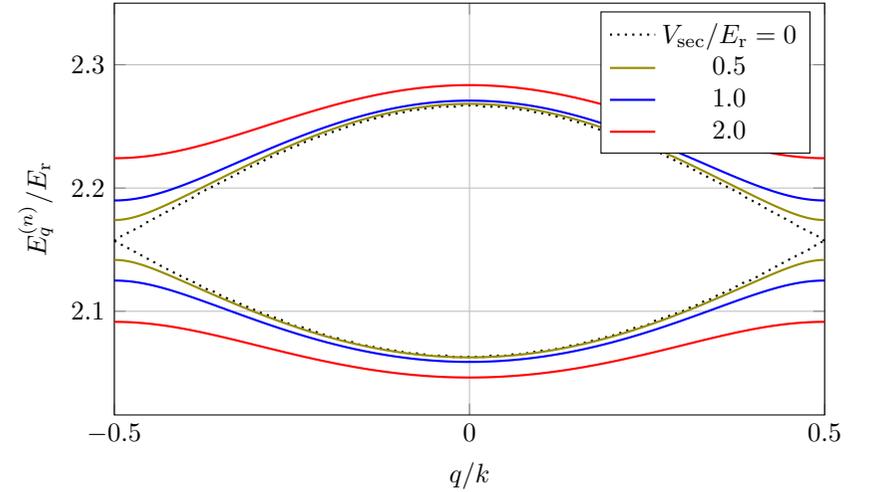


FIGURE III.9. Les deux bandes d'énergie les plus basses pour le super-réseau (III.22), pour $V_{\text{princ.}} = 6E_r$ et différentes valeurs de $V_{\text{sec.}}$. On a choisi $\phi = \pm\pi/2$, correspondant à la réalisation du modèle SSH. On a décalé l'énergie des paires de bandes pour $V_{\text{sec.}}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

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

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

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' .

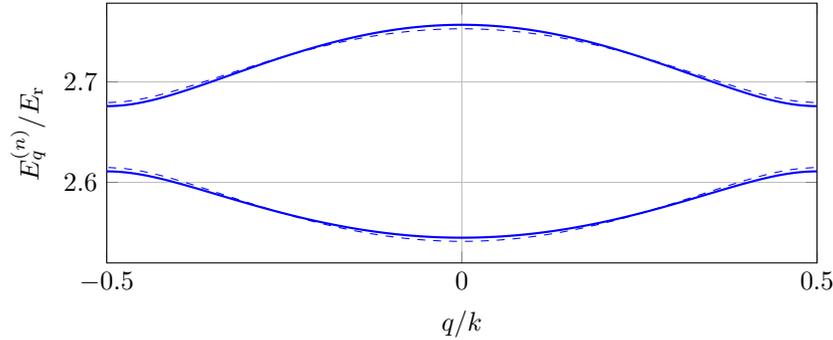


FIGURE III.10. *Trait plein : bandes d'énergie les plus basses obtenues pour $V_{\text{princ.}} = 6E_r$ et $V_{\text{sec.}} = E_r$. On a pris $\phi = \pi/2$, correspondant à la réalisation du modèle SSH. Tireté : prédiction (III.23) pour le modèle SSH pour $J = 0.069 E_r$, $J' = 0.037 E_r$ (avec un décalage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

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 $\{A_j, B_j\}$ 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 :

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

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 III.7.
- On applique une force faible F aux atomes qui leur fait parcourir la

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 :

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

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

$$q(t_B) \equiv q_f = q_i + 2\pi/\lambda \quad (\text{III.26})$$

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 III.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 précédent :

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

- 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 2π indiqué en (III.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

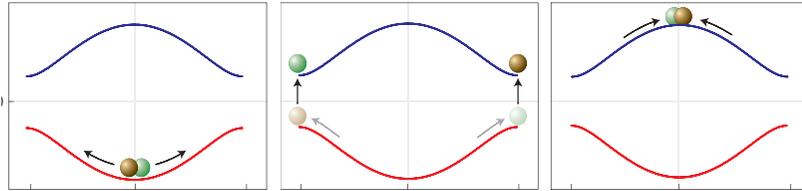


FIGURE III.11. Protocole suivi par ATALA, AIDELSBURGER et al. (2013) pour mesurer la phase de Zak dans le cadre du modèle SSH, réalisé avec un super-réseau et une séquence d'impulsions micro-onde $\pi/2-\pi-\pi/2$.

lié aux fluctuations du champ magnétique, on inverse simultanément les deux états $|\uparrow\rangle$ et $|\downarrow\rangle$ grâce à une impulsion micro-onde π , 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 π (à 3% près), en accord avec la topologie attendue pour le modèle SSH (figure III.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 (III.15) tracée en figure III.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).

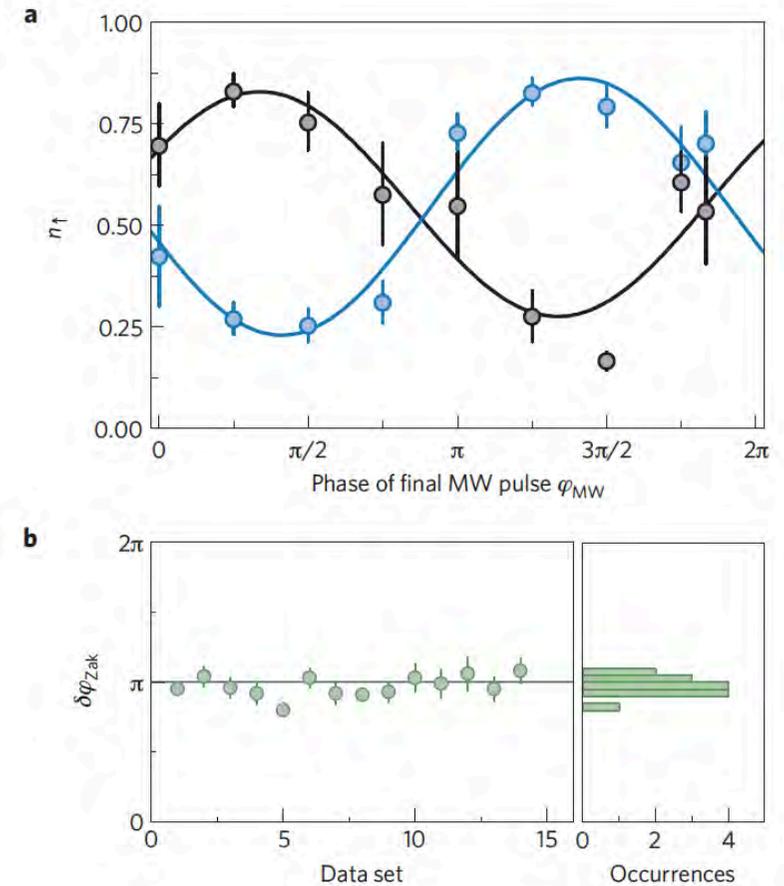


FIGURE III.12. Haut : résultat obtenu par ATALA, AIDELSBURGER et al. (2013) pour la mesure du taux d'occupation de l'état $|\uparrow\rangle$ après la séquence décrite dans le texte. Les points bleus ont été obtenus en basculant ϕ de $-\pi/2$ à $\pi/2$ et les points noirs correspondent au cas où ϕ n'a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

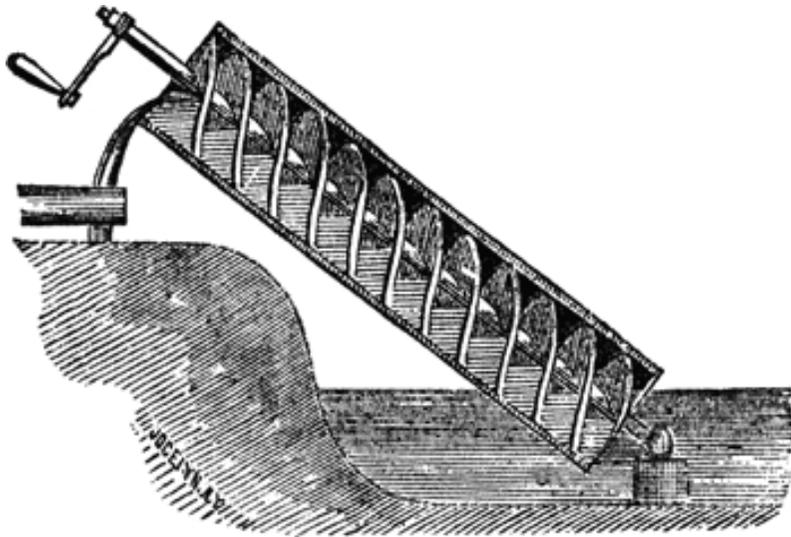


FIGURE III.13. Un exemple de pompe adiabatique (classique) : la vis d'Archimède (figure : Wikipedia).

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 III.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

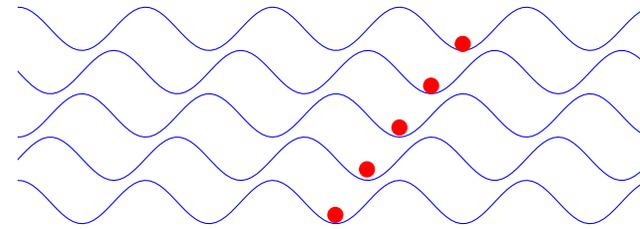


FIGURE III.14. Transport adiabatique par simple translation d'un réseau.

manière simple si l'on dispose de fermions polarisés. Si on s'intéresse à la 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

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

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 ϕ de 0 à π , tous les minima se décalent d'une période a du réseau et le déplacement de la particule est donc égal à a (figure III.14).

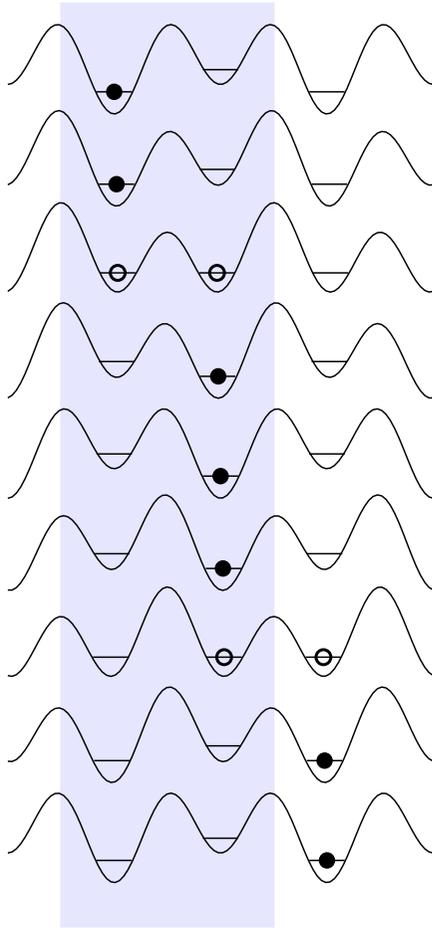


FIGURE III.15. Déplacement quantifié d'une particule localisée initialement sur un site A lors de la déformation du potentiel de super-réseau (III.29) engendrée par la variation de ϕ de 0 à 2π . Une particule initialement située sur un site B se déplacerait dans le sens opposé.

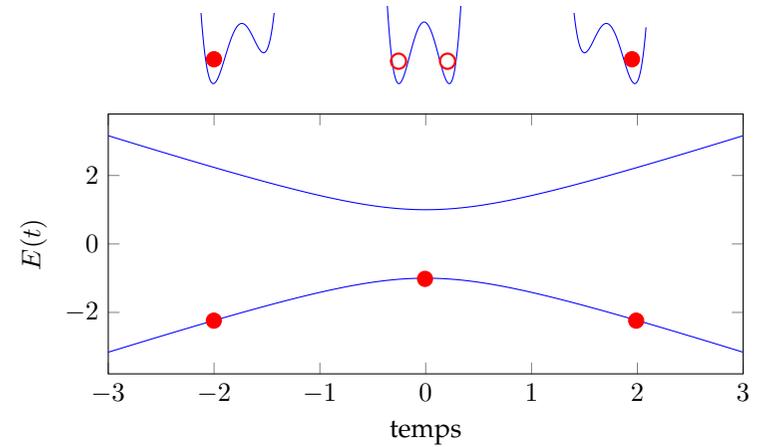


FIGURE III.16. Passage adiabatique d'un site à l'autre d'un double puits quand on change lentement l'énergie relative des deux minima de potentiel.

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 $a = 2\pi/k$:

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

en faisant varier uniquement la phase ϕ . La déformation correspondante est représentée sur la figure III.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 III.16).

La série de dessins de la figure III.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 ϕ a augmenté de 2π . Dans

le même temps, une particule initialement sur le site B_j se retrouve sur le 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-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}Yb piégés dans une série de tubes verticaux indépendants (figure III.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 ϕ dans (III.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 ~ 0.7 par état de spin au centre du nuage. On ne

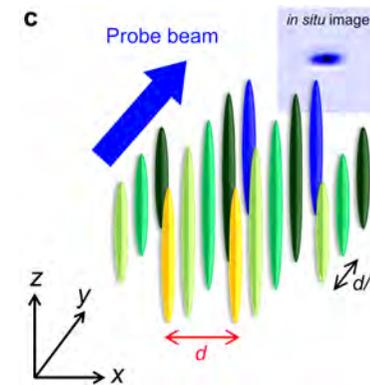


FIGURE III.17. Série de tubes verticaux indépendants. Le potentiel de super-réseau est appliqué le long de l'axe z . Figure extraite de NAKAJIMA, TOMITA *et al.* (2016), *sup.mat.*

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 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 III.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_{princ} et de varier linéairement dans le temps la phase ϕ . Le déplacement mesuré est représenté sur la figure III.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 ϕ augmente de 2π .

La seconde expérience a consisté à appliquer une déformation péri-

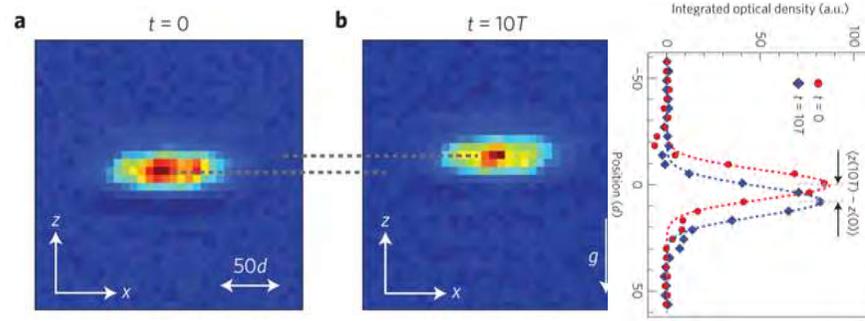


FIGURE III.18. Image in situ du nuage d’atomes avant et après 10 cycles de la pompe adiabatique. La durée T d’un cycle de la pompe est de 50 ms. Le déplacement du centre de masse le long de l’axe z révèle la quantification recherchée. Figure extraite de NAKAJIMA, TOMITA *et al.* (2016).

dique en temps du potentiel de Rice–Mele. Cette déformation est similaire à celle représentée en figure III.15 et elle est obtenue en variant linéairement ϕ pour une valeur constante de l’amplitude des deux réseaux :

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

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 III.15 décrit en bonne approximation le principe de la pompe adiabatique. Les résultats correspondants sont également tracés en figure III.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' , Δ). 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

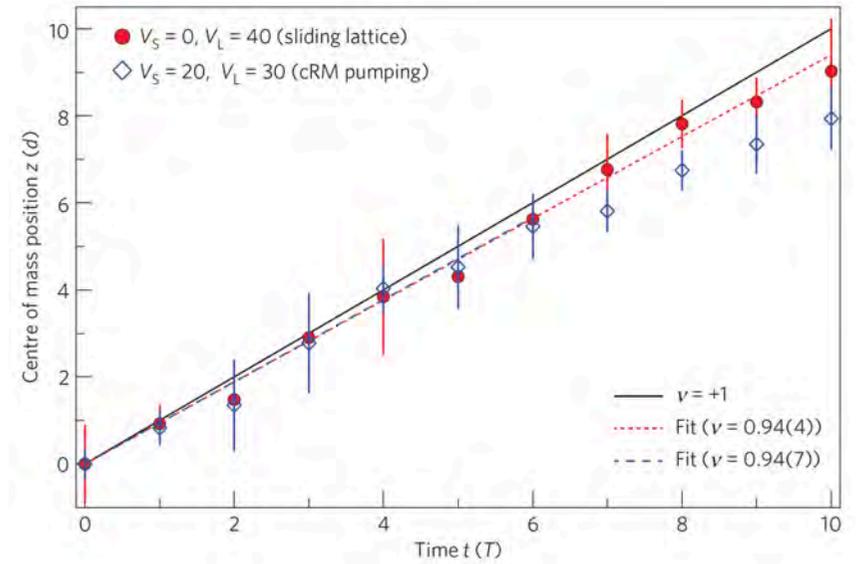


FIGURE III.19. Déplacement du centre de masse du nuage d’atomes en fonction du nombre de cycles de la pompe géométrique. Les points rouges correspondent à un simple réseau translaté, les points bleus à une déformation similaire à celle représentée en figure III.15. Figure extraite de NAKAJIMA, TOMITA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

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 III.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 repré-

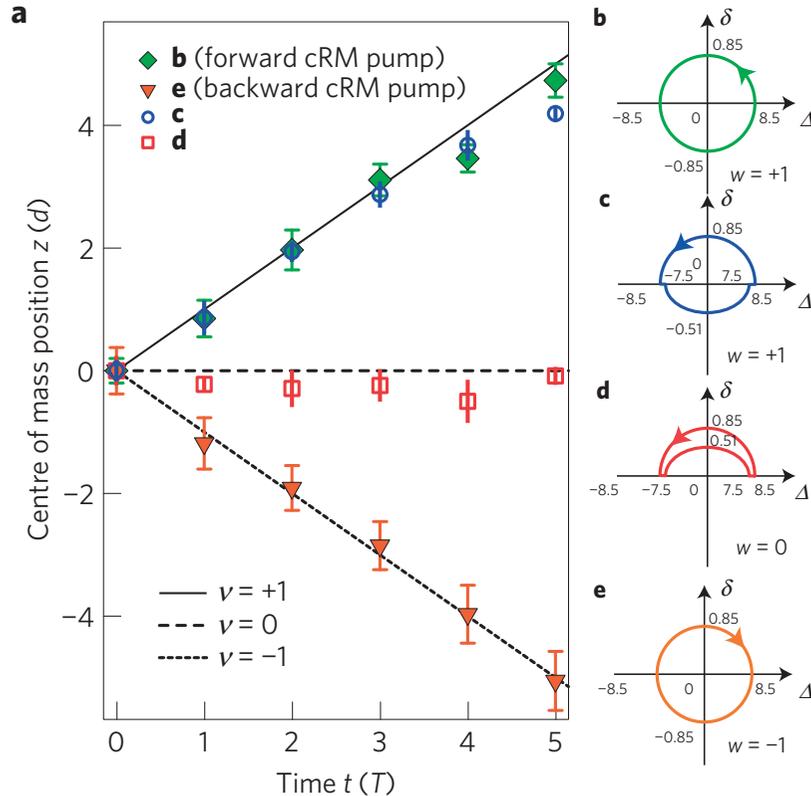


FIGURE III.20. Robustesse topologique de la pompe adiabatique, quand on varie le contour dans le plan J', Δ (avec ici $2\delta = J' - J$). Figure extraite de NAKAJIMA, TOMITA *et al.* (2016).

senter 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 Δ , qui réalise en une période de cycle T une trajectoire fermée comme celle représentée par un cercle rouge sur la figure III.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 Δ 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 $|u_{q,t}^{(-)}\rangle$ donné en (III.3). Cet état varie dans le temps puisqu'il dépend des valeurs instantanées de J' et Δ , via les angles θ_q et ϕ_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 $|u_{q,t}^{(+)}\rangle$.

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 III.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

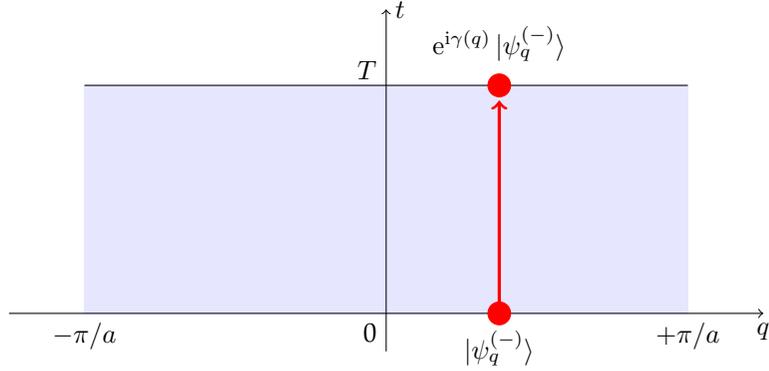


FIGURE III.21. Diagramme bi-dimensionnel avec les moments en abscisse et le temps en ordonnée. Le mouvement adiabatique correspond à des trajectoires rectilignes comme la flèche rouge, la connaissance de la dynamique se résumant à la phase $\gamma(q)$.

comme toujours de deux termes :

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

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

$$\Phi_{\text{dyn}}(q) = -\frac{1}{\hbar} \int_0^T E_{\mathbf{q}}^{(-)}(t) dt, \quad (\text{III.32})$$

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

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

où nous avons introduit² la *connexion de Berry temporelle*

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

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

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 $|\psi_q^{(-)}\rangle$:

$$\hat{U}(T) = \exp[i\gamma(\hat{q})] \quad (\text{III.35})$$

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*

$$\hat{X} = \frac{1}{N} \sum_{n=1}^N \hat{x}_n \quad (\text{III.36})$$

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 :

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

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

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

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

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

où l'on a posé :

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

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

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

On trouve donc le déplacement recherché pour le centre de masse

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

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 (III.42) devient alors une simple intégrale sur la zone de Brillouin (de largeur $2\pi/a$) :

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

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

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

4-3 Trajectoires sur la sphère de Bloch

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

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

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 (III.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 (III.44-III.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 III.22) en utilisant les expressions de $\theta_{q,t}$ et $\phi_{q,t}$

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

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 Δ varient sur le cercle de la figure III.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 III.22 est nul.
- 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 2π) quand q s'approche de $\pm\pi/a$.
- Pour $q = \pm\pi/a$, les deux trajectoire 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

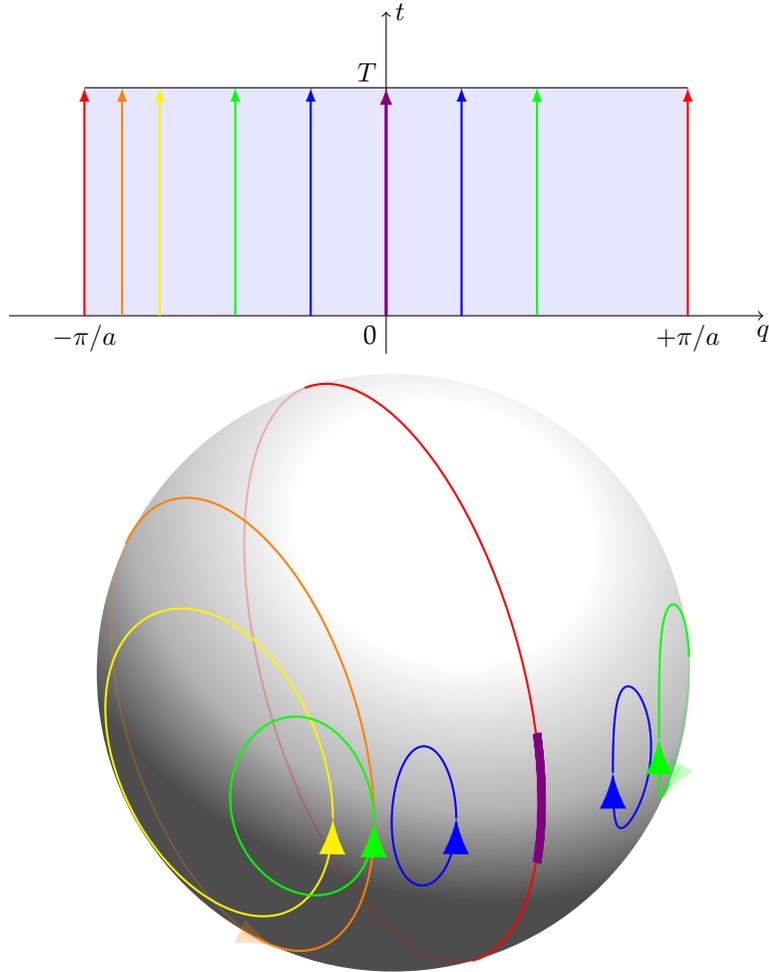


FIGURE III.22. Trajectoires suivies pour un q fixé dans un cycle de la pompe. La phase géométrique $\Phi_{\text{geom}}(t)$ est donnée, à un facteur $1/2$ près, par l'angle solide sous-tendu par la trajectoire correspondante. On a pris une trajectoire circulaire centrée en $(1,0)$ et de rayon 0.5 dans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

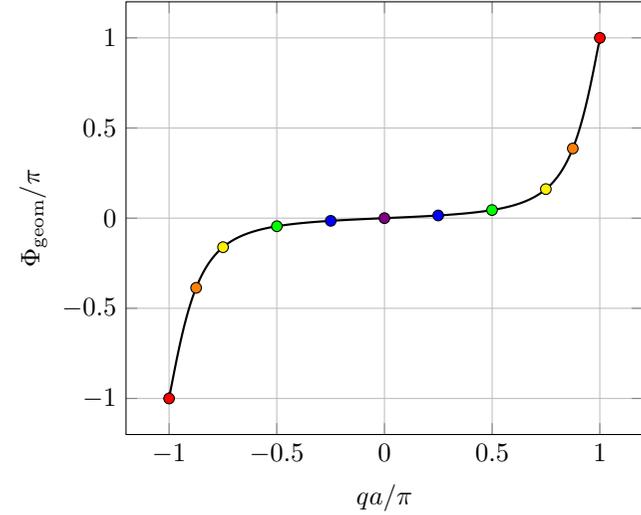


FIGURE III.23. Phase géométrique déduite de l'angle solide sous-tendu par la trajectoire de l'état $|u_{q,t}\rangle$ sur la sphère de Bloch au cours d'un cycle de la pompe. Cette phase géométrique varie continuellement de $-\pi$ à $+\pi$ quand q décrit la zone de Brillouin, ce qui entraîne la quantification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

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 (III.45) doit donc être compris comme

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

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

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

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', Δ) . 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 Δx 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 (III.34)] :

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

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

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

qui est une quantité scalaire réelle.

L'expression (III.44) pour le déplacement Δx fait intervenir la dérivée par rapport à q de la phase géométrique

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

Une intégration par parties donne

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

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

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

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

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

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 ϕ_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

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

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

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

avec

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

et $\theta \in [0, \pi]$, soit $\sin \theta \geq 0$. Dans la mesure où la trajectoire suivie par (J'_t, Δ_t) évite le point central $(J, 0)$, la définition (III.56) ne comporte aucune ambiguïté sauf en un point particulier, le couple (J', Δ) qui atteint le

pôle sud $\theta = \pi$. En effet, l'état $|u_{q,t}\rangle$ en ce point devient

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

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

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

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

Un calcul immédiat donne

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

qui est donc singulier au pôle sud, en $\theta = \pi$. Notons qu'au pôle nord, ϕ 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. Paramétrons le voisinage de ce point par

$$q = q_0 + \delta q, \quad t = t_0 + \delta t, \quad (\text{III.61})$$

et considérons un développement limité au voisinage de ce point :

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

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

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

et donc

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

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

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

où l'on a introduit le nombre réel

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

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 III.24. Cette figure a été tracée en supposant que la trajectoire circulaire dans le plan (J', Δ) de la figure III.2 est parcourue à vitesse uniforme. Le pôle sud de la sphère de Bloch est alors atteint pour :

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

puisqu'on a en ces points

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

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 $t = 3T/4$.

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

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

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 (III.50)

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

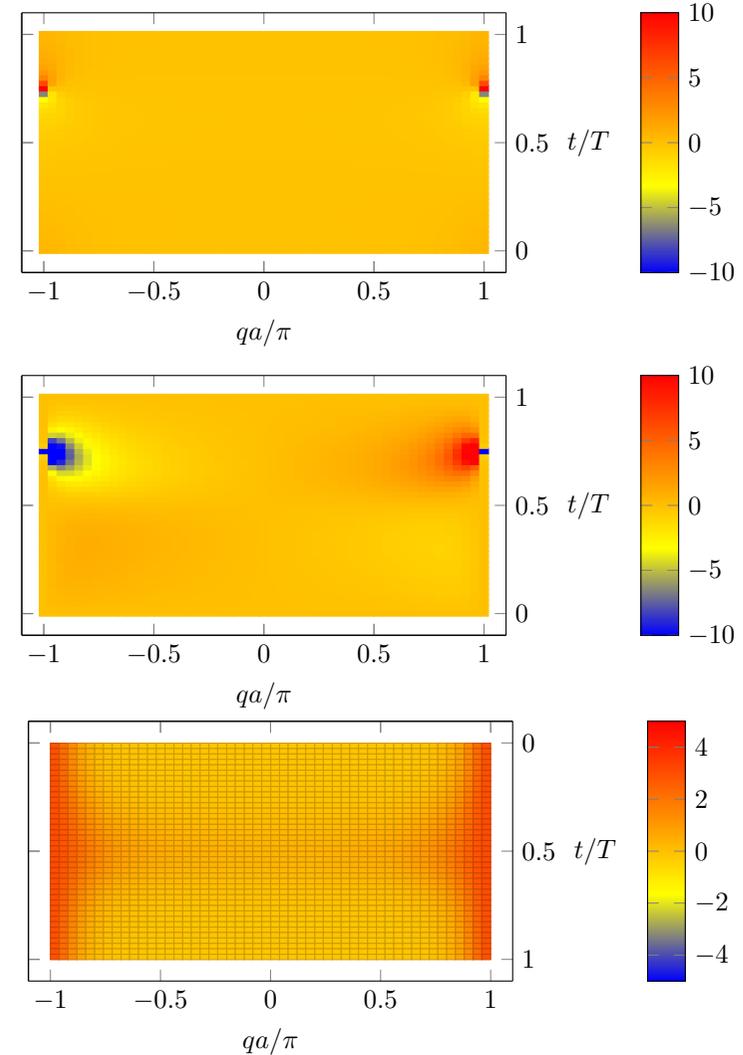


FIGURE III.24. Haut et milieu : composantes 1 et 2 de la connexion de Berry $\mathcal{A}(q, t)$ pour le choix de jauge du texte. Un point singulier apparaît à l'instant $t = 3T/4$ pour $qa = \pm\pi$ car l'état $|u_{q,t}\rangle$ se trouve alors au pôle sud de la sphère de Bloch. Bas : courbure de Berry $\Omega(q, t)$ 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 2π , soit un nombre de Chern de 1.

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

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

ce qui conduit au point (q_0, t_0) à

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

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

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

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 :

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

et

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

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

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

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 (III.50) :

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

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

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

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 :

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

et l'on retrouve le résultat que nous avons obtenu "pédestrement" pour le modèle de Rice–Mele à l'équation (III.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.

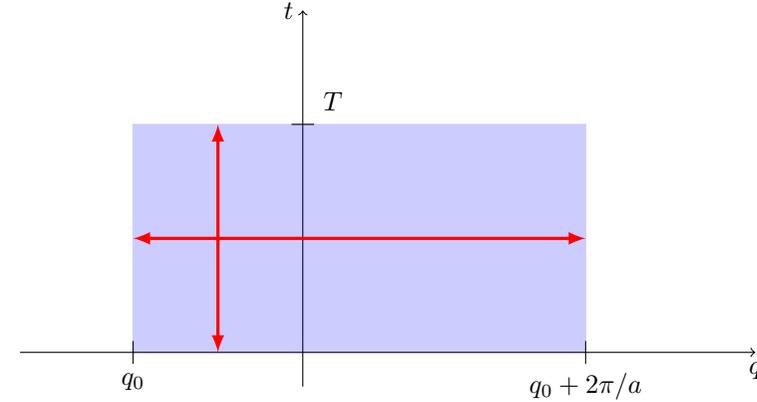


FIGURE III.25. Diagramme bi-dimensionnel dans l'espace (q, t) : moment en abscisse et temps en ordonnées. La surface grisée représente la zone d'intégration de (III.86), la courbure de Berry $\Omega_{q,t}$ est périodique en q de période $2\pi/a$ et périodique en t de période T .

5-3 Nombre de Chern et quantification du pompage

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

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

est toujours un entier si Ω est une courbure de Berry et si l'intégrale est prise sur un domaine rectangulaire avec des conditions aux bords périodiques (figure III.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

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

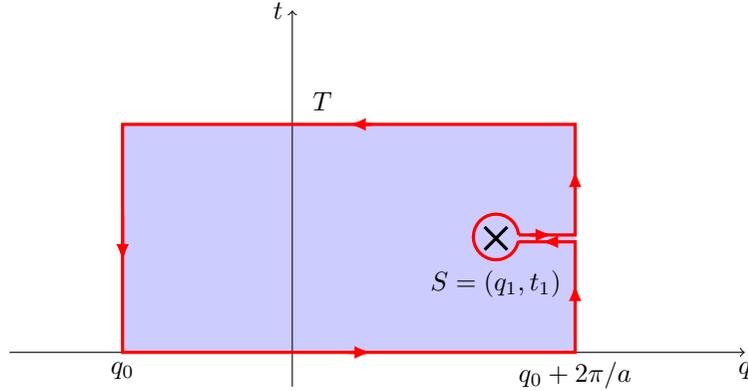


FIGURE III.26. Contour d'intégration suivi en (III.88) pour éviter la singularité en $S = (q_1, t_1)$. La contribution des parties rectilignes s'annule du fait de la périodicité de $\mathcal{A}_{q,t}$. La contribution du petit cercle donne $\pm 2\pi$.

Il est tentant d'appliquer la formule de Stokes, qui relie l'intégrale surfacique de Ω à l'intégrale de \mathcal{A} sur le pourtour du rectangle de la figure III.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 Ω , puisque cette fonction est régulière. On a donc

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

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

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

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 γ introduit en (III.66)). On en déduit donc dans le cas d'un seul point singulier

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

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 :

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

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 III.3 que la cellule unité a une taille $\lambda/2$, on aurait pu poser que la période du potentiel est λ (haut de la figure III.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 III.27 à droite. Pour comparaison, on a reporté sur la gauche de cette figure le spectre déjà montré en figure III.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 ψ_q est doublé puisqu'on a à la fois l'ancien ψ_q et l'ancien $\psi_{q\pm k}$.

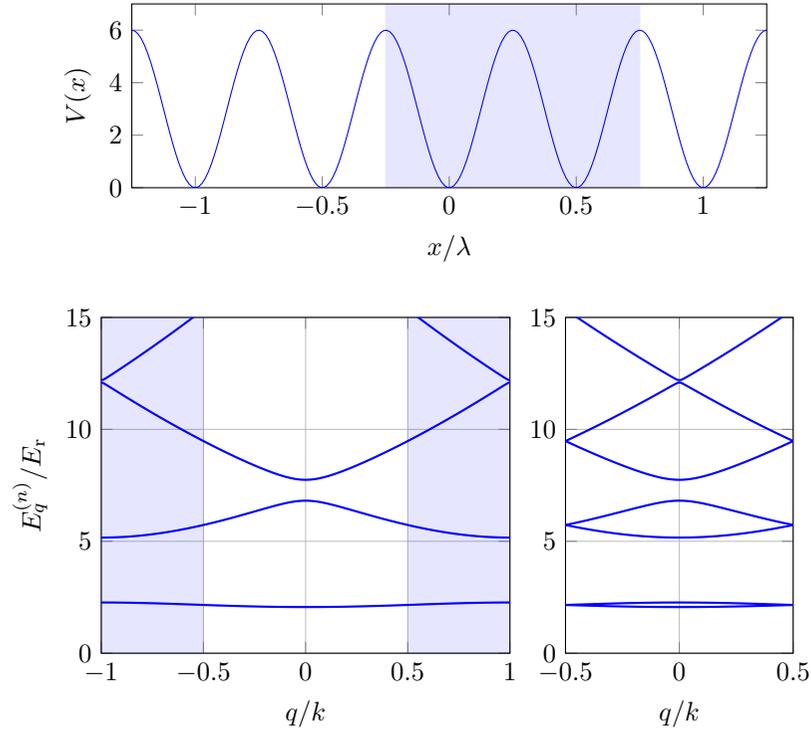


FIGURE III.27. Haut : Cellule unité "non optimale", de taille λ , pour le potentiel sinusoïdal de période $\lambda/2$. Bas : repliement du spectre de bande quand on choisit la taille de la cellule unité égale à λ (à droite) au lieu de $\lambda/2$ (à gauche).

Appendice 2. Pompe adiabatique et phase de Zak

Dans la partie 3, nous avons établi le lien entre déplacement Δx 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 Δx à la phase de Zak $\Phi_{\text{Zak}}(t)$ calculée à chaque instant t du cycle de pompage :

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

Notre point de départ sera la relation :

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

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 Δx comme :

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

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 III.28, le résultat redonnant bien évidemment la valeur trouvée précédemment $\Delta x = -a$.

Appendice 3. Preuve des lemmes (III.80-III.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

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

et

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

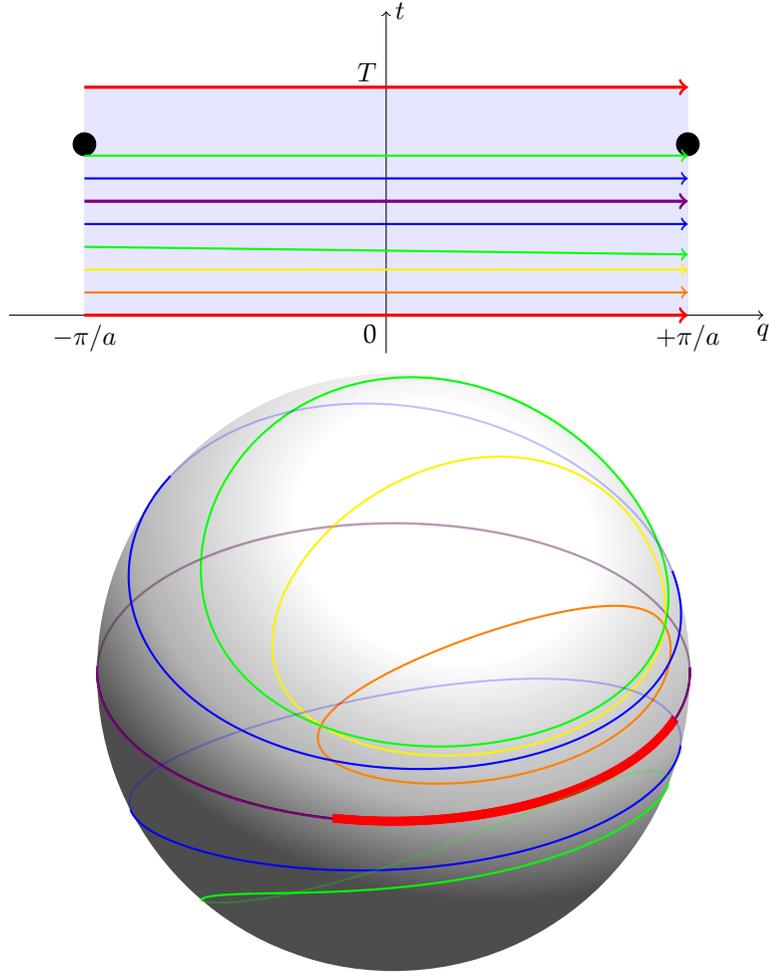


FIGURE III.28. Trajectoires suivies à un instant donné quand on parcourt la zone de Brillouin. La phase de Zak $\Phi_{\text{Zak}}(t)$ est donnée, à un facteur $1/2$ près, par l'angle solide sous-tendu par la trajectoire correspondante. On a pris une trajectoire circulaire centrée en $(1,0)$ et de rayon 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) :

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

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

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

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

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

On a

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

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

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

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

que l'on associe à

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

pour trouver le résultat (III.95)

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

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

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

qui constitue le résultat (III.96).

Chapitre IV

Topologie et courbure de Berry dans un réseau 2D

Après avoir consacré la première partie de cet enseignement aux problèmes uni-dimensionnels, nous abordons à partir de maintenant l'étude de systèmes topologiques à deux dimensions. Rappelons que cette géométrie bi-dimensionnelle a joué un rôle majeur dans l'émergence de concepts topologiques en physique, avec la découverte de l'effet Hall quantique dans les gaz d'électrons confinés dans des puits quantiques. Elle permet de caractériser les phases topologiques par leurs propriétés de transport, ce qui n'était pas directement possible à 1D; par ailleurs, elle donne naissance à des nombres topologiques (indices de Chern) plus "robustes" que la phase de Zak, qui restait dépendante de la paramétrisation choisie pour un problème physique donné.

Nous allons considérer dans ce chapitre une bande d'énergie isolée et nous allons nous poser la question de la topologie de cette bande. Nous allons apporter deux types de réponse. La première sera mathématique et directement inspirée de ce que nous avons compris pour les pompes géométriques, concernant la couverture de la sphère de Bloch. La seconde réponse sera physique et portera sur les propriétés de transport que l'on peut attendre pour ces systèmes. Bien entendu, les deux types de réponses conduiront à la même caractérisation *in fine*. Dans le cours 5, nous compléterons ces deux réponses par une troisième, portant sur l'existence de canaux de bord.

Pour simplifier notre analyse, nous allons étudier majoritairement des systèmes discrets avec des couplages tunnels n'autorisant des sauts qu'entre sites voisins. Cela va nous permettre d'utiliser l'approximation

des liaisons fortes et de mener presque tous les calculs de manière analytique. Comme nous l'avons fait à une dimension, nous allons également chercher à travailler avec les géométries les plus simples permettant l'apparition d'une topologie non triviale. Comme à 1D, cela conduit à considérer un réseau avec deux sites possibles par cellule unité. Ce type de réseau conduit naturellement à l'émergence de points de Dirac dans une géométrie 2D, et c'est donc par cette notion que nous allons commencer notre étude, avant de passer à la caractérisation de la topologie.

1 Réseaux bi-partites et points de Dirac

Nous allons rappeler dans cette première partie quelques caractéristiques importantes de réseaux réguliers à deux dimensions. Nous commencerons par une brève description des réseaux triangulaires et carrés dans le modèle des liaisons fortes. Ces deux réseaux ont un seul site par cellule unité, donc une seule bande d'énergie dans l'approximation des liaisons fortes. Par conséquent, ils ne peuvent pas déboucher spontanément sur des bandes topologiques, sauf en présence d'un champ de jauge extérieur, comme nous le verrons au cours 6.

Nous passerons ensuite au réseau hexagonal de type graphène; ce réseau comporte deux sites par cellule unité, comme les modèles SSH et RM que nous avons étudiés à une dimension. On obtient *a priori* deux bandes

d'énergie dans le modèle des liaisons fortes, ce qui est propice à la recherche d'effets topologiques. Nous discuterons en particulier les points de Dirac du réseau graphène standard, qui joueront un rôle crucial dans l'émergence de ces propriétés topologiques. Nous donnerons également quelques illustrations de la réalisation de ce réseau en photonique et avec des atomes froids.

1-1 Réseaux triangulaires et carrés

À deux dimensions, les réseaux réguliers les plus simples sont triangulaires ou carrés. En physique des atomes froids, le réseau triangulaire peut être obtenu en faisant interférer trois ondes lumineuses identiques coplanaires, à 120 degrés l'une de l'autre, et avec leur polarisation perpendiculaire au plan. Les maxima¹ d'intensité forment un réseau triangulaire de points A_j , avec une distance entre proches voisins égale à $a = 2\lambda/3$. Les atomes viendront s'y piéger si la fréquence de la lumière est inférieure à la fréquence de résonance des atomes. Le réseau carré peut quant à lui être généré par deux paires orthogonales d'ondes stationnaires, avec une distance $a = \lambda/2$ entre deux sites adjacents.

Ces deux types sont des *réseaux de Bravais*, c'est-à-dire que l'on peut générer tout le réseau en translatant une cellule unité ne comportant qu'un seul site de

$$\mathbf{r}_j = j_1 \mathbf{a}_1 + j_2 \mathbf{a}_2, \quad j_1, j_2 \in \mathbb{Z} \quad (\text{IV.1})$$

où les vecteurs \mathbf{a}_1 et \mathbf{a}_2 sont indiqués sur la figure IV.1.

Considérons un hamiltonien où seuls les sauts entre proches voisins sont autorisés, avec un élément de matrice tunnel noté $-J$ comme au chapitre précédent. Le théorème de Bloch indique que l'on peut chercher les états de Bloch sous la forme

$$|\psi_{\mathbf{q}}\rangle = \sum_j e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_j} |A_j\rangle \quad (\text{IV.2})$$

avec une seule fonction périodique sur le réseau

$$|u_{\mathbf{q}}\rangle = \sum_j |A_j\rangle. \quad (\text{IV.3})$$

1. Si l'on souhaite disposer plutôt d'un piégeage aux minima d'intensité tout en gardant un réseau triangulaire, il faut orienter les polarisations dans le plan des faisceaux.

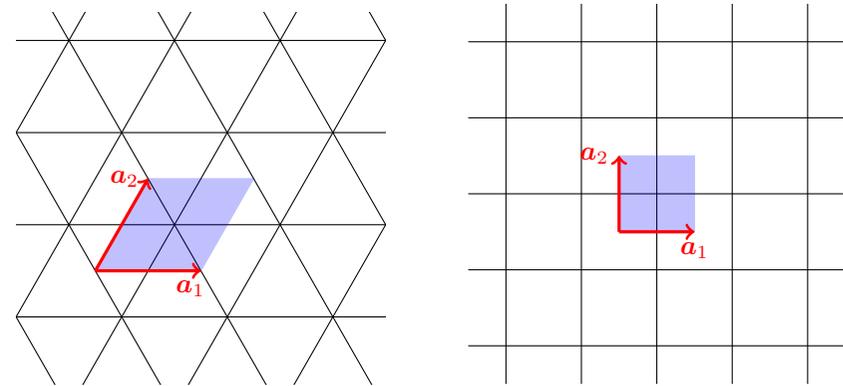


FIGURE IV.1. Réseau triangulaire et réseau carré. La zone grisée indique une cellule unité possible.

et une seule bande d'énergie². La fonction $|u_{\mathbf{q}}\rangle$ est donc réelle et en fait indépendante de \mathbf{q} . L'expérience que nous avons acquise aux chapitres précédents sur le cas 1D nous indique que l'on ne peut pas espérer observer de topologie non triviale dans ce modèle à une bande.

1-2 Le réseau hexagonal "graphène"

Pour obtenir une situation qui généralise celle étudiée à une dimension, avec le modèle SSH et le modèle de Rice–Mele, il nous faut passer à un réseau avec (au moins) deux sites par cellule unité. Cela conduit naturellement à une paramétrisation des états propres à quasi-moment donné par un pseudo-spin 1/2. La topologie correspondante peut donc être comprise en examinant la position de ce pseudo-spin sur la sphère de Bloch. Le réseau le plus connu de ce type est le réseau hexagonal représenté sur la figure IV.2.

La cellule unité de ce réseau comporte effectivement deux sites distants de a , notés A et B et correspondant respectivement au bas et au haut de chaque lien vertical. Le couplage tunnel, limité là aussi aux proches voisins,

2. L'énergie associée à l'état $|\psi_{\mathbf{q}}\rangle$ vaut $-2J [\cos(\mathbf{q} \cdot \mathbf{a}_1) + \cos(\mathbf{q} \cdot \mathbf{a}_2) + \cos(\mathbf{q} \cdot (\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2))]$ pour le réseau triangulaire et $-2J [\cos(\mathbf{q} \cdot \mathbf{a}_1) + \cos(\mathbf{q} \cdot \mathbf{a}_2)]$ pour le réseau carré.

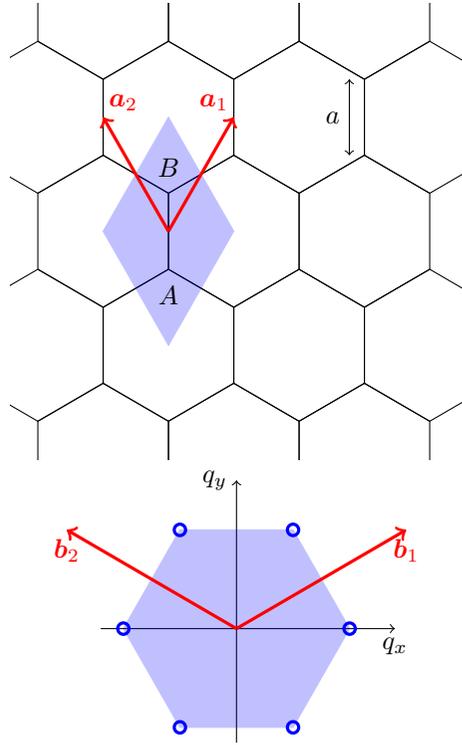


FIGURE IV.2. Haut : le réseau hexagonal et sa cellule unité d'aire $(3\sqrt{3}/2)a^2$. Bas : la zone de Brillouin correspondante d'aire $8\pi^2/(3\sqrt{3}a^2)$; les points de Dirac sont marqués par un cercle bleu.

peut faire passer une particule d'un site A vers trois sites B , à savoir celui de la même cellule et les sites B décalés respectivement de $-\mathbf{a}_1$ et $-\mathbf{a}_2$ avec

$$\mathbf{a}_1 = \frac{\sqrt{3}}{2}a \begin{pmatrix} 1 \\ \sqrt{3} \end{pmatrix} \quad \mathbf{a}_2 = \frac{\sqrt{3}}{2}a \begin{pmatrix} -1 \\ \sqrt{3} \end{pmatrix}. \quad (\text{IV.4})$$

Dans l'espace des quasi-moments \mathbf{q} , la zone de Brillouin a elle aussi une structure hexagonale, et le réseau réciproque est engendré par les deux

vecteurs \mathbf{b}_1 et \mathbf{b}_2 définis³ par $\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{b}_j = 2\pi \delta_{i,j}$:

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{3a} \begin{pmatrix} \sqrt{3} \\ 1 \end{pmatrix} \quad \mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{3a} \begin{pmatrix} -\sqrt{3} \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (\text{IV.6})$$

On peut chercher les états propres de cet hamiltonien sous la forme de Bloch $\psi_{\mathbf{q}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} u_{\mathbf{q}}(\mathbf{r})$ où $u_{\mathbf{q}}(\mathbf{r})$ est périodique sur le réseau. Cette périodicité s'écrit dans la limite des liaisons fortes (Hubbard) considérée ici [cf. cours 1] :

$$|u_{\mathbf{q}}\rangle = \alpha_{\mathbf{q}} \left(\sum_j |A_j\rangle \right) + \beta_{\mathbf{q}} \left(\sum_j |B_j\rangle \right), \quad |\alpha_{\mathbf{q}}|^2 + |\beta_{\mathbf{q}}|^2 = 1, \quad (\text{IV.7})$$

ce qui revient comme annoncé à paramétriser $|u_{\mathbf{q}}\rangle$ comme un pseudo spin 1/2 :

$$|u_{\mathbf{q}}\rangle \equiv \begin{pmatrix} \alpha_{\mathbf{q}} \\ \beta_{\mathbf{q}} \end{pmatrix}. \quad (\text{IV.8})$$

Avec ces notations, l'état de Bloch $|\psi_{\mathbf{q}}\rangle$ est donné par

$$|\psi_{\mathbf{q}}\rangle = \sum_j e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_j} (\alpha_{\mathbf{q}}|A_j\rangle + \beta_{\mathbf{q}}|B_j\rangle). \quad (\text{IV.9})$$

L'état de Bloch $|\psi_{\mathbf{q}}\rangle$ est état propre de l'hamiltonien décrivant le couplage tunnel avec la valeur propre $E_{\mathbf{q}}$, ce qui se transcrit en terme du pseudo-spin :

$$\hat{H}_{\mathbf{q}} \begin{pmatrix} \alpha_{\mathbf{q}} \\ \beta_{\mathbf{q}} \end{pmatrix} = E_{\mathbf{q}} \begin{pmatrix} \alpha_{\mathbf{q}} \\ \beta_{\mathbf{q}} \end{pmatrix} \quad (\text{IV.10})$$

où l'on a introduit la matrice 2×2

$$\hat{H}_{\mathbf{q}} = \begin{pmatrix} E_A & -J(1 + e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{a}_1} + e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{a}_2}) \\ -J(1 + e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{a}_1} + e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{a}_2}) & E_B \end{pmatrix}. \quad (\text{IV.11})$$

3. On adopte ici la définition générale

$$\mathbf{b}_1 = 2\pi \frac{\mathcal{R}\mathbf{a}_2}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathcal{R}\mathbf{a}_2)}, \quad \mathbf{b}_2 = 2\pi \frac{\mathcal{R}\mathbf{a}_1}{\mathbf{a}_2 \cdot (\mathcal{R}\mathbf{a}_1)} \quad (\text{IV.5})$$

où \mathcal{R} désigne la rotation de $\pi/2$.

Pour l'instant, nous supposons les deux sites A et B équivalents, et donc de même énergie. Nous poserons par convention

$$E_A = E_B = 0 \quad (\text{IV.12})$$

de sorte que \hat{H}_q peut s'écrire en terme des matrices de Pauli $\hat{\sigma}_i, i = x, y, z$:

$$\hat{H}_q = -\mathbf{h}(q) \cdot \hat{\sigma}, \quad h_x(q) + ih_y(q) = J(1 + e^{iq \cdot \mathbf{a}_1} + e^{iq \cdot \mathbf{a}_2}). \quad (\text{IV.13})$$

ou encore

$$\mathbf{h}(q) = \begin{pmatrix} 1 + \cos(\mathbf{q} \cdot \mathbf{a}_1) + \cos(\mathbf{q} \cdot \mathbf{a}_2) \\ \sin(\mathbf{q} \cdot \mathbf{a}_1) + \sin(\mathbf{q} \cdot \mathbf{a}_2) \\ 0 \end{pmatrix} \quad (\text{IV.14})$$

Les énergies propres de cet hamiltonien sont

$$E_q^{(\pm)} = \pm |\mathbf{h}(q)| = \pm J |1 + e^{iq \cdot \mathbf{a}_1} + e^{iq \cdot \mathbf{a}_2}| \quad (\text{IV.15})$$

que nous allons maintenant discuter. Les deux états propres correspondants, $|u_q^{(\pm)}\rangle$, sont localisés sur l'équateur de la sphère de Bloch puisque le vecteur \mathbf{h} est lui-même localisé dans le plan xy .

1-3 Les points de Dirac

La structure de bande (IV.15) est bien connue, en particulier grâce aux études sur le graphène (CASTRO NETO, GUINEA et al. 2009), et elle est représentée sur la figure IV.3. Les deux bandes d'énergie $E_q^{(\pm)}$ ne sont pas disjointes, mais se touchent en des valeurs de q particulières, les points de Dirac, qui sont les solutions de

$$1 + e^{iq \cdot \mathbf{a}_1} + e^{iq \cdot \mathbf{a}_2} = 0. \quad (\text{IV.16})$$

La première zone de Brillouin a une structure hexagonale et il y a un point de Dirac à chacun des six sommets de l'hexagone (figure IV.2, bas). Comme chaque sommet est lui-même à la frontière de trois hexagones, il y a deux points de Dirac/zone de Brillouin⁴,

$$\mathbf{q} = \mathbf{Q}_\pm \quad \text{avec} \quad \mathbf{Q}_\pm = \pm \frac{4\pi}{3\sqrt{3}a} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{IV.17})$$

4. voir le cours 2012-13, chapitre 6, pour une étude détaillée.

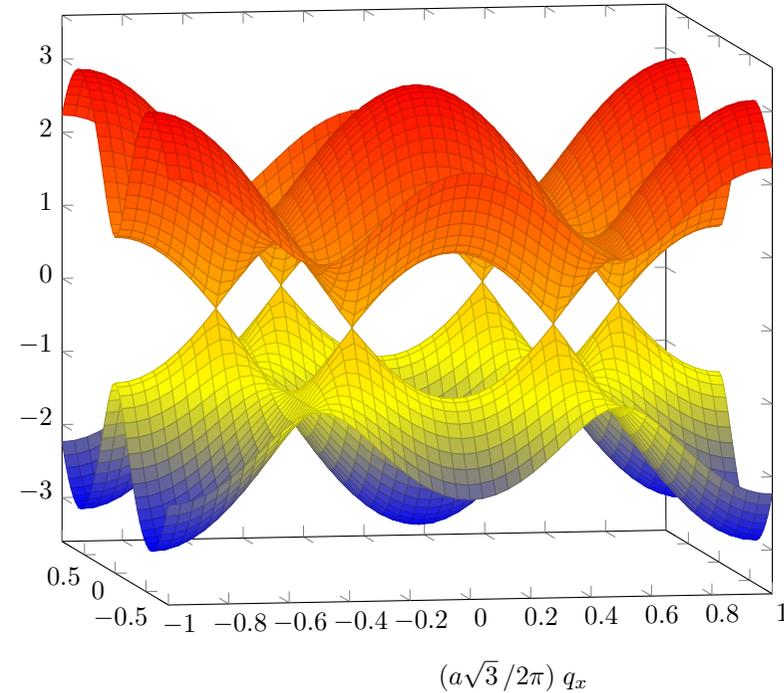


FIGURE IV.3. Structure de bande du réseau hexagonal.

La dénomination "point de Dirac" provient du fait que la relation de dispersion au voisinage de \mathbf{Q}_\pm est celle d'une particule quantique relativiste en dimension 2. En posant $\tilde{q} = \mathbf{q} - \mathbf{Q}_\pm$, l'hamiltonien prend en effet la forme de Dirac

$$\hat{H}_q^{(\pm)} = \hbar v (\pm \tilde{q}_x \hat{\sigma}_x + \tilde{q}_y \hat{\sigma}_y) \quad (\text{IV.18})$$

pour \tilde{q} petit devant la taille de la zone de Brillouin, avec la vitesse $v = (3/2)Ja/\hbar$.

Nous sommes ici dans une situation marginale vis-à-vis des propriétés topologiques. Nous avons vu pour les problèmes à une dimension (et il en va de même à deux dimensions) que l'établissement d'un contact entre deux bandes d'énergie était un point singulier : ce contact peut disparaître

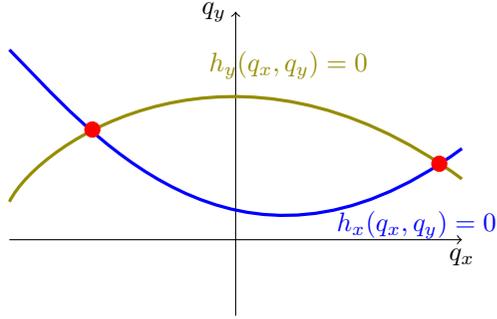


FIGURE IV.4. Points de Dirac obtenus à l'intersection des lignes du plan q_x, q_y le long desquelles $h_x(\mathbf{q})$ et $h_y(\mathbf{q})$ s'annulent. Ces points sont robustes dans la mesure où un petit changement des paramètres de l'hamiltonien déforme légèrement ces lignes, mais ne supprime pas leurs points d'intersection qui sont simplement déplacés.

quand on modifie un ou plusieurs paramètres du problème, et selon cette modification, les deux bandes disjointes qui résultent auront ou non des propriétés topologiques. Notre but dans le reste de ce chapitre et le suivant sera de comprendre quelles modifications apporter à l'hamiltonien pour basculer d'un côté ou de l'autre⁵.

Robustesse des point de Dirac. Nous venons de voir que les deux bandes d'énergie se touchaient aux points de Dirac. L'existence de ces points de contact entre les deux bandes est une conséquence directe du fait que l'hamiltonien des réseaux que nous venons d'étudier s'écrit

$$\hat{H}_{\mathbf{q}} = -(h_x(\mathbf{q})\hat{\sigma}_x + h_y(\mathbf{q})\hat{\sigma}_y). \quad (\text{IV.19})$$

Les énergies des deux bandes $\pm [h_x^2 + h_y^2]^{1/2}$ coïncident donc aux points où h_x et h_y s'annulent simultanément. Or, quand \mathbf{q} varie dans le plan (q_x, q_y) , l'existence de zéros simultanés pour h_x et h_y est "naturelle". Les fonctions h_x et h_y peuvent *a priori* prendre des valeurs positives et négatives, et cha-

5. Notons que l'on peut mettre en évidence une topologie particulière pour cette situation marginale à partir de l'étude des états de bord, comme cela a été étudié théoriquement par DELPLACE, ULLMO et al. (2011), puis expérimentalement par MILIĆEVIĆ, OZAWA et al. (2017).

cune s'annule sur des lignes du plan (figure IV.4). Un point de Dirac correspond à l'intersection de telles lignes et le champ de vecteur $\mathbf{h} = (h_x, h_y)$ présente une structure de vortex autour de ce point (figure IV.5).

Cette structure de vortex assure la robustesse des points de Dirac tant que l'hamiltonien reste de la forme (IV.19). Si on modifie légèrement la valeur de certains coefficients tunnel par rapport à d'autres, les points de Dirac vont se déplacer, mais ne disparaîtront pas. Pour les déformations plus fortes, deux points de Dirac d'enroulement opposé peuvent venir au contact l'un de l'autre et s'annihiler (MONTAMBAUX, PIÉCHON et al. 2009), d'une manière formellement similaire à deux vortex dans un superfluide 2D dans la description de la transition de Kosterlitz–Thouless (cf. cours 2016-17).

1-4 Réseau hexagonal pour polaritons ou atomes

Au cours des dix dernières années, plusieurs plateformes ont été utilisées pour implémenter un réseau hexagonal dans un système ondulatoire, et observer ainsi une relation de dispersion avec des cônes de Dirac. En dehors des systèmes électroniques, citons sans chercher à être exhaustif les ondes acoustiques (TORRENT & SÁNCHEZ-DEHESA 2012), les réseaux de guides d'onde (RECHTSMAN, ZEUNER et al. 2013b), ou encore les résonateurs micro-onde (BELLEC, KUHL et al. 2013) (voir figure IV.6).

La plateforme des polaritons de cavité, que nous avons déjà décrite au cours 2 pour la réalisation d'une chaîne SSH, peut également être utilisée pour réaliser de tels réseaux bi-dimensionnels (JACQMIN, CARUSOTTO et al. 2014). On montre en figure IV.7 une image de la microstructure dans laquelle on a creusé des trous selon un réseau triangulaire, la zone active formant donc un réseau hexagonal. Cette zone active est composée d'une couche de GaAlAs entourée de deux miroirs de Bragg, formant une cavité planaire de facteur de qualité $Q \sim 7 \cdot 10^4$. Comme décrit au chapitre 2, on pompe le système avec de la lumière non résonnante et on observe la lumière de photoluminescence, soit résolue en position (ce qui montre les zones actives formant le réseau hexagonal), soit résolue en impulsion (ce qui montre la structure de bande avec les cônes de Dirac caractéristiques).

Avec des atomes froids, la première mise en évidence directe de points

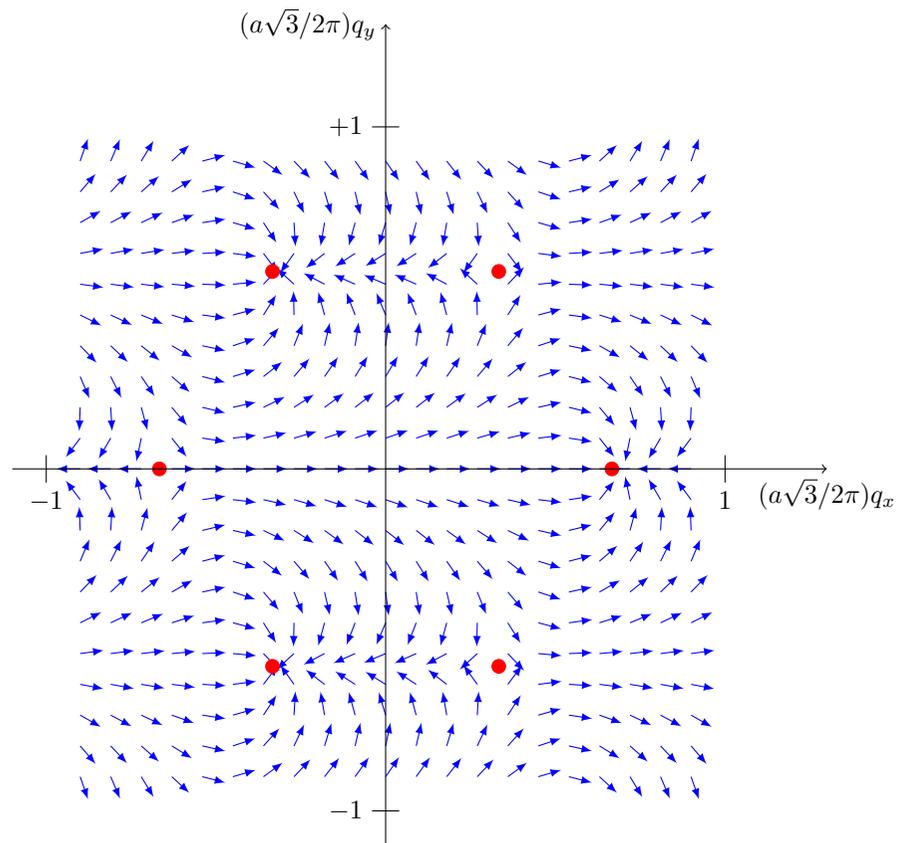


FIGURE IV.5. Champ de vecteur $\mathbf{n}(\mathbf{q}) = \mathbf{h}(\mathbf{q})/|\mathbf{h}(\mathbf{q})|$ dans le plan q_x, q_y pour le réseau hexagonal. Les points de Dirac sont indiqués par les cercles rouges et forment eux-mêmes un réseau hexagonal dans l'espace des moments (cf. figure IV.2, bas). Au voisinage de ces points, le champ de vecteur $\mathbf{n}(\mathbf{q})$ possède une structure de vortex, avec des enroulements de signe opposé pour deux points de Dirac adjacents.

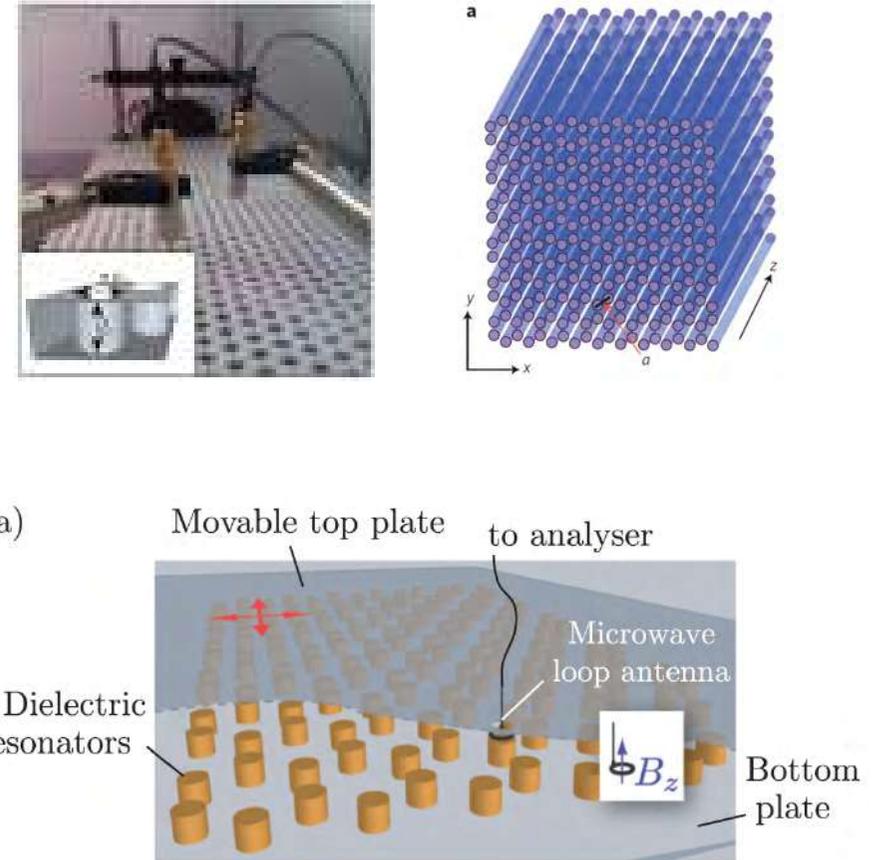


FIGURE IV.6. Réseau hexagonal pour des ondes acoustiques (haut, gauche), des ondes lumineuses guidées (haut, à droite) et des ondes électromagnétiques dans le domaine ~ 6 GHz (bas). Figures extraites de TORRENT & SÁNCHEZ-DEHESA (2012), RECHTSMAN, ZEUNER *et al.* (2013b) et BELLEC, KUHL *et al.* (2013).

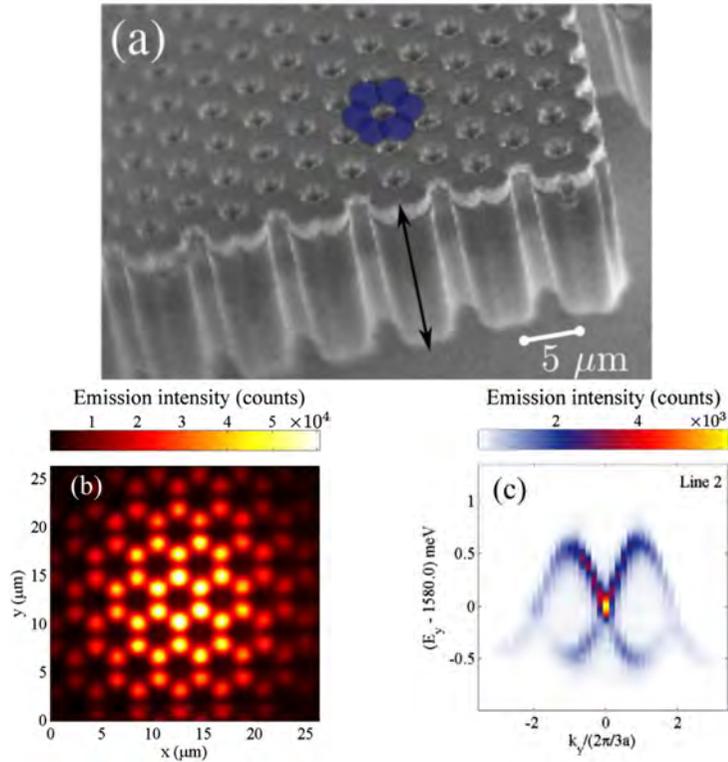


FIGURE IV.7. Haut : Microstructure de AlGaAs formant un réseau hexagonal. Bas : spectre de photoluminescence dans l'espace des positions (gauche) et dans l'espace des moments (droite). Sur la figure de droite, on trace $E(\mathbf{q})$ en fonction de q_y , avec un choix de q_x qui permet de passer sur un point de Dirac. La figure de gauche a été obtenue pour une puissance de pompe suffisante pour atteindre le régime de condensation des polaritons. Figures extraites de JACQMIN, CARUSOTTO *et al.* (2014).

de Dirac faite par TARRUELL, GREIF *et al.* (2012) a été décrite dans le cours 2012-13 et nous n'y reviendrons pas ici. Nous allons nous intéresser ici à l'expérience plus récente de DUCA, LI *et al.* (2015) qui a mis en évidence l'enroulement de phase autour d'un point de Dirac (figure IV.5).

Sur le plan formel, le déplacement d'une particule dans l'espace des moments \mathbf{q} en présence d'un point de Dirac peut être vu comme analogue au cas du mouvement d'une particule de charge e dans l'espace réel (*i.e.* des positions \mathbf{r}) en présence d'un solénoïde infiniment étroit créant un flux magnétique fini (MIKITIK & SHARLAI 1999). Cette deuxième situation physique, représentée sur la figure IV.8, correspond à l'effet Aharonov–Bohm (AHARONOV & BOHM 1959). Si l'on considère une trajectoire le long d'un contour \mathcal{C} qui entoure le solénoïde, la phase accumulée le long de la trajectoire

$$\Phi_{AB} = \frac{e}{2\pi\hbar} \oint_{\mathcal{C}} \mathbf{A}(\mathbf{r}) \cdot d\mathbf{r}, \quad (\text{IV.20})$$

où $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ est le potentiel vecteur décrivant le champ magnétique du solénoïde, est proportionnelle au flux du champ magnétique dans le solénoïde. Pour une trajectoire qui n'entoure pas le solénoïde, cette phase de Aharonov–Bohm Φ_{AB} est nulle.

Considérons maintenant une "trajectoire" fermée dans l'espace des \mathbf{q} qui entoure un des points de Dirac (figure IV.9). Si le mouvement le long de cette trajectoire se fait assez lentement, la particule initialement préparée dans un état donné du pseudo-spin, l'état fondamental $|u_{\mathbf{q}}^{(-)}\rangle$ par exemple, va rester dans cet état et va accumuler une phase géométrique. Nous savons (*cf.* cours 1) que cette phase géométrique est donnée par la moitié de l'angle solide sous-tendu par le vecteur $\mathbf{h}(\mathbf{q})$ le long de cette trajectoire. Comme le vecteur $\mathbf{h}(\mathbf{q})$ décrit dans ce cas un tour entier sur l'équateur de la sphère de Bloch, l'angle solide vaut $\pm 2\pi$ et la phase géométrique vaut $\pm\pi$ (contour \mathcal{C}_1 de la figure IV.9). Si au contraire la trajectoire n'entoure pas un point de Dirac ou en entoure deux d'enroulements opposés, l'angle solide sera nul, ainsi que la phase géométrique correspondante (contour \mathcal{C}_2 de la figure IV.9).

Pour mettre en évidence cet effet, DUCA, LI *et al.* (2015) ont réalisé un interféromètre à deux voies et vérifié que la différence de phase à la sortie de cet interféromètre était égale à π ou 0 selon que l'aire de l'interféromètre incluait ou non un point de Dirac. Cette expérience a été réalisée

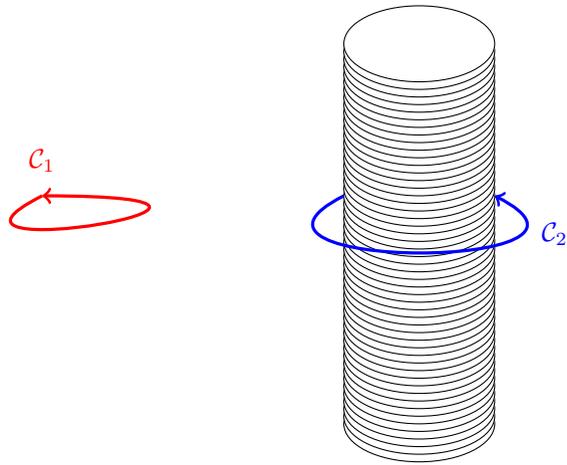


FIGURE IV.8. L'effet Aharonov–Bohm. Un solénoïde infini génère un champ magnétique localisé à l'intérieur du solénoïde. On mesure grâce à un dispositif interférométrique la phase accumulée par la fonction d'onde d'une particule chargée effectuant un contour fermé. Si le contour n'entoure pas le solénoïde (contour C_1), le flux magnétique est indétectable. En revanche, si le contour entoure le solénoïde (contour C_2), la phase géométrique accumulée est proportionnelle au flux (Eq. IV.20), bien que la trajectoire classique de la particule ne pénètre jamais dans la zone de champ magnétique non nul.

avec des atomes de rubidium préparés dans un réseau optique formé par trois ondes lumineuses à 120 degrés l'une de l'autre.

Initialement l'état externe des atomes est un paquet d'ondes localisé au centre de la zone de Brillouin ($\mathbf{q}_i = 0$) et leur état interne est un certain sous-niveau Zeeman magnétique⁶ noté $|\uparrow\rangle$. On réalise alors un interféromètre de type $\frac{\pi}{2} - \pi - \frac{\pi}{2}$ avec des impulsions micro-onde (figure IV.10) :

- Une première impulsion micro-onde $\pi/2$ prépare une superposition cohérente de $|\uparrow\rangle$ et $|\downarrow\rangle$, le moment magnétique de $|\downarrow\rangle$ étant opposé à celui de $|\uparrow\rangle$, avec un état global qui s'écrit donc :

$$|\mathbf{q}_i, \uparrow\rangle + |\mathbf{q}_i, \downarrow\rangle \quad (\text{IV.21})$$

6. Plus précisément, les deux états en jeu sont $|F = 2, m = 1\rangle$ et $|F = 1, m = 1\rangle$.

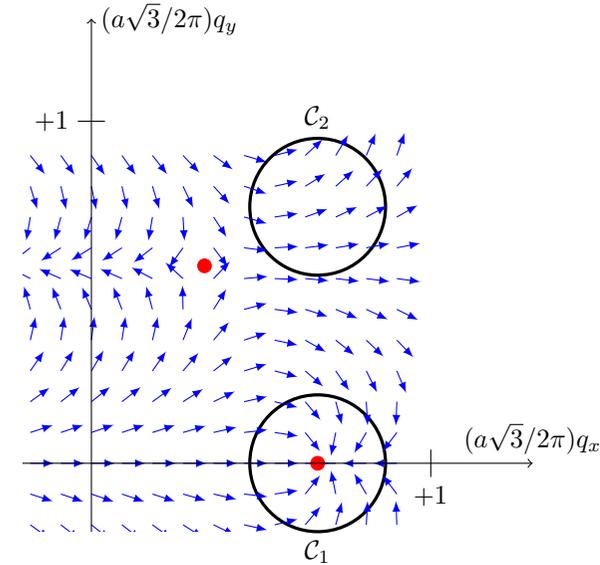


FIGURE IV.9. Deux "trajectoires" possibles dans l'espace des moments \mathbf{q} . Le contour C_1 , qui entoure un point de Dirac, correspond à une phase géométrique $\pm\pi$. Le contour C_2 correspond à une phase géométrique nulle.

- Une accélération du réseau le long de l'axe x , réalisée en décalant la fréquence d'un des faisceaux laser par rapport aux deux autres, crée une force d'inertie F_x identique sur les deux états de spin. Cette force va décaler progressivement le quasi-moment \mathbf{q} le long de l'axe x , c'est le phénomène des oscillations de Bloch que nous avons déjà rencontré et que nous développerons un peu plus loin.
- Un gradient de champ magnétique crée une force opposée sur chaque état de spin le long de l'axe y , ce qui permet de séparer les trajectoires de $|\uparrow\rangle$ et $|\downarrow\rangle$. Les deux quasi-moments des deux états de spin s'écartent donc de part et d'autre de $q_y = 0$, tout en gardant la même valeur de q_x .
- Au bout d'une durée τ , une impulsion micro-onde π échange l'état de spin des atomes, ce qui permet de refermer l'interféromètre dans

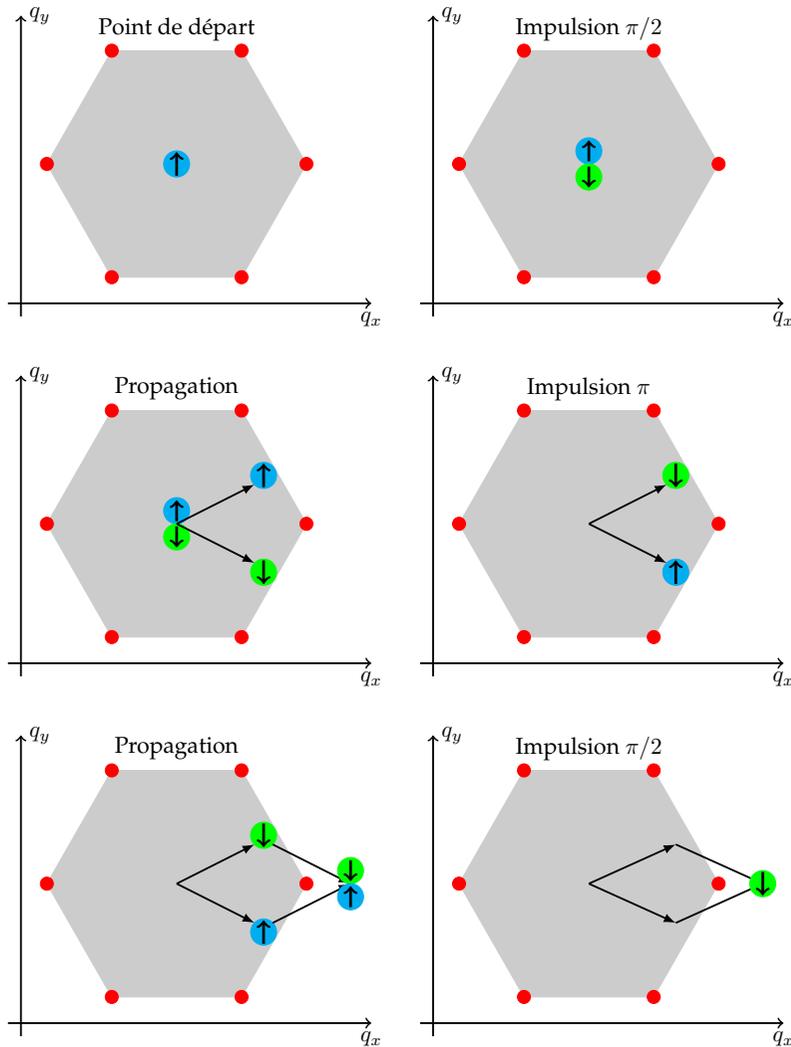


FIGURE IV.10. Séquence expérimentale suivie pour réaliser un interféromètre à deux voies dans l'espace des moments, permettant de révéler l'enroulement de phase de π autour d'un point de Dirac. Figure inspirée de DUCA, LI et al. (2015).

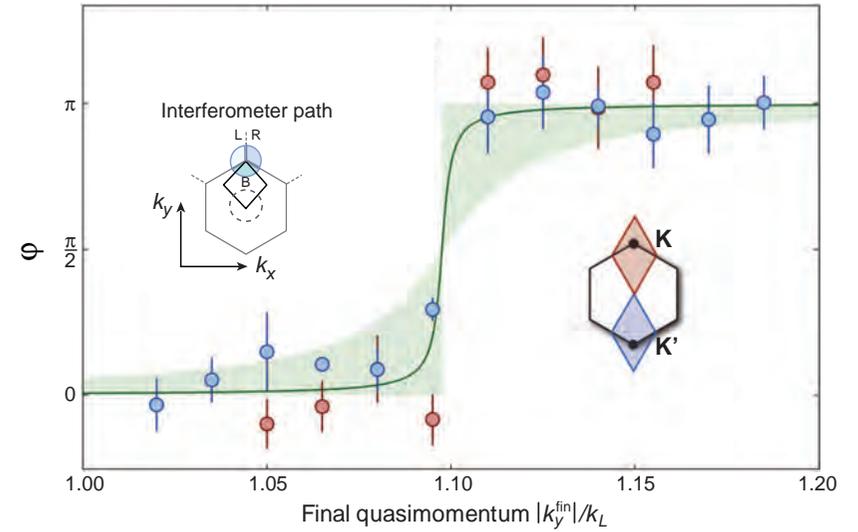


FIGURE IV.11. Interférences dans l'espace des moments autour d'un point de Dirac. Quand l'un des points de Dirac K ou K' est à l'intérieur de l'interféromètre, la valeur mesurée pour Φ est en bon accord avec la prédiction $\Phi_{\text{geom}} = \pi$. Le léger décalage du point de bascule (environ 10% en valeur relative) s'explique par l'extension finie des paquets d'ondes dans l'espace des moments. Figure extraite de DUCA, LI et al. (2015).

l'espace des moments \mathbf{q} .

- Au bout de la durée 2τ , les deux paquets d'ondes ont atteint le même moment \mathbf{q}_f et l'état global d'un atome s'écrit

$$|\mathbf{q}_f, \uparrow\rangle + e^{i\Phi} |\mathbf{q}_f, \downarrow\rangle, \quad (\text{IV.22})$$

où Φ contient l'information de phase recherchée.

- Pour accéder à la phase relative Φ , on procède à une dernière impulsion micro-onde $\pi/2$ avec la phase Φ_{MW} et on mesure la population dans les deux états de spin

$$n_{\uparrow, \downarrow} \propto 1 \pm \cos(\Phi + \Phi_{\text{MW}}). \quad (\text{IV.23})$$

Comme toujours, Φ contient à la fois la phase géométrique et la différence des phases dynamiques accumulées sur chacun des bras de l'interféromètre. En principe, les phases dynamiques accumulées sur chaque bras de l'interféromètre sont identiques par symétrie. En pratique, DUCA, LI et al. (2015) ont calibré la phase dynamique résiduelle grâce l'interféromètre d'aire nulle obtenu en inversant l'accélération du réseau au moment du pulse π .

Le résultat final de cette expérience, indiqué sur la figure IV.11, montre que la phase entre les deux bras de l'interféromètre est $\Phi \sim \pi$ si les deux chemins passent de part et d'autre d'un point de Dirac, et $\Phi \sim 0$ sinon. C'est une confirmation directe de l'enroulement de phase autour d'un point de Dirac.

2 Caractérisation "géométrique" de la topologie

Après avoir étudié un modèle à deux bandes concret, correspondant au réseau hexagonal du graphène, nous abordons maintenant la caractérisation de la nature topologique possible des bandes qui émergent dans ce type de modèle. Nous allons nous intéresser dans ce paragraphe à une caractérisation géométrique, qui sera fondée sur la sphère de Bloch. Nous allons proposer un critère pour disposer d'une bande topologiquement non triviale, qui est son recouvrement total quand \mathbf{q} décrit l'ensemble des valeurs possibles. Dans la partie suivante (§3), nous ferons ensuite le lien avec un critère plus physique, fondée sur la quantification de la conductance de Hall.

2-1 Le recouvrement de la sphère de Bloch

Comme la partie précédente, nous nous intéressons ici à un modèle de liaisons fortes avec deux sites A et B par cellule unité. Commençons donc par en rappeler les ingrédients principaux :

- L'hamiltonien \hat{H}_q dans ce modèle de liaisons fortes s'écrit de manière générale

$$\hat{H}_q = E_0(q) \hat{1} - \mathbf{h}(q) \cdot \hat{\sigma} \quad (\text{IV.24})$$

où E_0 et \mathbf{h} sont des fonctions périodiques de \mathbf{q} sur la zone de Brillouin. Nous ne nous limitons pas nécessairement aux couplages entre proches voisins, les fonctions E_0 et \mathbf{h} pouvant donc différer de ce que nous avons trouvé pour le graphène.

- Les énergies propres sont $E_0 \pm |\mathbf{h}|$.
- En dehors des points de Dirac, pour lesquels le vecteur $\mathbf{h}(q)$ s'annule, on peut introduire le vecteur unitaire

$$\mathbf{n}(q) = \frac{\mathbf{h}(q)}{|\mathbf{h}(q)|} \quad (\text{IV.25})$$

que l'on caractérise par ses angles polaires et azimutaux $[\theta_q, \phi_q]$ en coordonnées sphériques. L'hamiltonien \hat{H}_q s'écrit donc

$$\hat{H}_q = E_0 \hat{1} - |\mathbf{h}| \begin{pmatrix} \cos \theta & e^{-i\phi} \sin \theta \\ e^{i\phi} \sin \theta & -\cos \theta \end{pmatrix}. \quad (\text{IV.26})$$

- On va s'intéresser à la bande d'énergie la plus basse $E_0 - |\mathbf{h}|$, associée au vecteur propre

$$|u_q^{(-)}\rangle = \begin{pmatrix} \cos(\theta/2) \\ e^{i\phi} \sin(\theta/2) \end{pmatrix}, \quad (\text{IV.27})$$

avec le même choix de jauge qu'aux chapitres précédents, à savoir une première composante réelle, positive ou nulle.

- À toute valeur de \mathbf{q} , on peut donc associer le point de la sphère de Bloch de coordonnées (θ, ϕ) (c'est-à-dire le vecteur $\mathbf{n}(q)$), qui détermine de manière unique l'état propre $|u_q^{(-)}\rangle$.

Sur le plan de la topologie, la caractérisation d'un hamiltonien \hat{H}_q est donc donnée par l'application :

$$\mathbf{q} = (q_x, q_y) \longrightarrow \mathbf{n}_q = \begin{pmatrix} \cos \phi_q \sin \theta_q \\ \sin \phi_q \sin \theta_q \\ \cos \theta_q \end{pmatrix}, \quad (\text{IV.28})$$

qui va de la zone de Brillouin vers la sphère de Bloch. Rappelons la périodicité de \hat{H}_q vis-à-vis des quasi-moments \mathbf{q} quand on leur ajoute un vecteur du réseau réciproque, par exemple $\mathbf{b}_{1,2}$ pour le réseau du graphène (figure

IV.2). La zone de Brillouin possède donc une structure de tore et les zones atteintes sur la sphère de Bloch quand \mathbf{q} explore la zone de Brillouin sont les mêmes que quand \mathbf{q} explore l'ensemble du plan (q_x, q_y) .

Pour préciser la caractérisation de $\hat{H}_{\mathbf{q}}$, rappelons les deux résultats que nous avons trouvés à une dimension.

- Pour les hamiltoniens de type SSH, où la trajectoire 1D de $\mathbf{n}(q)$ est confinée sur l'équateur de la sphère de Bloch, le classement se fait en fonction du nombre d'enroulements autour de l'équateur. Ce critère permet de déterminer de manière non ambiguë l'existence d'éventuels états de bord.
- Pour les pompes géométriques, c'est-à-dire les systèmes 1D évoluant dans le temps et donc effectivement bi-dimensionnels, nous avons classé ces systèmes selon la couverture de la sphère de Bloch quand le vecteur $\mathbf{n}(q, t)$ décrit le rectangle $[-\pi/a, +\pi/a] \times [0, T]$. Nous avons appelé *topologique* un système tel que $\mathbf{n}(q, t)$ recouvre entièrement la sphère de Bloch, ce cas correspondant à un déplacement de matière non nul et quantifié dans un cycle de pompe.

Dans les deux cas, nous nous sommes donc convaincus que cette caractérisation d'origine purement mathématique correspondait à des propriétés physiques bien claires.

Nous allons adopter ici une définition similaire : nous allons caractériser $\hat{H}_{\mathbf{q}}$ par la manière selon laquelle $\mathbf{n}(\mathbf{q})$ entoure la sphère de Bloch quand \mathbf{q} décrit toute la zone de Brillouin. Si $\mathbf{n}(\mathbf{q})$ ne recouvre pas toute la sphère, nous dirons que nous sommes dans une situation *normale* ou encore *topologiquement triviale*. Si au contraire $\mathbf{n}(\mathbf{q})$ recouvre entièrement la sphère, la situation sera qualifiée de *topologique* ou encore *topologiquement non triviale*.

La définition mathématique précise de ce recouvrement se fait à partir du nombre d'enveloppements

$$\mathcal{C} = -\frac{1}{4\pi} \iint_{\text{ZB}} \mathbf{n} \cdot [(\partial_{q_x} \mathbf{n}) \times (\partial_{q_y} \mathbf{n})] dq_x dq_y. \quad (\text{IV.29})$$

C'est une propriété importante de la géométrie différentielle que la quantité \mathcal{C} ainsi définie est toujours un entier et peut donc jouer le rôle d'invariant topologique. En pratique, nous rencontrerons essentiellement des situations pour lesquelles $\mathcal{C} = 0$ (bande normale, pas d'enveloppement)

et $|\mathcal{C}| = 1$ (bande topologique, avec un enveloppement). Cette définition peut être vue comme la généralisation à 2D du nombre d'enroulements que nous avons défini à 1D dans le cadre du modèle SSH (cours 1) :

$$\mathcal{N} = \frac{1}{2\pi} \int_{\text{ZB}} \frac{d\phi}{dq} dq, \quad (\text{IV.30})$$

où ϕ était l'angle azimutal définissant le vecteur \mathbf{n} .

2-2 Le cas du graphène

Dans le cas du graphène, nous avons vu que l'hamiltonien $\hat{H}_{\mathbf{q}}$ s'écrit

$$\hat{H}_{\mathbf{q}} = -\mathbf{h}(\mathbf{q}) \cdot \hat{\sigma} \quad \text{avec} \quad \mathbf{h} = J \begin{pmatrix} 1 + \cos(\mathbf{q} \cdot \mathbf{a}_1) + \cos(\mathbf{q} \cdot \mathbf{a}_2) \\ \sin(\mathbf{q} \cdot \mathbf{a}_1) + \sin(\mathbf{q} \cdot \mathbf{a}_2) \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (\text{IV.31})$$

Les vecteurs \mathbf{h} et $\mathbf{n} = \mathbf{h}/|\mathbf{h}|$ sont donc toujours dans le plan équatorial. L'application $\mathbf{q} \rightarrow \mathbf{n}(\mathbf{q})$ ne peut donc évidemment pas recouvrir l'ensemble de la sphère de Bloch (figure IV.12).

2-3 Couverture partielle ("triviale")

Pour obtenir un recouvrement de la sphère de Bloch s'étendant au delà de son équateur, il faut ajouter une composante $h_z(\mathbf{q}) \hat{\sigma}_z$ à l'hamiltonien. Le plus simple pour cela est de donner une énergie opposée $\mp\Delta$ aux deux sites A et B , de sorte que l'hamiltonien $\hat{H}_{\mathbf{q}}$ devient

$$\hat{H}_{\mathbf{q}} = - \begin{pmatrix} \Delta & h_x(\mathbf{q}) - ih_y(\mathbf{q}) \\ h_x(\mathbf{q}) + ih_y(\mathbf{q}) & -\Delta \end{pmatrix}, \quad \text{soit } h_z = \Delta \quad (\text{IV.32})$$

avec les énergies propres :

$$E_{\mathbf{q}}^{\pm} = \pm [h_x^2(\mathbf{q}) + h_y^2(\mathbf{q}) + \Delta^2]^{1/2}. \quad (\text{IV.33})$$

Le contact aux points de Dirac disparaît et on obtient deux bandes d'énergie disjointes (figure IV.13).

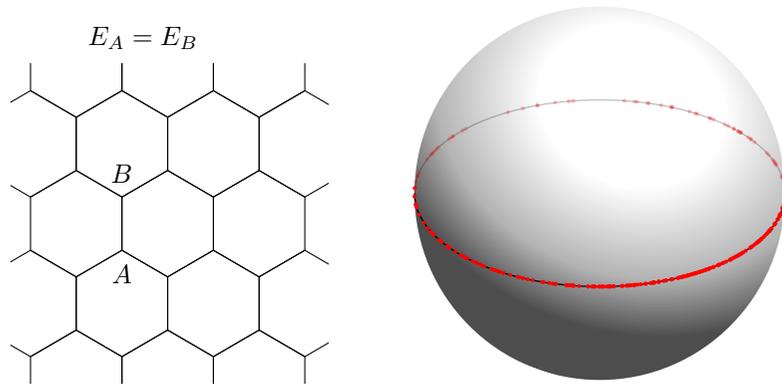


FIGURE IV.12. Correspondance entre la zone de Brillouin du réseau hexagonal et la sphère de Bloch, avec la même énergie pour les sites A et B : seul l'équateur de la sphère de Bloch est atteint. Les points rouges ont été obtenus par un tirage au sort uniforme de \mathbf{q} dans la zone de Brillouin.

Même si une surface étendue de la sphère de Bloch peut désormais être couverte quand \mathbf{q} décrit l'ensemble de la zone de Brillouin, il est clair que le critère de recouvrement total de la sphère de Bloch que nous avons posé au paragraphe précédent ne peut pas être réalisé. En effet, l'angle θ défini par

$$\cos(\theta) = \frac{\Delta}{[h_x^2 + h_y^2 + \Delta^2]^{1/2}} \quad (\text{IV.34})$$

est toujours inférieur à $\pi/2$ si Δ est positif. Tous les états de la bande inférieure $|u_{\mathbf{q}}^{(-)}\rangle$ ont donc une image dans l'hémisphère nord de la sphère de Bloch (figure IV.14); cette bande inférieure ne peut pas être qualifiée de topologique selon le critère que nous avons fixé puisque tous les points de la sphère ne sont pas atteints. Il en va de même pour la bande supérieure : tous ses états $|u_{\mathbf{q}}^{(+)}\rangle$ ont une image dans l'hémisphère sud de la sphère de Bloch.

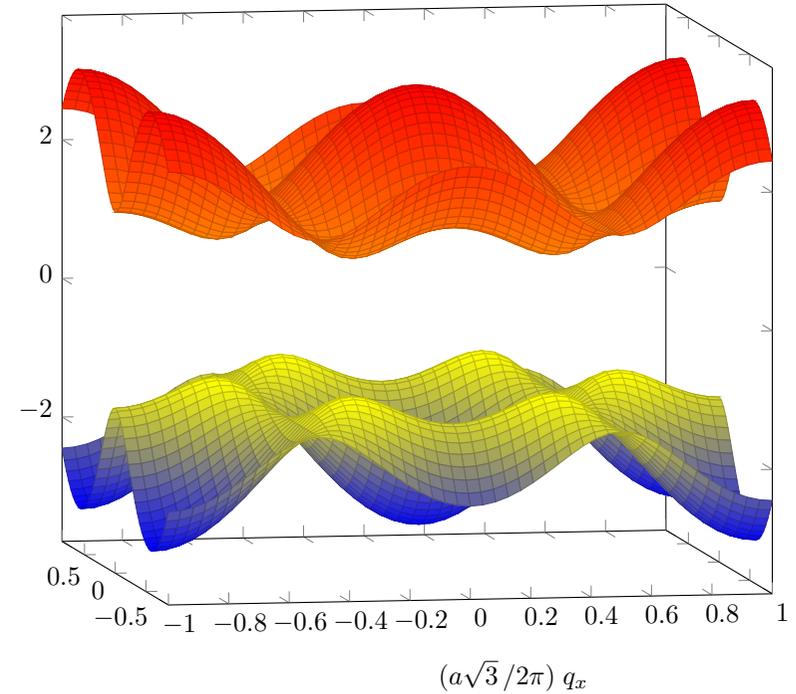


FIGURE IV.13. Bandes d'énergie obtenues pour le réseau hexagonal avec couplages entre proches voisins et une énergie sur site $\pm\Delta$ avec $\Delta = J$.

2-4 Couverture totale ("non triviale")

Pour terminer cette partie consacrée à l'argument "géométrique" fondé sur le recouvrement de la sphère de Bloch, donnons un exemple d'hamiltonien $\hat{H}_{\mathbf{q}}$ qui remplit ce but. Considérons une "légère" modification de (IV.32) où la quantité h_z dépend elle-même de \mathbf{q} :

$$\hat{H}_{\mathbf{q}} = - \begin{pmatrix} h_z(\mathbf{q}) & h_x(\mathbf{q}) - ih_y(\mathbf{q}) \\ h_x(\mathbf{q}) + ih_y(\mathbf{q}) & -h_z(\mathbf{q}) \end{pmatrix} \quad (\text{IV.35})$$

avec

$$h_z(\mathbf{q}) = \Delta_0 \{-\sin(\mathbf{q} \cdot \mathbf{a}_1) + \sin(\mathbf{q} \cdot \mathbf{a}_2) + \sin[\mathbf{q} \cdot (\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2)]\} \quad (\text{IV.36})$$

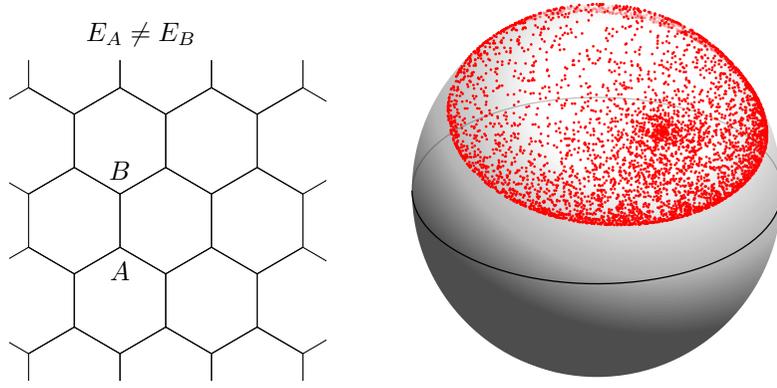


FIGURE IV.14. Correspondance entre la zone de Brillouin du réseau hexagonal (avec $\Delta = J$) et la couverture (partielle) de la sphère de Bloch par l'état $|u_{\mathbf{q}}^{(-)}\rangle$ de la bande fondamentale. Les points rouges ont été obtenus par un tirage au sort uniforme de \mathbf{q} dans la zone de Brillouin.

Nous ne chercherons pas à justifier ici cette forme, qui apparaîtra naturellement au cours prochain quand nous étudierons le modèle de HALDANE (1988), en ajoutant des couplages aux seconds voisins. Le point important pour nous à ce stade est que l'ensemble de la sphère de Bloch est recouvert de manière non triviale par l'état $|u_{\mathbf{q}}^{(-)}\rangle$ quand \mathbf{q} explore l'ensemble de la zone de Brillouin (figure IV.15). De manière plus quantitative, le calcul du nombre d'enveloppement à partir de (V.14) donne $|\mathcal{C}| = 1$, confirmant la nature topologiquement non triviale de la bande ainsi obtenue.

Lien avec la pompe adiabatique du modèle Rice–Mele. Un autre exemple de couverture non triviale de la sphère de Bloch est fourni par notre étude de la pompe adiabatique du cours précédent; nous avons trouvé dans cette étude une couverture totale de la sphère de Bloch en envoyant un état du système de moment q à l'instant t sur la sphère de Bloch :

$$(q, t) \rightarrow \mathbf{n}, \quad (\text{IV.37})$$

quand q décrit l'intervalle $[-\pi/a, \pi/a]$ et t l'intervalle $[0, T]$ avec des conditions aux limites périodiques. Si on remplace formellement q par q_x et t par

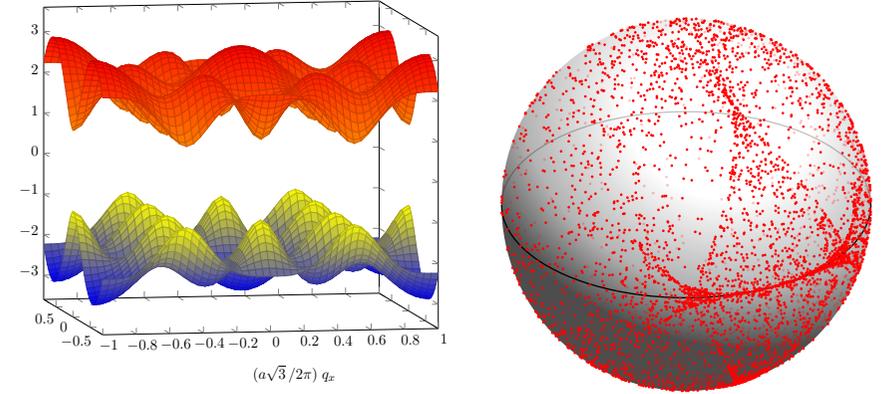


FIGURE IV.15. Bandes d'énergie (gauche) et couverture totale de la sphère de Bloch par l'état $|u_{\mathbf{q}}^{(-)}\rangle$ (droite), obtenues en disposant les termes $\pm h_z(\mathbf{q})$ donnés en (IV.36) sur la diagonale de $\hat{H}_{\mathbf{q}}$ (avec $\Delta_0 = J$). Nous verrons au prochain chapitre que ces termes apparaissent dans le modèle de Haldane, prenant en compte des couplages complexes aux seconds voisins. Les points rouges ont été obtenus par un tirage au sort uniforme de \mathbf{q} dans la zone de Brillouin.

q_y dans ce problème, on aboutit à la couverture recherchée. Ainsi la trajectoire circulaire dans le plan (J', Δ) centrée en $(J, 0)$ et de rayon J envisagée au cours précédent se transcrit pour les variables (q_x, q_y) :

$$\hat{H}_{\mathbf{q}} = -J \begin{pmatrix} \sin(q_y a) & 1 + \cos(q_y a) + e^{-iq_x a} \\ 1 + \cos(q_y a) + e^{+iq_x a} & -\sin(q_y a) \end{pmatrix}. \quad (\text{IV.38})$$

3 Caractérisation "physique" de la topologie

Après cet "argument d'autorité" qualifiant de topologique une bande telle que le nombre d'enveloppements \mathcal{C} soit différent de 0, nous allons maintenant passer à une caractérisation plus physique de la topologie possible d'une bande d'énergie, fondée sur la notion de *transport quantifié*.

Pour cela, nous allons nous inspirer directement des concepts développés pour l'étude de l'effet Hall quantique. Nous allons les détailler sur un modèle général de système périodique, en quittant donc momentanément

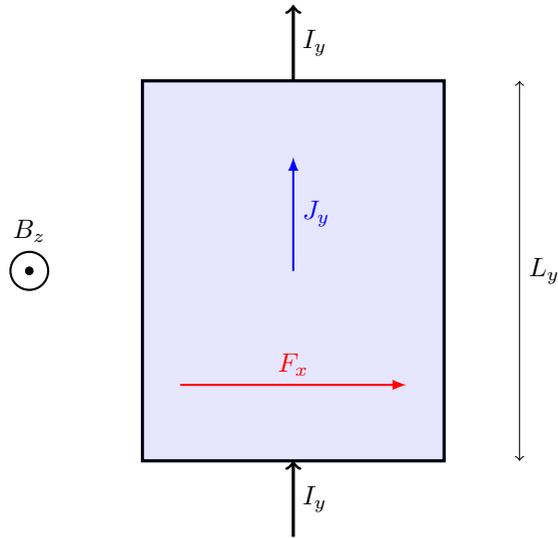


FIGURE IV.16. Représentation schématique d'une expérience d'effet Hall. L'application d'une force F_x selon la direction x induit une densité de courant J_y selon la direction y . Le champ magnétique appliqué est perpendiculaire au plan.

le modèle à deux bandes. Nous retrouverons bien sûr ce modèle à deux bandes à la fin de notre raisonnement et nous vérifierons que notre critère physique fondé sur un transport quantifié coïncide avec le critère géométrique décrit au paragraphe précédent.

3-1 L'effet Hall quantique

La découverte de l'effet Hall quantique entier et les travaux théoriques ont suivi ont permis d'établir une correspondance entre la nature topologique d'une bande d'énergie et la conductivité de cette bande. Plus précisément, une expérience d'effet Hall quantique consiste très schématiquement à (cf. figure IV.16) :

- prendre un échantillon bi-dimensionnel rectangulaire $[0, L_x] \times [0, L_y]$ contenant un "gaz d'électrons" (puits quantique) que l'on place dans

un champ magnétique orienté selon z ;

- appliquer une tension continue V_x entre les deux côtés opposés $x = 0$ et $x = L_x$, correspondant à un champ électrique \mathcal{E} parallèle à l'axe x avec $\mathcal{E}_x = V_x/L_x$. Dans le cadre d'expériences menées avec des atomes neutres, cette tension est simplement remplacée par une force F uniforme parallèle à l'axe x ;
- mesurer l'intensité I_y (ou la densité de courant $J_y = I_y/L_x$) qui circule dans la direction y .

L'intensité I_y , quand elle n'est pas nulle, est proportionnelle à la tension V_x . On définit ainsi le tenseur⁷ de conductivité de Hall σ_{yx} par

$$I_y = \sigma_{yx} V_x \Leftrightarrow J_y = \sigma_{yx} \mathcal{E}_x \tag{IV.39}$$

et le résultat spectaculaire de l'effet Hall quantique (entier) est la quantification de cette conductivité :

$$\sigma_{yx} = \frac{e^2}{h} n \tag{IV.40}$$

où n est un entier positif, négatif ou nul, e la charge des particules conductrices et h la constante de Planck. Cette quantification avec un entier n donné reste valable sur un plateau de champ magnétique, avant de basculer vers l'entier $n + 1$ quand on diminue le champ magnétique.

L'entier n a une origine topologique ; plus précisément, il révèle la topologie des bandes d'énergie peuplées pour un champ magnétique donné. Le traitement désormais traditionnel de l'effet Hall quantique consiste à utiliser la théorie de la réponse linéaire pour calculer σ_{yx} pour les bandes d'énergie occupées (THOULESS, KOHMOTO et al. 1982). Le résultat fait intervenir un nombre de Chern (topologique) relié à la courbure de Berry de ces bandes.

Dans ce qui suit, nous allons adopter une démarche légèrement différente de ce traitement traditionnel. Nous allons faire une analyse locale de la dynamique d'un paquet d'ondes dans la zone de Brillouin. Pour une bande pleine, nous retrouverons bien sûr les résultats connus, mais ce traitement sera mieux adapté aux expériences récentes menées avec des atomes ou des photons. Ces expériences permettent en effet de travailler

7. On a par symétrie $\sigma_{xy} = -\sigma_{yx}$.

avec des bandes qui ne sont que partiellement remplies et elles donnent accès à des informations plus "riches" que la simple conductivité σ_{yx} .

3-2 Evolution du moment q

Pour mener notre analyse locale, nous allons considérer une particule placée dans le potentiel périodique $V(\mathbf{r})$ à deux dimensions ($\mathbf{r} = (x, y)$). Pour fixer les idées, nous supposons la particule préparée à l'instant $t = 0$ dans l'état de Bloch \mathbf{q}_0 de la bande fondamentale $n = 0$:

$$\Psi_{t=0}(\mathbf{r}) \equiv \psi_{\mathbf{q}_0}^{(0)}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{q}_0 \cdot \mathbf{r}} u_{\mathbf{q}_0}^{(0)}(\mathbf{r}), \quad (\text{IV.41})$$

ou bien dans un paquet d'ondes centré sur ce moment \mathbf{q}_0 et de largeur faible devant la taille de la zone de Brillouin. Pour simuler une expérience d'effet Hall quantique, nous supposons qu'une force uniforme (et dépendant éventuellement du temps) \mathbf{F}_t parallèle à l'axe x est appliquée à la particule en plus du potentiel $V(\mathbf{r})$. L'hamiltonien décrivant le mouvement de la particule est donc

$$\hat{H}_t = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V(\hat{\mathbf{r}}) - \mathbf{F}_t \cdot \hat{\mathbf{r}}. \quad (\text{IV.42})$$

Nous allons procéder en deux temps, en regardant séparément l'évolution $\frac{d\mathbf{q}}{dt}$ du moment \mathbf{q} de la particule et l'évolution $\frac{d\langle \mathbf{r} \rangle}{dt}$ de sa position moyenne, c'est-à-dire sa vitesse.

La première partie de notre raisonnement va consister à retrouver le phénomène des oscillations de Bloch, c'est-à-dire l'équation d'évolution très simple pour le moment \mathbf{q} :

$$\hbar \frac{d\mathbf{q}}{dt} = \mathbf{F}. \quad (\text{IV.43})$$

Ce phénomène a déjà été abordé dans le cours 2012-13 et nous rappelons ici les étapes qui permettent d'établir ce résultat.

Du fait de la présence de la force \mathbf{F} , le problème n'est plus périodique d'espace, et il semble que le théorème de Bloch ne puisse plus être invoqué. Toutefois il est simple de retrouver un problème périodique. Il suffit de

faire la transformation unitaire générée par l'opérateur

$$\hat{U}_t = \exp[-i\hat{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{A}_t] \quad \text{avec} \quad \mathbf{A}_t = \frac{1}{\hbar} \int_0^t \mathbf{F}_{t'} dt' \quad (\text{IV.44})$$

pour obtenir l'hamiltonien transformé

$$\begin{aligned} \hat{H}_t &= \hat{U}_t \hat{H}_t \hat{U}_t^\dagger + i\hbar \frac{d\hat{U}_t}{dt} \hat{U}_t^\dagger \\ &= \frac{(\hat{\mathbf{p}} + \hbar \mathbf{A}_t)^2}{2m} + V(\hat{\mathbf{r}}) \end{aligned} \quad (\text{IV.45})$$

qui est bien périodique d'espace. Nous allons donc nous intéresser à l'évolution de l'état de la particule après cette transformation unitaire

$$\tilde{\Psi}_t(\mathbf{r}) = \hat{U}_t \Psi_t(\mathbf{r}) \quad (\text{IV.46})$$

en remarquant que les deux états Ψ et $\tilde{\Psi}$ coïncident en $t = 0$.

On peut alors raisonner de la manière suivante pour cet hamiltonien transformé :

- On part à l'instant initial d'un état de Bloch de quasi-moment \mathbf{q}_0 . Comme l'hamiltonien \hat{H}_t est périodique d'espace, on va rester à chaque instant dans un état de Bloch

$$\tilde{\Psi}_t(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{q}_0 \cdot \mathbf{r}} u_t(\mathbf{r}) \quad (\text{IV.47})$$

où $u_t(\mathbf{r})$ est une fonction périodique sur le réseau.

- En reportant cette expression de $\tilde{\Psi}_t$ dans l'équation de Schrödinger, on trouve que la fonction périodique $u_t(\mathbf{r})$ doit être solution de

$$i\hbar \frac{\partial u_t}{\partial t} = \left\{ \frac{[\hat{\mathbf{p}} + \hbar(\mathbf{q}_0 + \mathbf{A}_t)]^2}{2m} + V(\mathbf{r}) \right\} u_t(\mathbf{r}). \quad (\text{IV.48})$$

Il s'agit donc d'une évolution sous l'effet de l'hamiltonien $\hat{H}_{\mathbf{q}_0 + \mathbf{A}_t}$, où

$$\hat{H}_{\mathbf{q}} = \frac{(\hat{\mathbf{p}} + \hbar \mathbf{q})^2}{2m} + V(\mathbf{r}) \quad (\text{IV.49})$$

est l'hamiltonien usuel permettant de déterminer la partie périodique des fonctions de Bloch. On se retrouve donc face à un problème usuel

d'hamiltonien dépendant d'un paramètre extérieur, en l'occurrence \mathbf{A}_t , pour lequel les fonctions propres sont connues à chaque instant (les $u_{\mathbf{q}}^{(n)}$).

- Si la bande fondamentale est à chaque instant séparée des bandes supérieures (pas de point de Dirac!) et si la force F évolue lentement dans le temps, la particule va rester à chaque instant dans la bande fondamentale et suivre quasi-adiabatement l'état propre $u_{\mathbf{q}_0+\mathbf{A}_t}^{(0)}$. Si l'on revient à l'état de la particule avant transformation unitaire

$$\Psi_t(\mathbf{r}) = \hat{U}_t^\dagger \tilde{\Psi}_t(\mathbf{r}) = e^{i(\mathbf{q}_0+\mathbf{A}_t)\cdot\mathbf{r}} u_{\mathbf{q}_0+\mathbf{A}_t}^{(0)}(\mathbf{r}) \quad (\text{IV.50})$$

on trouve que cet état coïncide (à une phase près) avec l'état de Bloch de la bande fondamentale de quasi-moment

$$\mathbf{q}_t = \mathbf{q}_0 + \mathbf{A}_t \quad (\text{IV.51})$$

d'où l'équation d'évolution recherchée (IV.43).

Le moment \mathbf{q} parcourt donc la zone de Brillouin de manière uniforme au cours du temps. Du fait de la structure périodique de cette zone, on obtient un mouvement périodique, l'oscillation de Bloch, le long de l'axe parallèle à la force F .

Ceci termine la première partie de notre analyse, en nous donnant l'évolution du quasi-moment. Nous allons maintenant nous intéresser à l'évolution de la position de la particule.

3-3 La vitesse "anormale" ou "anormale"

Pour déterminer l'évolution de la vitesse moyenne de la particule, nous allons faire un raisonnement très proche de celui que nous avons mis en place pour l'analyse de la pompe géométrique à la partie 5 du cours 3.

Partons de l'expression de l'état de la particule à l'ordre 1 du développement à la base de l'approximation adiabatique pour l'hamiltonien $\hat{H}_{\mathbf{q}+\mathbf{A}_t}$:

$$|u_t\rangle = |u_{\mathbf{q}_t}^{(0)}\rangle + i\hbar \sum_{n \neq 0} |u_{\mathbf{q}_t}^{(n)}\rangle \frac{\langle u_{\mathbf{q}_t}^{(n)} | \partial_t u_{\mathbf{q}_t}^{(0)} \rangle}{E_{\mathbf{q}_t}^{(n)} - E_{\mathbf{q}_t}^{(0)}} + \dots \quad (\text{IV.52})$$

Dans cette équation, la dépendance en t de l'état $u_{\mathbf{q}_t}^{(0)}$ provient de la variation de $\mathbf{A} = \int^t \mathbf{F}_{t'} dt'$. Pour une force $\mathbf{F} = F_x \mathbf{u}_x$ alignée avec l'axe x , on a donc

$$\hbar |\partial_t u_{\mathbf{q}_t}^{(0)}\rangle = F_x |\partial_{q_x} u_{\mathbf{q}_t}^{(0)}\rangle \quad (\text{IV.53})$$

où l'on a utilisé l'équation du mouvement de \mathbf{q} trouvée plus haut [cf. (IV.43)]. Le petit paramètre du développement (IV.52) est donc

$$\frac{F_x a}{\Delta E} \ll 1 \quad (\text{IV.54})$$

où on a posé que l'échelle de quasi-moment sur laquelle $|u_{\mathbf{q}}^{(0)}\rangle$ varie est de l'ordre de la taille $1/a$ de la zone de Brillouin et où ΔE représente un écart typique entre deux bandes d'énergie.

Nous allons évaluer à l'ordre 1 en ce petit paramètre la moyenne de l'opérateur vitesse

$$\hat{v} = \frac{\hat{\mathbf{p}}}{m} = -i \frac{\hbar}{m} \nabla_{\mathbf{r}} \quad (\text{IV.55})$$

pour l'état de Bloch $e^{i\mathbf{q}_t \cdot \mathbf{r}} u_t(\mathbf{r})$. Le terme dominant provient de la contribution de $|u_{\mathbf{q}_t}^{(0)}\rangle$:

$$\begin{aligned} v_0 &= \left(\langle u_{\mathbf{q}_t}^{(0)} | e^{-i\mathbf{q}_t \cdot \mathbf{r}} \right) \frac{\hat{\mathbf{p}}}{m} \left(e^{i\mathbf{q}_t \cdot \mathbf{r}} | u_{\mathbf{q}_t}^{(0)} \rangle \right) \\ &= \frac{1}{m} \langle u_{\mathbf{q}_t}^{(0)} | (\hat{\mathbf{p}} + \hbar \mathbf{q}_t) | u_{\mathbf{q}_t}^{(0)} \rangle \\ &= \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{q}} E_{\mathbf{q}_t}^{(0)}, \end{aligned} \quad (\text{IV.56})$$

où nous avons utilisé le résultat d'un des deux lemmes établis au chapitre précédent. Cette première contribution est l'expression bien connue de la vitesse de groupe.

Le terme suivant du développement provient de la contribution croisée des termes d'ordre 1 et 2 :

$$v_1 = i \frac{F_x}{m} \sum_{n \neq 0} \langle u_{\mathbf{q}_t}^{(0)} | (\hat{\mathbf{p}} + \hbar \mathbf{q}_t) | u_{\mathbf{q}_t}^{(n)} \rangle \frac{\langle u_{\mathbf{q}_t}^{(n)} | \partial_{q_x} u_{\mathbf{q}_t}^{(0)} \rangle}{E_{\mathbf{q}_t}^{(n)} - E_{\mathbf{q}_t}^{(0)}} + \text{c.c.} \quad (\text{IV.57})$$

En utilisant le second lemme vu au chapitre précédent, cette expression se simplifie pour donner

$$v_1 = -i \frac{F_x}{\hbar} \langle \nabla_{\mathbf{q}} u_{\mathbf{q}_t}^{(0)} | \partial_{q_x} u_{\mathbf{q}_t}^{(0)} \rangle + \text{c.c.} \quad (\text{IV.58})$$

La composante selon x de v_1 s'annule quand on ajoute la contribution du complexe conjugué et on trouve pour la composante selon y

$$v_{1,y} = \frac{F_x \Omega_{q_t}}{\hbar} \quad (\text{IV.59})$$

où l'on a introduit la *courbure de Berry* au point q de la zone de Brillouin

$$\Omega_{\mathbf{q}} = i \left(\langle \partial_{q_x} u_{\mathbf{q}}^{(0)} | \partial_{q_y} u_{\mathbf{q}}^{(0)} \rangle - \langle \partial_{q_y} u_{\mathbf{q}}^{(0)} | \partial_{q_x} u_{\mathbf{q}}^{(0)} \rangle \right) \quad (\text{IV.60})$$

$$= i \left(\langle \nabla_{\mathbf{q}} u_{\mathbf{q}}^{(0)} | \times | \nabla_{\mathbf{q}} u_{\mathbf{q}}^{(0)} \rangle \right) \cdot \mathbf{u}_z. \quad (\text{IV.61})$$

En introduisant la notation vectorielle $\Omega_{\mathbf{q}} = \Omega_{\mathbf{q}} \mathbf{u}_z$, cette contribution à la vitesse s'écrit

$$\mathbf{v}_{1,t} = \frac{1}{\hbar} \Omega_{\mathbf{q}_t} \times \mathbf{F}_t. \quad (\text{IV.62})$$

Cette vitesse est parfois appelée "vitesse anormale" ou "vitesse anormale"⁸. On la rencontre dans les articles de KARPLUS & LUTTINGER (1954) et ADAMS & BLOUNT (1959), ces derniers étant à l'origine de la dénomination *anomalous velocity*. Une présentation "moderne" du formalisme conduisant à l'expression ci-dessus peut être trouvée dans CHANG & NIU (1995).

A cet ordre du calcul, nous obtenons donc la deuxième équation du mouvement donnant la vitesse pour le quasi-moment q :

$$\hbar \mathbf{v}_{\mathbf{q}} = \nabla_{\mathbf{q}} E_{\mathbf{q}}^{(0)} + \Omega_{\mathbf{q}} \times \mathbf{F} \quad (\text{IV.63})$$

qui vient compléter celle écrite en (IV.43) pour l'évolution du moment q .

Ordres de grandeurs. En reprenant l'idée que l'énergie $E_{\mathbf{q}}^{(0)}$ et l'état de Bloch $|u_{\mathbf{q}}^{(0)}\rangle$ varient appréciablement sur une échelle q de l'ordre de la taille $1/a$ de la zone de Brillouin, on trouve

$$v_0 \sim \frac{a \Delta E}{\hbar}, \quad v_1 \sim \frac{a^2 F}{\hbar}, \quad (\text{IV.64})$$

8. On pourra préférer l'appellation *anormale* qui signifie littéralement *qui résulte d'une anomalie*.

de sorte que $v_1 \ll v_0$ si la condition de validité (IV.54) est vérifiée⁹. Toutefois nous allons voir dans un instant que pour une bande pleine, la contribution de v_0 s'annule et la conduction est alors entièrement déterminée par v_1 . Il était donc bien nécessaire de pousser notre calcul jusqu'à l'ordre 1 inclus.

3-4 Conductance d'une bande uniformément remplie

Pour retrouver la conductance quantifiée de l'effet Hall, donnons nous un échantillon bi-dimensionnel avec une cellule unité d'aire A_{cell} , la zone de Brillouin correspondante ayant une aire dans l'espace des moments

$$A_{\text{ZB}} = \frac{(2\pi)^2}{A_{\text{cell}}}. \quad (\text{IV.65})$$

Nous considérons la situation où le remplissage de l'échantillon est d'une particule par cellule unité, soit une densité surfacique

$$\rho^{(2D)} = \frac{1}{A_{\text{cell}}}. \quad (\text{IV.66})$$

Ainsi, dans le cadre du modèle de liaisons fortes que nous avons développé pour le graphène, il y a $\gamma = 2$ sites par cellule unité, donc un taux de remplissage de $1/\gamma = 1/2$ particule par site. Comme l'existence de γ sites par cellule unité conduit à γ bandes d'énergie, notre hypothèse sur le remplissage de l'échantillon revient à dire que la bande fondamentale $n = 0$ est pleine et les $\gamma - 1$ bandes supérieures sont vides.

Nous supposons que les particules sont des fermions sans interaction, de sorte que l'opérateur densité à une particule est simplement égal à l'identité dans la base des $|\psi_{\mathbf{q}}^{(0)}\rangle$. Le flux moyen de particules

$$\mathbf{J} = \rho^{(2D)} \langle \mathbf{v} \rangle \quad (\text{IV.67})$$

est donc obtenu en moyennant la vitesse $\mathbf{v}_{\mathbf{q}}$ donnée en (IV.63) sur tous les moments q de la zone de Brillouin :

$$\langle \mathbf{v} \rangle = \frac{1}{A_{\text{ZB}}} \iint_{\text{ZB}} \mathbf{v}_{\mathbf{q}} d^2 q. \quad (\text{IV.68})$$

9. On suppose comparable l'écart entre bandes ΔE qui intervient dans (IV.54) et la largeur de la bande 0 qui intervient ici.

On constate immédiatement que la contribution de $v_0 = \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{q}} E_{\mathbf{q}}^{(0)}$ s'annule car la fonction $E_{\mathbf{q}}^{(0)}$ est régulière et périodique sur la zone de Brillouin. Il ne reste donc que la contribution de $v_1 = \frac{1}{\hbar} \Omega_{\mathbf{q}} \times \mathbf{F}$, soit en prenant la force \mathbf{F} le long de l'axe x et en utilisant (IV.65) :

$$J_y = \sigma_{yx} F_x \quad (\text{IV.69})$$

avec

$$\sigma_{yx} = \frac{1}{\hbar} \mathcal{C} \quad (\text{IV.70})$$

où l'on a introduit le *nombre de Chern*

$$\mathcal{C} = \frac{1}{2\pi} \iint_{\text{ZB}} \Omega_{\mathbf{q}} d^2q. \quad (\text{IV.71})$$

La conductance de Hall sera quantifiée de la manière annoncée¹⁰ en (IV.40) pourvu que le nombre de Chern \mathcal{C} soit un entier. Prouvons maintenant ce résultat important.

3-5 Le nombre de Chern est un entier.

Ce point a en fait déjà été prouvé au chapitre 3 lors de notre étude de la pompe géométrique. La démonstration à faire ici est en tout point semblable. Introduisons la connexion de Berry

$$\mathcal{A}_{\mathbf{q}} = i \langle u_{\mathbf{q}}^{(0)} | \nabla_{\mathbf{q}} u_{\mathbf{q}}^{(0)} \rangle \quad (\text{IV.72})$$

de sorte que

$$\Omega_{\mathbf{q}} = \nabla_{\mathbf{q}} \times \mathcal{A}_{\mathbf{q}}. \quad (\text{IV.73})$$

La formule de Stokes appliquée "naïvement" donne alors pour le nombre de Chern

$$\frac{1}{2\pi} \iint_{\text{ZB}} \Omega_{\mathbf{q}} d^2q \stackrel{?}{=} \frac{1}{2\pi} \oint_{\text{ZB}} \mathcal{A}_{\mathbf{q}} \cdot d\mathbf{q} \quad (\text{IV.74})$$

où le contour correspond au périmètre de la zone de Brillouin. Quand les états $|u_{\mathbf{q}}\rangle$ sont définis de manière périodique sur cette zone, cette intégrale

10. Notons qu'il y a un facteur e^2 d'écart entre les deux expressions, e étant la charge de l'électron. En effet, la conductance habituelle de l'effet Hall caractérise la réponse du courant électrique à un champ électrique \mathcal{E} , alors que l'on regarde ici la réponse du courant de particules à une force \mathbf{F} .

de contour s'annule. On pourrait en déduire que le nombre de Chern est toujours nul. Mais cette conclusion serait incorrecte, car la définition de la connexion de Berry peut présenter une ou plusieurs singularités ponctuelles dans la zone de Brillouin (KOHMOTO 1985).

Deux pistes peuvent être suivies pour contourner cette difficulté.

- La première, déjà décrite dans le cours 3, consiste à se fixer un choix de jauge, puis à utiliser un contour qui évite ces singularités (figure 26 du chapitre 3). Chaque singularité contribue alors par un facteur $\pm 2\pi$ à l'intégrale curviligne. Le nombre de Chern correspond donc à la somme algébrique de ces singularités : il peut donc être non nul, mais ce sera toujours un entier.
- L'autre possibilité consiste à utiliser dans l'espace des moments deux choix de jauge (I) et (II) reliés par la transformation

$$|u_{\mathbf{q}}^{(II)}\rangle = e^{-i\chi_{\mathbf{q}}} |u_{\mathbf{q}}^{(I)}\rangle \quad (\text{IV.75})$$

ce qui entraîne pour les connexions de Berry

$$\mathcal{A}_{\mathbf{q}}^{(II)} = \mathcal{A}_{\mathbf{q}}^{(I)} + \nabla_{\mathbf{q}} \chi_{\mathbf{q}}. \quad (\text{IV.76})$$

Pour une cellule unité à deux sites, le choix de jauge (I) peut correspondre par exemple à celui fait jusqu'à maintenant, avec une première composante de $|u\rangle$ réelle et positive, et le choix de jauge (II) à une deuxième composante de $|u\rangle$ réelle et positive, soit pour la bande inférieure :

$$(I) : |u_{\mathbf{q}}^{(I)}\rangle = \begin{pmatrix} \cos(\theta/2) \\ e^{i\phi} \sin(\theta/2) \end{pmatrix}, \quad (II) : |u_{\mathbf{q}}^{(II)}\rangle = \begin{pmatrix} e^{-i\phi} \cos(\theta/2) \\ \sin(\theta/2) \end{pmatrix} \quad (\text{IV.77})$$

avec simplement $\chi_{\mathbf{q}} = \phi_{\mathbf{q}}$. Nous avons vu au chapitre 3 que la jauge (I) conduit à une singularité en \mathbf{q} quand le pôle sud est atteint, alors que la jauge (II) conduit à une singularité en \mathbf{q} pour le pôle nord. On peut alors séparer la zone de Brillouin en deux¹¹ parties complémentaires : la partie A ne contient pas de singularité pour le choix de jauge (I) et la partie B ne contient pas de singularité pour (II) (figure IV.17). Séparons de la même façon l'intégrale surfacique de la courbure de Berry en deux parties, chacune pouvant être calculée par la formule

11. On peut toujours raffiner en introduisant un troisième choix de jauge en cas de singularités communes à (I) et (II).

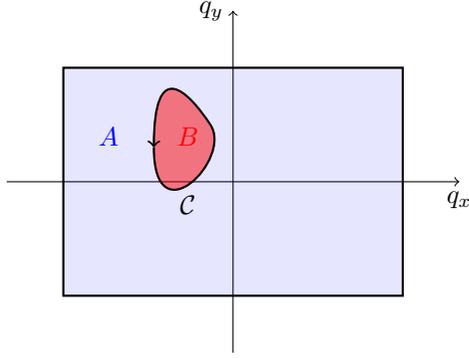


FIGURE IV.17. Une zone de Brillouin (supposée ici rectangulaire) est séparée en deux régions complémentaires A et B , associées à deux choix de jauge différents (I) et (II). Ces régions sont choisies telles qu'il n'y a pas de singularité pour la jauge (I) dans la région A , et idem pour la jauge (II) dans la région B . On note C le contour fermé délimitant la frontière entre ces deux régions.

de Stokes pour la jauge non singulière. En notant C le contour formant la frontière entre les zones A et B , on a :

$$\begin{aligned} \iint_{\text{ZB}} \Omega_{\mathbf{q}} d^2q &= \iint_A \Omega_{\mathbf{q}} d^2q + \iint_B \Omega_{\mathbf{q}} d^2q \\ &= \left(\oint_{\text{ZB}} - \oint_C \right) \mathcal{A}_{\mathbf{q}}^{(I)} \cdot d\mathbf{q} + \oint_C \mathcal{A}_{\mathbf{q}}^{(II)} \cdot d\mathbf{q}. \end{aligned} \quad (\text{IV.78})$$

Comme mentionné plus haut, l'intégrale curviligne de $\mathcal{A}_{\mathbf{q}}^{(I)}$ sur le bord de la zone de Brillouin donne un résultat nul, compte tenu de la périodicité en \mathbf{q} . Il reste donc :

$$\iint_{\text{ZB}} \Omega_{\mathbf{q}} d^2q = \oint_C \left(\mathcal{A}_{\mathbf{q}}^{(II)} - \mathcal{A}_{\mathbf{q}}^{(I)} \right) \cdot d\mathbf{q} = \oint_C \nabla_{\mathbf{q}} \chi_{\mathbf{q}} \cdot d\mathbf{q}. \quad (\text{IV.79})$$

Or pour que le changement de jauge (IV.75) soit monovalué, il faut que cette dernière intégrale soit un multiple de 2π , d'où le résultat.

La conclusion de cette approche fondée sur l'étude du transport nous conduit donc à la définition suivante : une bande d'énergie sera qualifiée

de topologique si et seulement si son nombre de Chern

$$\mathcal{C} = \frac{1}{2\pi} \iint_{\text{ZB}} \Omega_{\mathbf{q}} d^2q. \quad (\text{IV.80})$$

est un entier non nul. Dans le cas contraire $\mathcal{C} = 0$, on dira que la bande est topologiquement triviale. Rappelons par ailleurs que la courbure de Berry $\Omega_{\mathbf{q}}$ de la bande considérée est bien définie si cette bande est isolée de ses voisines par un gap. Notre critère exclut donc les structures de bandes comportant des points de Dirac.

4 La courbure de Berry dans un réseau 2D

4-1 Comparaison de nos deux approches

Nous avons donné dans les parties qui précèdent deux caractérisations possibles de la topologie associée à une bande. La première était explicitement limitée au cas des liaisons fortes et des cellules à deux sites. En écrivant l'hamiltonien sous forme de combinaison de matrices de Pauli,

$$\hat{H}_{\mathbf{q}} = h_0(\mathbf{q})\hat{1} - \mathbf{h}(\mathbf{q}) \cdot \hat{\sigma} \quad (\text{IV.81})$$

et en introduisant le vecteur unitaire

$$\mathbf{n}(\mathbf{q}) = \frac{\mathbf{h}(\mathbf{q})}{|\mathbf{h}(\mathbf{q})|} \quad (\text{IV.82})$$

nous avons introduit l'invariant topologique

$$\mathcal{C} = -\frac{1}{4\pi} \iint_{\text{ZB}} \mathbf{n} \cdot [(\partial_{q_x} \mathbf{n}) \times (\partial_{q_y} \mathbf{n})] dq_x dq_y. \quad (\text{IV.83})$$

qui indique comment le vecteur $\mathbf{n}_{\mathbf{q}}$ recouvre la sphère de Bloch.

La seconde méthode, que nous avons développée pour un hamiltonien périodique général en analysant la conductivité de Hall, nous a conduit à l'invariant

$$\begin{aligned} \mathcal{C} &= \frac{1}{2\pi} \iint_{\text{ZB}} \Omega_{\mathbf{q}} d^2q \\ &= \frac{1}{2\pi} \iint_{\text{ZB}} i \left(\langle \partial_{q_x} u_{\mathbf{q}}^{(0)} | \partial_{q_y} u_{\mathbf{q}}^{(0)} \rangle - \langle \partial_{q_y} u_{\mathbf{q}}^{(0)} | \partial_{q_x} u_{\mathbf{q}}^{(0)} \rangle \right) d^2q. \end{aligned} \quad (\text{IV.84})$$

Comment ces deux définitions se comparent-elles ?

Il est en fait assez simple de montrer qu'elles coïncident pour un modèle de liaisons fortes à deux sites. Nous savons que pour ce modèle à deux bandes, les états $|u_{\mathbf{q}}^{(-)}\rangle$ de la bande fondamentale et le vecteur \mathbf{n} s'expriment chacun en fonction des angles θ et ϕ :

$$|u_{\mathbf{q}}^{(-)}\rangle = \begin{pmatrix} \cos(\theta/2) \\ e^{i\phi} \sin(\theta/2) \end{pmatrix}, \quad \mathbf{n} = \begin{pmatrix} \sin \theta \cos \phi \\ \sin \theta \sin \phi \\ \cos \theta \end{pmatrix} \quad (\text{IV.85})$$

et les arguments des deux intégrales peuvent être évalués en fonction de $\nabla_{\mathbf{q}}\theta$ et $\nabla_{\mathbf{q}}\phi$. Un calcul un peu long, mais sans difficulté, donne pour ces deux termes :

$$\begin{aligned} \mathbf{n} \cdot [(\partial_{q_x} \mathbf{n}) \times (\partial_{q_y} \mathbf{n})] &= \sin \theta (\partial_{q_x} \theta \partial_{q_y} \phi - \partial_{q_y} \theta \partial_{q_x} \phi) \\ &= -2i \left(\langle \partial_{q_x} u_{\mathbf{q}}^{(-)} | \partial_{q_y} u_{\mathbf{q}}^{(-)} \rangle - \langle \partial_{q_y} u_{\mathbf{q}}^{(-)} | \partial_{q_x} u_{\mathbf{q}}^{(-)} \rangle \right) \\ &= -2\Omega_{\mathbf{q}}. \end{aligned} \quad (\text{IV.86})$$

Cette expression peut également s'écrire en fonction du vecteur \mathbf{h} plutôt que \mathbf{n} :

$$\Omega_{\mathbf{q}} = -\frac{1}{2|\mathbf{h}|^3} \mathbf{h} \cdot [(\partial_{q_x} \mathbf{h}) \times (\partial_{q_y} \mathbf{h})] \quad (\text{IV.87})$$

En résumé, mesurer la courbure de Berry dans un modèle à deux bandes revient à mesurer le vecteur unitaire $\mathbf{n}_{\mathbf{q}}$. C'est précisément ce qui a été fait dans l'expérience menée récemment à Hambourg (FLÄSCHNER, REM et al. 2016) et que nous allons décrire en § 4-3. Auparavant, nous allons profiter du lien établi entre topologie et courbure de Berry pour dégager les conditions nécessaires à l'observation de bandes topologiquement non triviales.

4-2 Nombre de Chern et symétries spatio-temporelles

Courbure de Berry et symétrie d'inversion spatiale. Un hamiltonien présente la symétrie de réflexion si pour un choix approprié de l'origine des coordonnées, il satisfait

$$[\hat{S}_0, \hat{H}] = 0 \quad (\text{IV.88})$$

où \hat{S}_0 est l'opérateur linéaire et unitaire *réflexion* (ou *inversion de parité*) défini par son action sur une fonction d'onde $\psi(\mathbf{r})$:

$$\hat{S}_0 \psi(\mathbf{r}) = \psi(-\mathbf{r}) \quad \text{ou encore} \quad \hat{S}_0 |\mathbf{r}\rangle = |-\mathbf{r}\rangle. \quad (\text{IV.89})$$

Considérons un hamiltonien \hat{H} décrivant le mouvement d'une particule dans un potentiel périodique et invariant par réflexion. On en déduit une relation simple entre ses états propres, les fonctions de Bloch $\psi_{\mathbf{q}}^{(n)}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} u_{\mathbf{q}}^{(n)}(\mathbf{r})$. En effet, la transformée par \hat{S}_0 d'un état propre doit encore être un état propre, ce qui entraîne qu'à une phase près $u_{\mathbf{q}}^{(n)}(-\mathbf{r}) = u_{-\mathbf{q}}^{(n)}(\mathbf{r})$. On en déduit alors l'invariance de la courbure de Berry

$$\text{Invariance par réflexion :} \quad \Omega_{\mathbf{q}} = \Omega_{-\mathbf{q}}. \quad (\text{IV.90})$$

Courbure de Berry et renversement du temps. Pour le type de problème considéré ici, dans lequel le spin n'intervient pas, l'opération de renversement du temps consiste sur le plan physique à garder la position inchangée et à inverser le sens de la vitesse. Sur le plan mathématique, l'opération de renversement du temps s'obtient en appliquant l'opérateur antilinéaire et unitaire \hat{K}_0 défini par son action¹² sur une fonction d'onde $\psi(\mathbf{r})$:

$$\hat{K}_0 \psi(\mathbf{r}) = \psi^*(\mathbf{r}). \quad (\text{IV.91})$$

Cette transformation ne change pas la densité de probabilité en position $|\psi(\mathbf{r})|^2$. Pour l'impulsion, l'amplitude de probabilité initiale associée à $\psi(\mathbf{r})$ est bien entendu la transformée de Fourier $\phi(\mathbf{p})$ de $\psi(\mathbf{r})$. La nouvelle amplitude de probabilité en impulsion, qui est la transformée de Fourier de la fonction d'onde transformée $\hat{K}_0 \psi$, est donc $\phi^*(-\mathbf{p})$, ce qui conduit à l'inversion annoncée pour la distribution en vitesse. Pour un hamiltonien périodique et invariant par renversement du temps, un raisonnement similaire au précédent conduit à $(u_{\mathbf{q}}^{(n)}(\mathbf{r}))^* = u_{-\mathbf{q}}^{(n)}(\mathbf{r})$ dont on déduit

$$\text{Invariance par rev. du temps :} \quad \Omega_{-\mathbf{q}} = -\Omega_{\mathbf{q}}. \quad (\text{IV.92})$$

¹² L'opération de renversement du temps suppose que l'on a fait un choix de phase pour les vecteurs de base; en l'occurrence, les kets $|\mathbf{r}\rangle$ sont supposés ici "réels", c'est-à-dire que $\hat{K}_0 |\mathbf{r}\rangle = |\mathbf{r}\rangle$. L'antilinéarité de \hat{K}_0 conduit alors à $\hat{K}_0 (\int \psi(\mathbf{r}) |\mathbf{r}\rangle) = \int \psi^*(\mathbf{r}) |\mathbf{r}\rangle$.

Conséquences. Dans le cadre d'un modèle de liaisons fortes comme ceux qui nous intéressent majoritairement dans ce cours, un hamiltonien est invariant par renversement du temps s'il existe un choix de base des sites A_j, B_j, \dots pour lequel tous les éléments de matrices tunnel sont réels. Quand c'est le cas, la relation (IV.92) entraîne que le nombre de Chern de chaque bande est nul, puisque les éléments de surface autour de \mathbf{q} et $-\mathbf{q}$ ont des contributions opposées à l'intégrale de la courbure de Berry :

$$\text{Invariance par rev. du temps : } \mathcal{C} = \frac{1}{2\pi} \iint \Omega_{\mathbf{q}} d^2q = 0. \quad (\text{IV.93})$$

Pour les problèmes sans spin que nous avons considérés ici, on ne peut avoir une bande topologiquement non triviale qu'en brisant l'invariance par renversement du temps.

Si l'hamiltonien considéré possède en plus une propriété de symétrie par rapport à l'origine, alors la combinaison de (IV.90) et (IV.92) entraîne que la courbure de Berry s'annule en tout point de la zone de Brillouin, la vitesse anormale étant donc elle aussi uniformément nulle :

$$\text{Invariance par réflexion + rev. du temps : } \Omega_{\mathbf{q}} = 0. \quad (\text{IV.94})$$

4-3 Mesure locale de la courbure de Berry

Une procédure possible pour déterminer $\theta_{\mathbf{q}}$ et $\phi_{\mathbf{q}}$ en tout point de la zone de Brillouin dans une situation à deux bandes a été proposée par HAUKE, LEWENSTEIN et al. (2014), puis implémentée par FLÄSCHNER, REM et al. (2016). Le point de départ est la distribution en impulsion associée à l'état $|u_{\mathbf{q}}^{(-)}\rangle$, qui peut être mesurée dans l'expansion balistique résultant de l'extinction soudaine du réseau optique :

$$\begin{aligned} \mathcal{N}(\mathbf{q}) &= f(\mathbf{q}) \left| \cos(\theta_{\mathbf{q}}/2) + e^{i\phi_{\mathbf{q}}} \sin(\theta_{\mathbf{q}}/2) \right|^2 \\ &= f(\mathbf{q}) [1 - \sin \theta_{\mathbf{q}} \cos \phi_{\mathbf{q}}]. \end{aligned} \quad (\text{IV.95})$$

La quantité $f(\mathbf{q})$ correspond à la distribution en impulsion de la fonction de Wannier associée à chaque site A ou B , qui est supposée être beaucoup plus large que les structures pertinentes liées à la variation en \mathbf{q} des angles $\theta_{\mathbf{q}}$ et $\phi_{\mathbf{q}}$. Le point central de (IV.95) est que $\mathcal{N}(\mathbf{q})$ dépend de la phase relative des contributions des deux sites A et B dans l'expression de l'état de

Bloch $|u_{\mathbf{q}}^{(-)}\rangle$. Plus précisément, bien que cette mesure ne soit pas suffisante pour déterminer complètement les angles $\theta_{\mathbf{q}}$ et $\phi_{\mathbf{q}}$, elle fournit la valeur du produit $\sin \theta_{\mathbf{q}} \cos \phi_{\mathbf{q}}$.

Pour aller un cran plus loin, HAUKE, LEWENSTEIN et al. (2014) ont suggéré d'appliquer une trempe soudaine aux paramètres du réseau de sorte que l'hamiltonien devienne

$$\hat{H}'_{\mathbf{q}} = (\hbar\omega_0/2) \hat{\sigma}_z. \quad (\text{IV.96})$$

On laisse alors le gaz évoluer dans le réseau pendant un intervalle de temps t ajustable avant de mesurer la distribution en impulsion. Puisque l'évolution pendant la durée t consiste simplement en l'ajout de la phase $\pm\omega_0 t/2$ aux amplitudes des sites A et B , la distribution en impulsion à l'instant t s'écrit :

$$\mathcal{N}(\mathbf{q}, t) = f(\mathbf{q}) [1 - \sin \theta_{\mathbf{q}} \cos(\phi_{\mathbf{q}} + \omega_0 t)]. \quad (\text{IV.97})$$

En répétant cette procédure pour différentes durées t et en mesurant l'amplitude et la phase du signal correspondant, on a accès à la fois à $\phi_{\mathbf{q}}$ et à $\theta_{\mathbf{q}}$ en tout point \mathbf{q} de la zone de Brillouin.

Cette procédure a été implémentée par FLÄSCHNER, REM et al. (2016) à partir d'un réseau hexagonal de tubes remplis d'atomes fermioniques ^{40}K . Les paramètres initiaux sont choisis de sorte qu'il y ait initialement un grand décalage en énergie $\hbar\omega_{AB}$ entre les sites A et B . On a alors deux bandes plates dans le modèle de liaisons fortes, sans couplage tunnel entre sites, et les atomes sont préparés dans la bande d'énergie la plus basse. Pour établir une dynamique dans ce réseau, FLÄSCHNER, REM et al. (2016) ont appliqué une modulation résonnante à la fréquence $\Omega \approx \omega_{AB}$. Cette modulation est obtenue en faisant vibrer le réseau de manière circulaire grâce à une modulation de phase des trois ondes lumineuses formant le réseau. Nous reviendrons en détail dans les cours prochains sur la description quantitative de ce mécanisme, le seul point important pour nous à ce stade étant que l'on peut ainsi obtenir une courbure de Berry qui peut prendre des valeurs significatives. La trempe nécessaire à la procédure de HAUKE, LEWENSTEIN et al. (2014) est ensuite obtenue en éteignant simplement la modulation résonnante.

Les amplitudes et les phases de l'oscillation temporelle de $\mathcal{N}(\mathbf{q}, t)$ mesurées par FLÄSCHNER, REM et al. (2016) sont montrées en figure IV.18,

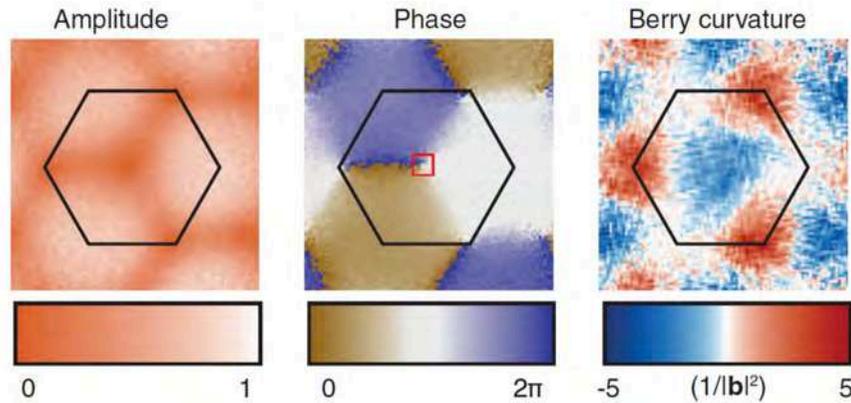


FIGURE IV.18. Amplitude $\propto \sin \theta_{\mathbf{q}}$ (gauche) et phase $\phi_{\mathbf{q}}$ (milieu) obtenues à partir de la mesure de l'oscillation (IV.97) de la distribution en impulsion. Droite : courbure de Berry reconstruite. Figure extraite de FLÄSCHNER, REM et al. (2016).

avec la courbure de Berry reconstruite à partir de

$$\begin{aligned} \Omega_{\mathbf{q}} &= i \left(\langle \partial_{q_x} u_{\mathbf{q}}^{(-)} | \partial_{q_y} u_{\mathbf{q}}^{(-)} \rangle - \langle \partial_{q_y} u_{\mathbf{q}}^{(-)} | \partial_{q_x} u_{\mathbf{q}}^{(-)} \rangle \right) \\ &= \frac{1}{2} \sin \theta_{\mathbf{q}} (\nabla_{\mathbf{q}} \phi_{\mathbf{q}} \times \nabla_{\mathbf{q}} \theta_{\mathbf{q}}) \cdot \mathbf{u}_z. \end{aligned} \quad (\text{IV.98})$$

La "pixellisation" de la zone de Brillouin pour cette reconstruction est très précise, avec plus de 2800 points de mesure \mathbf{q} . Sur cette figure, on distingue très nettement des zones de courbure de Berry positive et d'autres de courbure de Berry négative. Nous avons vu que l'intégrale de $\Omega_{\mathbf{q}}$ sur toute la zone de Brillouin s'écrit $\mathcal{C} \times 2\pi$, où \mathcal{C} est le nombre de Chern de la bande. Pour l'expérience de Hambourg, la courbure de Berry ainsi reconstruite conduit à une valeur de \mathcal{C} compatible avec 0, comme attendu pour ce type de réseau modulé. FLÄSCHNER, REM et al. (2016) mesurent plus précisément $\mathcal{C} = 0.005(6)$.

La méthode proposée par HAUKE, LEWENSTEIN et al. (2014) est inspirée d'une proposition antérieure de ALBA, FERNANDEZ-GONZALVO et al. (2011) (voir aussi GOLDMAN, ANISIMOVAS et al. (2013)). Dans cette proposition, les sites A and B étaient supposés occupés par des états internes $|a\rangle$

et $|b\rangle$ différents. La mesure de la distribution en impulsion peut alors être faite indépendamment pour chaque état interne, ce qui donne accès à la polarisation locale pour la bande inférieure :

$$n_z(\mathbf{q}) \equiv \frac{\hbar_z(\mathbf{q})}{\hbar(\mathbf{q})} = \cos \theta_{\mathbf{q}} = \frac{\mathcal{N}_b(\mathbf{q}) - \mathcal{N}_a(\mathbf{q})}{\mathcal{N}_a(\mathbf{q}) + \mathcal{N}_b(\mathbf{q})}. \quad (\text{IV.99})$$

Les deux autres composantes de \mathbf{n} peuvent également être mesurées en appliquant un couplage cohérent entre $|a\rangle$ et $|b\rangle$ avec une phase et une durée ajustables, de manière à tourner le pseudo-spin pendant l'expansion balistique. Une fois la direction de $\mathbf{n}(\mathbf{q})$ connue en tout point de la zone de Brillouin, la valeur de la courbure de Berry peut être déterminée comme dans l'expérience de Hambourg.

Appendice 1 : couplage entre premiers voisins

Le but de cet appendice est de justifier l'expression de l'hamiltonien $\hat{H}_{\mathbf{q}}$ écrit en (IV.11). Le site A de la cellule localisée en \mathbf{r}_j , que nous notons $|A, \mathbf{r}_j\rangle$, est couplé à 3 sites B : celui de la cellule \mathbf{r}_j et ceux des cellules localisées en $\mathbf{r}_j - \mathbf{a}_1$ et $\mathbf{r}_j - \mathbf{a}_2$ (cf. figure IV.2). La partie de l'hamiltonien concernant ce site est donc :

$$-J(|A, \mathbf{r}_j\rangle\langle B, \mathbf{r}_j| + |A, \mathbf{r}_j\rangle\langle B, \mathbf{r}_j - \mathbf{a}_1| + |A, \mathbf{r}_j\rangle\langle B, \mathbf{r}_j - \mathbf{a}_2|) + \text{H.c.} \quad (\text{IV.100})$$

Partant de la fonction de Bloch donnée en (IV.9) et réécrite ici plus explicitement :

$$|\psi_{\mathbf{q}}\rangle = \sum_j e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_j} (\alpha_{\mathbf{q}}|A, \mathbf{r}_j\rangle + \beta_{\mathbf{q}}|B, \mathbf{r}_j\rangle), \quad (\text{IV.101})$$

l'équation aux valeurs propres pour l'énergie $\hat{H}|\psi_{\mathbf{q}}\rangle = E_{\mathbf{q}}|\psi_{\mathbf{q}}\rangle$ s'écrit quand on la projette sur $\langle A, \mathbf{r}_j|$:

$$-J'\beta_{\mathbf{q}} \left(e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_j} + e^{i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{r}_j - \mathbf{a}_1)} + e^{i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{r}_j - \mathbf{a}_2)} \right) = E_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_j} \alpha_{\mathbf{q}}, \quad (\text{IV.102})$$

ou encore

$$H_{\mathbf{q},AB} = -J' (1 + e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{a}_1} + e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{a}_2}). \quad (\text{IV.103})$$

De même, $H_{\mathbf{q},BA} = H_{\mathbf{q},AB}^*$ et la matrice 2×2 de $\hat{H}_{\mathbf{q}}$ s'écrit pour le couplage entre proches voisins :

$$\hat{H}_{\mathbf{q}} = \begin{pmatrix} 0 & H_{\mathbf{q},AB} \\ H_{\mathbf{q},BA} & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{IV.104})$$

comme indiqué en (IV.11) pour $E_A = E_B = 0$.

Appendice 2 : distribution en impulsion

Considérons une particule préparée dans un état quelconque de la bande fondamentale d'un réseau à deux sites par cellule unité :

$$|\psi\rangle = \int_{\text{ZB}} c_{\mathbf{q}} |\psi_{\mathbf{q}}^{(-)}\rangle d^2q \quad (\text{IV.105})$$

et cherchons sa distribution en impulsion $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$:

$$\mathcal{N}(\mathbf{k}) = |\langle \mathbf{k} | \psi \rangle|^2. \quad (\text{IV.106})$$

Chaque état de Bloch $|\psi_{\mathbf{q}}^{(-)}\rangle$ s'écrit

$$|\psi_{\mathbf{q}}^{(-)}\rangle = \sum_{\mathbf{j}} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_{\mathbf{j}}} (\alpha_{\mathbf{q}} |A_{\mathbf{j}}\rangle + \beta_{\mathbf{q}} |B_{\mathbf{j}}\rangle). \quad (\text{IV.107})$$

Son produit scalaire avec l'onde plane $|\mathbf{k}\rangle$ d'impulsion $\hbar\mathbf{k}$ fait intervenir les deux produits scalaires $\langle \mathbf{k} | A_{\mathbf{j}} \rangle$ et $\langle \mathbf{k} | B_{\mathbf{j}} \rangle$. Introduisons les fonctions de Wannier $w_{A/B}(\mathbf{r})$:

$$w_A(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | A_0 \rangle, \quad w_B(\mathbf{r}) = \langle \mathbf{r} | B_0 \rangle \quad (\text{IV.108})$$

et supposons pour simplifier que ces deux fonctions sont identiques, à une translation $\mathbf{a} \equiv a\mathbf{u}_y$ près :

$$w_B(\mathbf{r}) = w_A(\mathbf{r} - \mathbf{a}). \quad (\text{IV.109})$$

Les fonctions de Wannier d'un site \mathbf{j} quelconque vérifient alors

$$\langle \mathbf{r} | A_{\mathbf{j}} \rangle = w_A(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\mathbf{j}}) \quad \langle \mathbf{r} | B_{\mathbf{j}} \rangle = w_A(\mathbf{r} - \mathbf{r}_{\mathbf{j}} - \mathbf{a}) \quad (\text{IV.110})$$

et on trouve dans l'espace des impulsions

$$\langle \mathbf{k} | A_{\mathbf{j}} \rangle = e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_{\mathbf{j}}} \hat{w}_A(\mathbf{k}), \quad \langle \mathbf{k} | B_{\mathbf{j}} \rangle = e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}_{\mathbf{j}}+\mathbf{a})} \hat{w}_A(\mathbf{k}), \quad (\text{IV.111})$$

où $\hat{w}_A(\mathbf{k})$ désigne la transformée de Fourier de $w_A(\mathbf{r})$.

L'amplitude de l'onde plane \mathbf{k} dans le développement de l'état $|\psi\rangle$ est donc

$$\langle \mathbf{k} | \psi \rangle = \hat{w}_A(\mathbf{k}) \int_{\text{ZB}} d^2q c_{\mathbf{q}} \left\{ \sum_{\mathbf{j}} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_{\mathbf{j}}} (\alpha_{\mathbf{q}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_{\mathbf{j}}} + \beta_{\mathbf{q}} e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}_{\mathbf{j}}+\mathbf{a})}) \right\} \quad (\text{IV.112})$$

La somme sur les sites \mathbf{j} du réseau n'a une contribution non nulle que si $\mathbf{q} = \mathbf{k}$, ce qui donne finalement

$$\langle \mathbf{k} | \psi \rangle = \hat{w}_A(\mathbf{k}) c_{\mathbf{k}} (\alpha_{\mathbf{k}} + \beta_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}}) \quad (\text{IV.113})$$

pourvu que \mathbf{k} soit dans la zone de Brillouin. La situation considérée dans l'expérience de Hambourg correspond à un remplissage uniforme de la bande ($|c_{\mathbf{k}}|$ indépendant de \mathbf{k}). Par ailleurs, le terme $e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}}$ correspondant au décalage de la cellule B par rapport à la cellule a peut être réincorporé dans la phase $\phi_{\mathbf{k}}$, d'où le résultat (IV.95).

Chapitre V

Bandes topologiques et états de bord

Le cours précédent a été consacré à l'établissement d'un critère pour qu'une bande d'énergie d'un réseau périodique à 2D puisse être considérée comme topologique. Ce critère est fondé sur le transport et directement inspiré de l'effet Hall : si cette bande est pleine, une force appliquée selon x doit créer un courant quantifié dans la direction orthogonale y . La quantification de ce courant fait intervenir le nombre de Chern \mathcal{C} de la bande considérée, que l'on calcule à partir de sa courbure de Berry Ω_q :

$$\mathcal{C} = \frac{1}{2\pi} \iint_{\text{ZB}} \Omega_q \, d^2q. \quad (\text{V.1})$$

Concevoir et réaliser des réseaux pour lesquels $\mathcal{C} \neq 0$ n'a rien d'évident. Tout d'abord, nous avons vu que pour des réseaux invariants par renversement du temps et par réflexion, la courbure de Berry Ω_q était nulle en tout point de la zone de Brillouin. Il faut donc briser au moins une de ces deux symétries. Nous avons également vu que si l'on conserve l'invariance par renversement du temps, alors $\Omega_q = -\Omega_{-q}$: l'intégrale de la courbure de Berry sur la zone de Brillouin reste nulle ; on peut avoir localement (dans l'espace des moments) une topologie non triviale si $\Omega_q \neq 0$, mais on n'obtient pas pour une bande pleine la conductance quantifiée recherchée.

Partant d'un réseau 2D simple de période a , décrit dans la limite des liaisons fortes avec des sauts entre premiers voisins, il faut donc briser son invariance par renversement du temps ; pour un problème sans spin, cela impose de réaliser des coefficients tunnels complexes. Deux voies peuvent être considérées pour cela :

- L'une consiste à transposer au réseau la géométrie de l'effet Hall, c'est-à-dire appliquer un champ magnétique uniforme sur ce réseau. Ce champ vient briser l'invariance par translation de période a et peut donner naissance à un spectre d'énergie très riche, avec un grand nombre de sous-bandes d'énergie (HOFSTADTER 1976), nous y reviendrons dans le cours suivant.
- L'autre voie, proposée par HALDANE (1988), consiste à garder la même cellule unité que le réseau initial, c'est-à-dire un modèle à deux bandes, tout en augmentant (légèrement) le nombre de couplages tunnel. C'est elle que nous allons explorer dans ce cours.

Une fois posés les principes du modèle de Haldane, nous verrons comment il a été implémenté en pratique avec des atomes froids dans une expérience menée par JOTZU, MESSER et al. (2014). Nous utiliserons ensuite ce modèle pour expliquer la correspondance *cœur-bord* (*bulk-edge*), c'est-à-dire l'apparition inévitable de canaux de bord à l'interface entre deux zones de topologie différentes. Nous terminerons par la mise en évidence expérimentale de ces canaux de bord sur des systèmes photoniques et nous dirons quelques mots de l'effet Hall de spin. Ce dernier peut être vu comme une généralisation de ces concepts topologiques à des problèmes invariants par renversement du temps, mais pour lesquels deux états de spin (ou de pseudo-spin) subissent des sorts opposés.

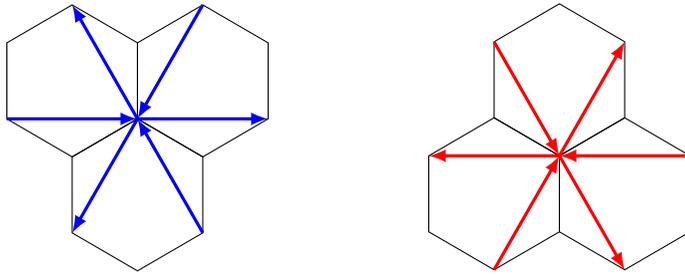


FIGURE V.1. Les couplages tunnel entre seconds voisins dans le modèle de Haldane. À gauche, couplages aux six seconds voisins pour un site A , à droite pour un site B . Le sens de chaque flèche indique le signe de la phase transférée lors d'un saut tunnel, selon les convention de la figure V.2. L'enroulement de phase à l'intérieur d'un hexagone est le même pour les sites A et B (figure V.3).

$$\textcircled{S_1} \longrightarrow \textcircled{S_2} : -J' (e^{+i\phi_0} |S_2\rangle \langle S_1| + \text{H.c.})$$

FIGURE V.2. Convention de signe pour la phase accumulée lors d'un saut tunnel d'amplitude J' entre les sites S_1 et S_2 .

1 Le modèle de Haldane

Le modèle proposé par HALDANE (1988) est une extension du réseau hexagonal rencontré au cours précédent dans lequel un couplage supplémentaire entre seconds voisins (*next-to-nearest neighbors* – NNN) est ajouté. La cellule unité ne change pas et conserve deux sites, que nous noterons A et B comme précédemment. Avec ce modèle, Haldane a montré qu'une bande topologique, caractérisée par un nombre de Chern non nul, peut émerger en l'absence d'un champ magnétique uniforme (ou de moyenne spatiale non nulle). Il s'agit donc d'un problème fondamentalement différent de celui des niveaux de Landau et de leur version discrétisée, c'est-à-dire le modèle de Harper–Hofstadter, que nous rencontrerons au cours suivant.

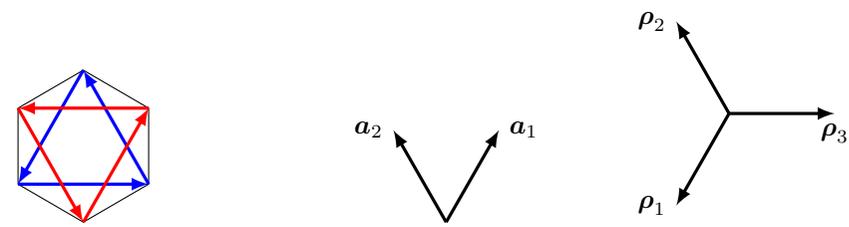


FIGURE V.3. Gauche : liens entre second voisins à l'intérieur d'un hexagone donné dans le modèle de Haldane. Droite : les vecteurs utilisés pour paramétrer les sites et les liens du réseau.

1-1 Nouveaux couplages, nouvelle topologie

Nous avons vu au chapitre 4 que la condition nécessaire pour obtenir une bande topologique, avec un nombre de Chern non nul, était de briser l'invariance par renversement du temps. Dans le modèle de liaisons fortes que nous allons utiliser ici, cela signifie que certains éléments de matrice tunnel doivent être non réels¹.

Le modèle de Haldane consiste à conserver un élément de matrice réel J pour décrire les transitions $A \leftrightarrow B$ entre premiers voisins, et prendre un élément de matrice complexe $J' e^{\pm i\phi_0}$ pour décrire les transitions entre seconds voisins $A \leftrightarrow A$ et $B \leftrightarrow B$ (figures V.1 et V.2). Le choix du signe de la phase $\pm\phi_0$ est tel que sur un cycle au sein d'un hexagone parcouru dans le sens positif, on accumule la phase $+3\phi_0$ pour $A \rightarrow A \rightarrow A$ et $B \rightarrow B \rightarrow B$ (figure V.3). On conserve également la possibilité de dissymétriser les sites A et B en leur donnant une énergie différente $\pm\Delta$.

Par rapport à l'hamiltonien de type graphène qui conduit à un spectre de bande avec des points de Dirac, on introduit donc deux éléments susceptibles d'ouvrir un gap au niveau de ces points : (i) l'énergie sur site $\pm\Delta$ déjà rencontrée au cours précédent et (ii) les couplages $A \leftrightarrow A$ et $B \leftrightarrow B$ proportionnels à $J' e^{\pm i\phi_0}$. Nous allons voir maintenant que ces deux éléments jouent des rôles antagonistes en ce qui concerne l'émergence d'une bande topologiquement non triviale.

¹. et bien sûr que leur phase complexe ne puisse pas être éliminée par un changement de jauge.

1-2 Diagramme de phase

Puisque la périodicité du problème n'est pas modifiée par l'introduction des nouveaux couplages en J' , la cellule unité comporte toujours deux sites et l'hamiltonien périodique \hat{H}_q reste une matrice 2×2 que l'on peut décomposer en trois parties :

— L'énergie sur site $\pm\Delta$:

$$\hat{H}_{0,q} = \begin{pmatrix} -\Delta & 0 \\ 0 & \Delta \end{pmatrix} = -\Delta \hat{\sigma}_z. \quad (\text{V.2})$$

— Le couplage tunnel entre premiers voisins du réseau hexagonal

$$\hat{H}_{1,q} = -J \begin{pmatrix} 0 & 1 + e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{a}_1} + e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{a}_2} \\ 1 + e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{a}_1} + e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{a}_2} & 0 \end{pmatrix}, \quad (\text{V.3})$$

où les vecteurs \mathbf{a}_1 et \mathbf{a}_2 sont définis comme au chapitre précédent par (cf. figure V.3)

$$\mathbf{a}_1 = \frac{\sqrt{3}a}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ \sqrt{3} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{a}_2 = \frac{\sqrt{3}a}{2} \begin{pmatrix} -1 \\ \sqrt{3} \end{pmatrix}. \quad (\text{V.4})$$

Ce couplage fait émerger des points de Dirac \mathbf{Q}_\pm correspondant à l'annulation de la fonction $1 + e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{a}_1} + e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{a}_2}$. On a pour $j = 1, 2$:

$$\cos(\mathbf{Q}_\pm \cdot \mathbf{a}_j) = -\frac{1}{2}, \quad \sin(\mathbf{Q}_\pm \cdot \mathbf{a}_1) = -\sin(\mathbf{Q}_\pm \cdot \mathbf{a}_2) = \pm \frac{\sqrt{3}}{2}. \quad (\text{V.5})$$

— Les couplages entre second voisins; chaque site A est couplé aux 6 autres sites A qui l'entourent et qui forment un hexagone régulier, et il en va de même pour les sites B . Introduisons les trois vecteurs $\boldsymbol{\rho}_\alpha$ avec $\alpha = 1, 2, 3$

$$\boldsymbol{\rho}_1 = -\mathbf{a}_1, \quad \boldsymbol{\rho}_2 = \mathbf{a}_2, \quad \boldsymbol{\rho}_3 = -(\boldsymbol{\rho}_1 + \boldsymbol{\rho}_2), \quad (\text{V.6})$$

représentés sur la figure V.3. Avec la convention adoptée sur la figure V.1, la fonction d'onde est multipliée par $e^{+i\phi_0}$ dans une transition $|A, \mathbf{r}\rangle \rightarrow |A, \mathbf{r} + \boldsymbol{\rho}_\alpha\rangle$ et par $e^{-i\phi_0}$ dans une transition $|A, \mathbf{r}\rangle \rightarrow |A, \mathbf{r} - \boldsymbol{\rho}_\alpha\rangle$ (et inversement pour B).

En sommant ces six contributions, on arrive à (cf. appendice) :

$$\begin{aligned} \hat{H}_{2,q} &= -2J' \begin{pmatrix} \sum_{\alpha=1}^3 \cos(\mathbf{q} \cdot \boldsymbol{\rho}_\alpha - \phi_0) & 0 \\ 0 & \sum_{\alpha=1}^3 \cos(\mathbf{q} \cdot \boldsymbol{\rho}_\alpha + \phi_0) \end{pmatrix} \\ &= -2J' \cos \phi_0 \mathcal{C}_q \hat{1} - 2J' \sin \phi_0 \mathcal{S}_q \hat{\sigma}_z \end{aligned} \quad (\text{V.7})$$

où l'on a posé

$$\mathcal{C}_q = \sum_{\alpha=1}^3 \cos(\mathbf{q} \cdot \boldsymbol{\rho}_\alpha), \quad \mathcal{S}_q = \sum_{\alpha=1}^3 \sin(\mathbf{q} \cdot \boldsymbol{\rho}_\alpha). \quad (\text{V.8})$$

L'hamiltonien total \hat{H}_q , somme des trois hamiltoniens $\hat{H}_{0,1,2}$, peut comme précédemment être mis sous la forme

$$\hat{H}_q = E_0(\mathbf{q}) \hat{1} - \mathbf{h}(\mathbf{q}) \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} \quad (\text{V.9})$$

avec

$$h_x(\mathbf{q}) = J [1 + \cos(\mathbf{q} \cdot \mathbf{a}_1) + \cos(\mathbf{q} \cdot \mathbf{a}_2)] \quad (\text{V.10})$$

$$h_y(\mathbf{q}) = J [\sin(\mathbf{q} \cdot \mathbf{a}_1) + \sin(\mathbf{q} \cdot \mathbf{a}_2)] \quad (\text{V.11})$$

$$h_z(\mathbf{q}) = \Delta + 2J' \sin \phi_0 \mathcal{S}_q \quad (\text{V.12})$$

Cet hamiltonien donne naissance aux deux bandes d'énergie

$$E_q^{(\pm)} = E_0(\mathbf{q}) \pm |\mathbf{h}(\mathbf{q})|. \quad (\text{V.13})$$

Nous avons vu au chapitre précédent que ces deux bandes possèdent une topologie non triviale, caractérisée par un nombre de Chern non nul, si et seulement si le vecteur $\mathbf{n} \equiv \mathbf{h}/|\mathbf{h}|$ enveloppe complètement la sphère de Bloch quand \mathbf{q} varie dans l'ensemble de la zone de Brillouin. Quand c'est le cas, le nombre d'enveloppements

$$\mathcal{C} = -\frac{1}{4\pi} \iint_{\text{ZB}} \mathbf{n} \cdot [(\partial_{q_x} \mathbf{n}) \times (\partial_{q_y} \mathbf{n})] dq_x dq_y. \quad (\text{V.14})$$

est non nul.

Suivre l'ensemble des points atteints par $\mathbf{n}(\mathbf{q})$ sur cette sphère est faisable, mais quelque peu fastidieux, et nous nous intéresserons ici à la

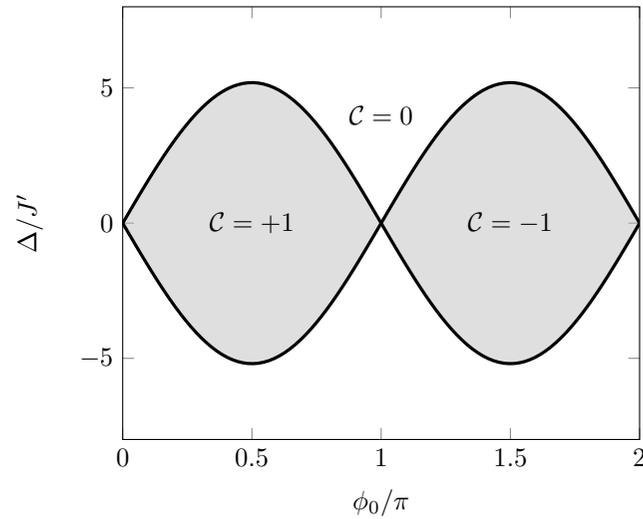


FIGURE V.4. Diagramme de phase pour le modèle de Haldane. Les deux bandes sont topologiques quand le nombre d'enveloppement C est non nul.

condition nécessaire suivante : les deux pôles (nord et sud) doivent certainement être atteints pour que la sphère soit recouverte. Or les pôles sont atteints quand la projection de \mathbf{h} dans le plan xy s'annule, c'est-à-dire aux deux points de Dirac Q_{\pm} . Pour que chaque point de Dirac corresponde à un pôle différent, il faut que $h_z(Q_+)$ et $h_z(Q_-)$ soient de signes opposés. En utilisant le fait qu'aux points de Dirac, les trois quantités $\sin(\mathbf{Q} \cdot \boldsymbol{\rho}_j)$ sont égales entre elles et valent $\pm\sqrt{3}/2$, la condition d'atteinte des deux pôles s'écrit en utilisant (V.12) :

$$\left(\Delta + 3\sqrt{3}J' \sin \phi_0\right) \left(\Delta - 3\sqrt{3}J' \sin \phi_0\right) < 0 \quad (\text{V.15})$$

ou encore

$$\frac{|\Delta|}{J'} < 3\sqrt{3} |\sin \phi_0|. \quad (\text{V.16})$$

Un examen plus détaillé du problème montre que cette condition nécessaire est en fait suffisante : quand les deux pôles sont atteints, le vecteur \mathbf{n} enveloppe la sphère de Bloch quand \mathbf{q} balaye la zone de Brillouin avec le nombre d'enveloppements $C = \pm 1$.

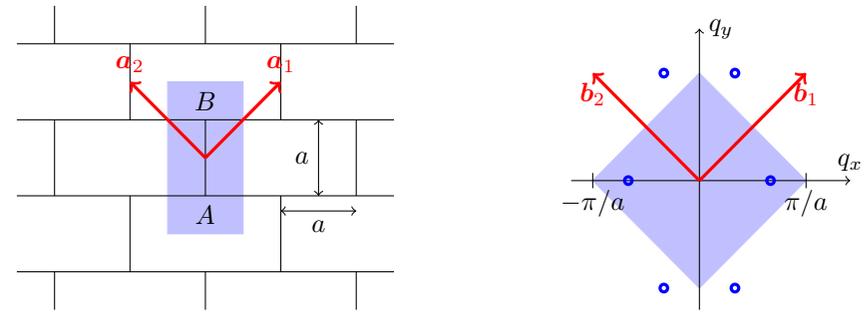


FIGURE V.5. Le réseau "mur de briques" (à gauche) et sa zone de Brillouin (à droite); les points de Dirac sont indiqués par des cercles bleus. La cellule unité a pour aire $2a^2$ et la zone de Brillouin a pour aire $2\pi^2/a^2$.

On arrive donc au diagramme de phase de la figure V.4, avec deux lobes conduisant à une topologie non triviale, entourés par un domaine infini correspondant à $C = 0$. Les nombres de Chern $C^{(\pm)}$ des deux bandes sont opposés et $C = C^{(-)} = -C^{(+)}$.

1-3 La version "mur de briques"

Le réseau de type "mur de briques", représenté sur la figure V.5, s'obtient à partir d'un réseau carré de pas a en supprimant un lien vertical sur deux, tout en gardant tous les liens horizontaux. Il a initialement été proposé comme une alternative commode au réseau hexagonal, permettant de simplifier les calculs. Les vecteurs de base du réseau "mur de briques" dans l'espace réel

$$\mathbf{a}_1 = a \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{a}_2 = a \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (\text{V.17})$$

sont en effet orthogonaux, de même que les vecteurs engendrant l'espace réciproque² :

$$\mathbf{b}_1 = \frac{\pi}{a} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{b}_2 = \frac{\pi}{a} \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (\text{V.19})$$

Tout comme pour le réseau hexagonal, la cellule unité comporte deux sites notés A et B sur la figure V.5 qui peuvent avoir des énergies différentes $\pm\Delta$:

$$\hat{H}_{0,\mathbf{q}} = \begin{pmatrix} -\Delta & 0 \\ 0 & \Delta \end{pmatrix}. \quad (\text{V.20})$$

Si on limite l'effet tunnel aux sauts entre premiers voisins, l'hamiltonien s'écrit de la même façon qu'en (V.3) :

$$\hat{H}_{1,\mathbf{q}} = -J \begin{pmatrix} 0 & 1 + e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{a}_1} + e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{a}_2} \\ 1 + e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{a}_1} + e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{a}_2} & 0 \end{pmatrix}, \quad (\text{V.21})$$

et on obtient pour $\Delta = 0$ deux points de Dirac aux points d'annulation de $1 + e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{a}_1} + e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{a}_2}$. Ces points sont localisés en

$$q_x = 0, \quad q_y = \pm \frac{2\pi}{3a}. \quad (\text{V.22})$$

Ce réseau a acquis ses "lettres de noblesse" sur le plan expérimental avec les expériences de Zurich de TARRUELL, GREIF et al. (2012), qui ont montré comment le réaliser en pratique par une superposition d'ondes lumineuses stationnaires disposées selon des axes orthogonaux. Ces expériences ont été décrites et analysées dans le cours de 2012-13 et nous ne reviendrons pas dessus ici.

Comme pour le réseau hexagonal, on peut ouvrir un gap au niveau des points de Dirac et obtenir des bandes topologiquement non triviales en ajoutant un couplage entre seconds voisins comme indiqué sur la figure V.7. Chaque site A ou B possède quatre seconds voisins, au lieu de six pour le réseau hexagonal. Avec les phases représentées sur la figure V.7 et

2. On adopte comme au chapitre précédent la définition

$$\mathbf{b}_1 = 2\pi \frac{\mathcal{R}\mathbf{a}_2}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathcal{R}\mathbf{a}_2)}, \quad \mathbf{b}_2 = 2\pi \frac{\mathcal{R}\mathbf{a}_1}{\mathbf{a}_2 \cdot (\mathcal{R}\mathbf{a}_1)} \quad (\text{V.18})$$

où \mathcal{R} désigne la rotation de $\pi/2$.

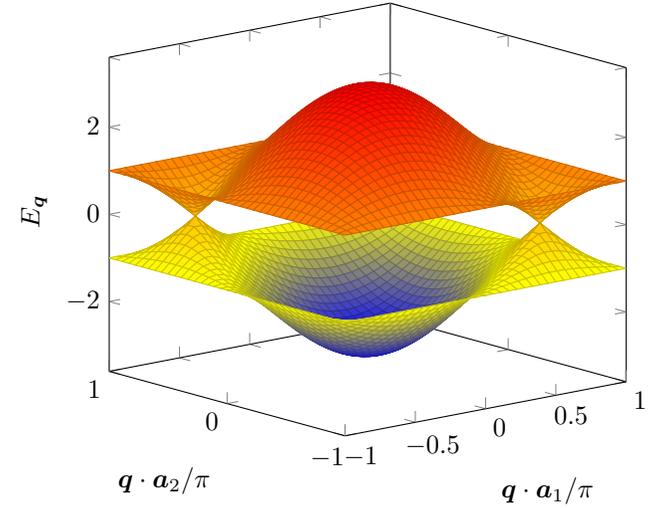


FIGURE V.6. Structure de bande pour le réseau "mur de briques".

la convention précisée en figure V.2, l'hamiltonien décrivant le couplage aux seconds voisins s'écrit (cf. appendice) :

$$\begin{aligned} \hat{H}_{2,\mathbf{q}} &= -2J' \begin{pmatrix} \sum_{\alpha=1}^2 \cos(\mathbf{q} \cdot \boldsymbol{\rho}_\alpha - \phi_0) & 0 \\ 0 & \sum_{\alpha=1}^2 \cos(\mathbf{q} \cdot \boldsymbol{\rho}_\alpha + \phi_0) \end{pmatrix} \\ &= -2J' \cos \phi_0 \mathcal{C}_q \hat{1} - 2J' \sin \phi_0 \mathcal{S}_q \hat{\sigma}_z \end{aligned} \quad (\text{V.23})$$

où l'on a introduit les vecteurs

$$\boldsymbol{\rho}_1 = -\mathbf{a}_1, \quad \boldsymbol{\rho}_2 = \mathbf{a}_2, \quad (\text{V.24})$$

et où on a posé

$$\mathcal{C}_q = \sum_{\alpha=1}^2 \cos(\mathbf{q} \cdot \boldsymbol{\rho}_\alpha), \quad \mathcal{S}_q = \sum_{\alpha=1}^2 \sin(\mathbf{q} \cdot \boldsymbol{\rho}_\alpha). \quad (\text{V.25})$$

La seule différence par rapport au modèle de Haldane original est que la somme sur l'indice α figurant dans (V.23-V.25) ne porte désormais que sur $\alpha = 1, 2$. Mis à part ce point, l'analyse de la topologie des bandes de ce

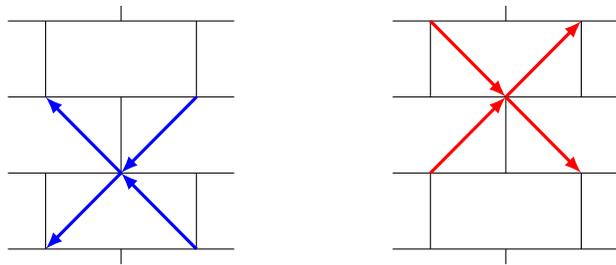


FIGURE V.7. Couplage entre seconds voisins dans le réseau "mur de briques" pour un site A donné (à gauche) et pour un site B donné (à droite).

réseau est en tout point similaire à ce que nous avons vu plus haut et on obtient un diagramme de phase semblable à celui de la figure V.4, avec une région topologique définie par :

$$\frac{|\Delta|}{J'} < 2\sqrt{3} |\sin \phi_0|. \quad (\text{V.26})$$

1-4 Liaisons fortes et courbure de Berry

Dans le cours précédent, nous avons montré pourquoi la courbure de Berry $\Omega_{\mathbf{q}}$ apparaît comme un outil naturel pour caractériser le transport induit par une force \mathbf{F} dans une bande topologiquement non triviale. Nous avons traité la position des particules comme une variable \mathbf{r} continue, avec les fonctions de Bloch

$$\psi_{\mathbf{q}}^{(j)}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} u_{\mathbf{q}}^{(j)}(\mathbf{r}), \quad (\text{V.27})$$

et un nombre *a priori* infini de bandes d'énergie, repérées par l'indice $j = 0, 1, 2, \dots$. L'action de la force \mathbf{F} était quant à elle décrite par le potentiel

$$\hat{V} = -\mathbf{F} \cdot \hat{\mathbf{r}}. \quad (\text{V.28})$$

L'approximation des liaisons fortes que nous utilisons ici vient apporter deux modifications à cette approche, l'une pratique, l'autre plus conceptuelle. La modification pratique vient du fait que le nombre de bandes est

fini, ce qui fournit une relation simple entre les courbures de Berry des différentes bandes. La modification conceptuelle vient du fait que l'on discrétise la position des particules, ce qui peut amener une certaine ambiguïté dans l'écriture des potentiels comme en (V.28).

Commençons par rappeler une expression simple de la courbure de Berry, dont la preuve détaillée a été donnée dans le cours 2013-14 (chapitre 3). Partant d'une cellule unité à n sites (avec $n = 2$ pour le modèle de Haldane), l'hamiltonien périodique $\hat{H}_{\mathbf{q}}$ est une matrice $n \times n$ et on trouve donc n bandes d'énergie $E_{\mathbf{q}}^{(j)}$, $j = 1, \dots, n$, avec les états propres $|u_{\mathbf{q}}^{(j)}\rangle$. On peut alors montrer que

$$\Omega_{\mathbf{q}}^{(j)} = i \sum_{j' \neq j} \frac{\langle u_{\mathbf{q}}^{(j)} | \nabla_{\mathbf{q}} \hat{H}_{\mathbf{q}} | u_{\mathbf{q}}^{(j')} \rangle \times \langle u_{\mathbf{q}}^{(j')} | \nabla_{\mathbf{q}} \hat{H}_{\mathbf{q}} | u_{\mathbf{q}}^{(j)} \rangle}{(E_{\mathbf{q}}^{(j)} - E_{\mathbf{q}}^{(j')})^2}. \quad (\text{V.29})$$

L'intérêt de ce résultat est qu'il fait intervenir le gradient par rapport à \mathbf{q} de l'hamiltonien $\hat{H}_{\mathbf{q}}$, qui est une fonction régulière, plutôt que le gradient des vecteurs propres $|u_{\mathbf{q}}^{(j)}\rangle$ dont nous avons vu qu'il pouvait présenter des singularités.

Une fois ce résultat acquis, il est simple de montrer que la somme des n courbures de Berry

$$\sum_{j=1}^n \Omega_{\mathbf{q}}^{(j)} \quad (\text{V.30})$$

est nulle en tout moment \mathbf{q} de la zone de Brillouin, car chaque couple (j, j') contribue deux fois à la somme, ces deux contributions étant égales en valeur absolue et de signes opposés. On en déduit que la somme des nombres de Chern des n bandes d'énergie est également nulle :

$$\sum_{j=1}^n \mathcal{C}^{(j)} = 0 \quad (\text{V.31})$$

Ce résultat ne se généralise pas au cas infini : par exemple, pour une particule libre plongée dans un champ magnétique, les bandes d'énergie sont les niveaux de Landau qui ont tous le même nombre de Chern $|\mathcal{C}| = 1$.

Passons maintenant au deuxième point, qui porte sur l'ambiguïté résultant de notre discrétisation de la position. Nous allons raisonner sur une

cellule unité à deux sites, mais la généralisation à n sites est immédiate. Nous avons choisi jusqu'à maintenant de paramétrer nos états de Bloch sous la forme

$$|\psi_{\mathbf{q}}\rangle = \sum_j e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_j} (\alpha_{\mathbf{q}}|A_j\rangle + \beta_{\mathbf{q}}|B_j\rangle) \quad (\text{V.32})$$

ce qui revient à assigner la même position \mathbf{r}_j aux deux sites A et B de la cellule j . Cela peut poser un problème quand on doit prendre en compte également la présence d'une force extérieure; en effet, le potentiel \hat{V} dont cette force dérive – qui est la version discrétisée de (V.28) – ne doit en principe pas prendre la même valeur sur les sites A et B d'une même cellule. Le remède est à première vue simple : il suffit "d'encoder" la position de chaque site A ou B dans une cellule donnée en écrivant les fonctions de Bloch plutôt sous la forme :

$$|\psi_{\mathbf{q}}\rangle = \sum_j \left(e^{i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{r}_j+\mathbf{R}_A)} \tilde{\alpha}_{\mathbf{q}}|A_j\rangle + e^{i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{r}_j+\mathbf{R}_B)} \tilde{\beta}_{\mathbf{q}}|B_j\rangle \right) \quad (\text{V.33})$$

et d'utiliser le même encodage dans l'expression de \hat{V} . Dans (V.33), les vecteurs $\mathbf{R}_{A,B}$ représentent les décalages des sites A et B par rapport au centre \mathbf{r}_j de leur cellule. Les coefficients $\tilde{\alpha}_{\mathbf{q}}$ et $\tilde{\beta}_{\mathbf{q}}$ se déduisent de $\alpha_{\mathbf{q}}$ et $\beta_{\mathbf{q}}$ par la transformation unitaire très simple

$$\begin{pmatrix} \tilde{\alpha}_{\mathbf{q}} \\ \tilde{\beta}_{\mathbf{q}} \end{pmatrix} = \hat{U}_{\mathbf{q}} \begin{pmatrix} \alpha_{\mathbf{q}} \\ \beta_{\mathbf{q}} \end{pmatrix} \quad \text{avec} \quad \hat{U}_{\mathbf{q}} = \begin{pmatrix} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}_A} & 0 \\ 0 & e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}_B} \end{pmatrix} \quad (\text{V.34})$$

et l'hamiltonien permettant de les déterminer est

$$\hat{\hat{H}}_{\mathbf{q}} = \hat{U}_{\mathbf{q}} \hat{H}_{\mathbf{q}} \hat{U}_{\mathbf{q}}^\dagger. \quad (\text{V.35})$$

Le désavantage de ce nouvel hamiltonien $\hat{\hat{H}}_{\mathbf{q}}$ est qu'il n'est plus périodique sur le réseau réciproque, contrairement à l'hamiltonien de départ $\hat{H}_{\mathbf{q}}$, car l'opérateur $\hat{U}_{\mathbf{q}}$ ne l'est pas :

$$\hat{H}_{\mathbf{q}+\mathbf{Q}} = \hat{H}_{\mathbf{q}} \quad \text{mais} \quad \hat{\hat{H}}_{\mathbf{q}+\mathbf{Q}} \neq \hat{\hat{H}}_{\mathbf{q}}. \quad (\text{V.36})$$

Il est donc plus délicat d'utiliser les résultats du théorème adiabatique quand on effectue un trajet $\mathbf{q} \rightarrow \mathbf{q} + \mathbf{Q}$ dans la zone de Brillouin. C'est pourquoi nous avons préféré utiliser jusqu'ici l'hamiltonien $\hat{H}_{\mathbf{q}}$ "sans encodage de la position".

En revanche, pour les problèmes liés au transport, en particulier aux mesures locales dans l'espace des moments, il est préférable d'utiliser l'expression (V.33) des états de Bloch et donc $\hat{\hat{H}}$ car l'action d'une force est plus facile à prendre en compte. Or il est important de noter que la courbure de Berry n'est pas invariante dans le changement

$$\hat{H}_{\mathbf{q}} \longrightarrow \hat{\hat{H}}_{\mathbf{q}}. \quad (\text{V.37})$$

Il ne s'agit en effet pas d'un simple changement de jauge, mais d'une transformation unitaire plus générale³. Une "mesure expérimentale de la courbure de Berry" comme nous en décrivons dans ce cours suppose en fait un protocole expérimental qui passe par un choix précis de l'écriture des états de Bloch (V.32) ou (V.33), qu'il faut préciser pour donner un sens non ambigu aux résultats. Le passage de l'une à l'autre des conventions est bien entendu possible et l'on pourra consulter l'appendice D de COOPER, DALIBARD et al. (2018) pour plus de détails.

Notons pour finir que la caractérisation topologique en terme de nombre de Chern n'est fort heureusement pas modifiée par le passage de (V.32) à (V.33); les courbures de Berry $\Omega_{\mathbf{q}}$ et $\tilde{\Omega}_{\mathbf{q}}$ peuvent différer, mais on pourra vérifier qu'elles ont la même intégrale sur la zone de Brillouin.

1-5 Exemples pour le réseau mur de briques

À titre d'exemple, nous avons tracé sur les figures V.8 et V.9 (haut) la courbure de Berry $\Omega_{\mathbf{q}}$ de la bande fondamentale calculée pour le réseau "mur de briques" pour des paramètres situés au centre de la région topologique : $J' = 0.2J$, $\phi_0 = \pi/2$ et $\Delta = 0$. Ce calcul a été fait dans la version (V.32) de l'écriture des états de Bloch, c'est-à-dire sans encodage de la position pour la figure V.8 (resp. avec encodage de la position pour la figure V.9). On constate dans les deux cas que cette courbure prend des valeurs significativement différentes de 0 autour de la position des (ex-)points de Dirac. On vérifie par ailleurs dans les deux cas que l'intégrale de $\Omega_{\mathbf{q}}$ sur la zone de Brillouin est égale à 2π , correspondant à un nombre de Chern $\mathcal{C} = 1$. Les figures V.8 et V.9 (bas) sont obtenues pour des paramètres situés

3. Un changement de jauge revient à multiplier les coefficients α, β par une même quantité $e^{i\mathbf{x}\cdot\mathbf{q}}$, ce qui n'est pas le cas de la transformation (V.34).

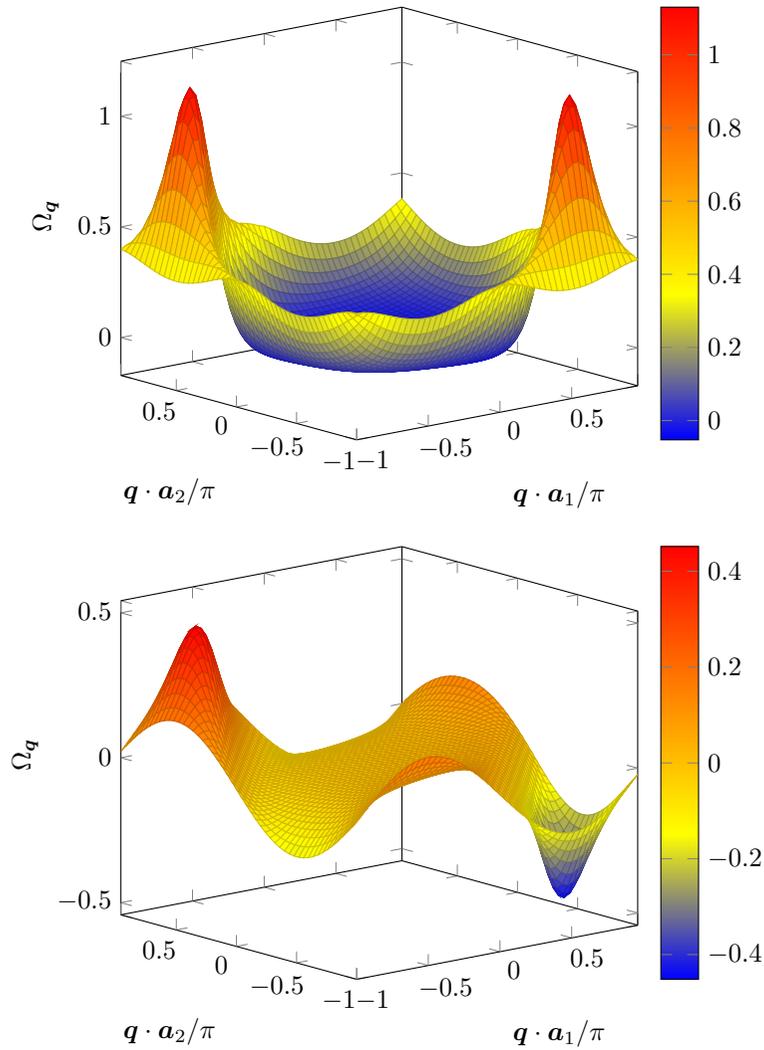


FIGURE V.8. Courbure de Berry $\Omega_{\mathbf{q}}$ pour la bande inférieure du réseau "mur de briques", avec les états de Bloch (V.32) "sans encodage de la position". Haut : bande topologique, avec un couplage aux seconds voisins $J' = 0.2 J$, $\phi_0 = \pi/2$ et $\Delta = 0$. Le nombre de Chern correspondant (intégrale de $\Omega_{\mathbf{q}}$ divisée par 2π) est égal à 1. Bas : bande non topologique, avec $J' = 0$, $\Delta = J$. Dans ce cas invariant par renversement du temps, on a $\Omega_{\mathbf{q}} = -\Omega_{-\mathbf{q}}$ et l'intégrale sur la zone de Brillouin est nulle, donc $C = 0$.

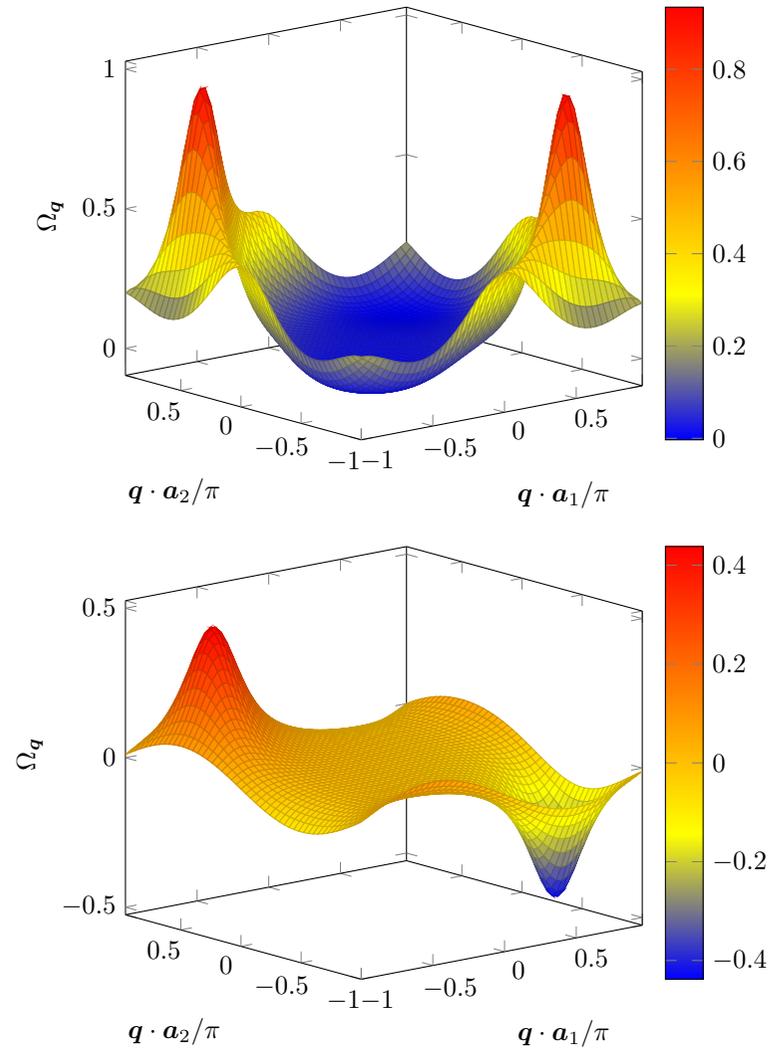


FIGURE V.9. Courbure de Berry $\Omega_{\mathbf{q}}$ pour la bande inférieure du réseau "mur de briques", avec les états de Bloch (V.33) "avec encodage de la position". Haut : bande topologique, avec un couplage aux seconds voisins $J' = 0.2 J$, $\phi_0 = \pi/2$ et $\Delta = 0$. Le nombre de Chern correspondant (intégrale de $\Omega_{\mathbf{q}}$ divisée par 2π) est égal à 1. Bas : bande non topologique, avec $J' = 0$, $\Delta = J$. Dans ce cas invariant par renversement du temps, on a $\Omega_{\mathbf{q}} = -\Omega_{-\mathbf{q}}$ et l'intégrale sur la zone de Brillouin est nulle, donc $C = 0$.

dans la région non topologique $J' = 0$, $\Delta = J$; la courbure de Berry a alors une intégrale nulle sur la zone de Brillouin, soit $\mathcal{C} = 0$.

2 Modulation temporelle et topologie

Nous abordons maintenant la description de la réalisation expérimentale du modèle de Haldane avec des atomes froids, réalisée par JOTZU, MESSER et al. (2014). Son principe est de partir d'un réseau bi-partite de type "mur de briques" avec ses deux points de Dirac, et de lever la dégénérescence en ces points pour obtenir deux bandes disjointes et topologiques.

Comme nous l'avons vu, la méthode la plus simple pour lever la dégénérescence dans ce type de réseau consiste à donner des énergies différentes $\pm\Delta$ aux deux sites A et B , mais elle ne conduit pas à des bandes topologiques, puisqu'on ne brise pas l'invariance par renversement du temps. La courbure de Berry aux deux points de Dirac prend des valeurs opposées, et son intégrale sur la zone de Brillouin reste nulle [figures V.8 ou V.9 (bas)].

Pour obtenir deux bandes topologiques, il faut donc "rectifier" la courbure de Berry, c'est-à-dire ouvrir le gap aux points de Dirac tout en s'assurant que la courbure de Berry résultante possède le même signe en ces deux points [figures V.8 ou V.9 (haut)]. Ce résultat peut être obtenu en modulant dans le temps les paramètres du réseau : c'est le principe des "réseaux secoués", qui permettent de briser l'invariance par renversement du temps et que nous allons maintenant décrire. Notons que cette approche a d'abord été proposée en physique de la matière condensée par OKA & AOKI (2009), qui suggéraient d'éclairer une feuille de graphène avec de la lumière polarisée circulairement pour ouvrir un gap topologiquement non trivial au niveau des points de Dirac (voir aussi GU, FERTIG et al. (2011)).

2-1 Les réseaux secoués

Une méthode très commode pour obtenir des coefficients tunnels complexes dans un réseau optique consiste à moduler dans le temps certains paramètres du réseau, puis à chercher l'hamiltonien effectif, indépendant

du temps, qui en résulte. Pour un réseau dans la limite des liaisons fortes, une modulation relativement simple à implémenter est un déplacement global ρ_t de l'ensemble des sites du réseau. Pour un système 2D, ce déplacement peut être fait de manière chirale en prenant par exemple un mouvement circulaire uniforme pour ρ_t , ce qui permet d'obtenir des phases non triviales pour les coefficients tunnel.

Partons d'un réseau optique décrit dans l'approximation des liaisons fortes, avec des sites localisés aux points \mathbf{r}_α . Quand le réseau est immobile dans un référentiel galiléen ($\rho = 0$), l'hamiltonien décrivant le mouvement d'une particule dans ce réseau s'écrit

$$\hat{H}_{\text{immobile}} = \sum_{\alpha} E_{\alpha} \hat{P}_{\alpha} - \sum_{\alpha, \beta} J_{\alpha, \beta}^{(0)} |\mathbf{r}_{\alpha}\rangle \langle \mathbf{r}_{\beta}| \quad (\text{V.38})$$

avec $\hat{P}_{\alpha} = |\mathbf{r}_{\alpha}\rangle \langle \mathbf{r}_{\alpha}|$. Les coefficients $J_{\alpha, \beta}^{(0)}$ sont réels et positifs. Quand l'ensemble du réseau bouge, la manière la plus simple pour décrire la dynamique du système est de se placer dans le référentiel accéléré lié au réseau. Dans ce référentiel, le mouvement du réseau se décrit comme une force d'inertie

$$\mathbf{F}_t = -m\ddot{\rho}_t, \quad (\text{V.39})$$

et l'hamiltonien décrivant le mouvement de la particule est alors

$$\hat{H}_t = \hat{H}_{\text{immobile}} - \mathbf{F}_t \cdot \hat{\mathbf{r}}, \quad (\text{V.40})$$

où $\hat{\mathbf{r}}$ est l'opérateur position dans ce modèle de liaisons fortes :

$$\hat{\mathbf{r}} = \sum_{\alpha} \mathbf{r}_{\alpha} \hat{P}_{\alpha}. \quad (\text{V.41})$$

Le terme additionnel dans (V.40) provenant du mouvement du réseau est proportionnel à l'accélération du réseau, soit $\sim \omega^2 \rho_0$ pour un mouvement sinusoïdal d'amplitude ρ_0 et de pulsation ω . Or nous allons étudier ici la limite des grands ω (en comparaison des pulsations de Bohr du problème) et nous souhaitons simultanément traiter ce terme additionnel comme une perturbation. La forme (V.40) se prête donc mal à ce développement perturbatif et nous allons commencer par "abaisser le degré" en ω de la perturbation en utilisant une transformation unitaire exacte.

Cette transformation unitaire a en fait déjà été rencontrée au chapitre précédent. On introduit

$$\hat{U}_t = \exp[-i \hat{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{A}_t] \quad \text{avec} \quad \mathbf{A}_t = \frac{1}{\hbar} \int_0^t \mathbf{F}_{t'} dt' = -\frac{m}{\hbar} \dot{\mathbf{r}}_t, \quad (\text{V.42})$$

et on obtient le nouvel hamiltonien après transformation :

$$\hat{H}_t = \hat{U}_t \hat{H}_t \hat{U}_t^\dagger + i\hbar \frac{d\hat{U}_t}{dt} \hat{U}_t^\dagger. \quad (\text{V.43})$$

Dans le cas présent, la partie $E_\alpha \hat{P}_\alpha$ correspondant à l'énergie sur site dans (V.38) commute avec l'opérateur unitaire \hat{U}_t et est donc inchangée. Pour les termes décrivant le saut d'un site β à un site α , on trouve

$$\hat{U}_t |\mathbf{r}_\alpha\rangle \langle \mathbf{r}_\beta| \hat{U}_t^\dagger = e^{im(\mathbf{r}_\alpha - \mathbf{r}_\beta) \cdot \dot{\mathbf{p}}/\hbar} |\mathbf{r}_\alpha\rangle \langle \mathbf{r}_\beta| \quad (\text{V.44})$$

de sorte que l'hamiltonien de la particule dans le référentiel du réseau et après transformation unitaire s'écrit

$$\hat{H}_t = \sum_\alpha E_\alpha \hat{P}_\alpha - \sum_{\alpha, \beta} J_{\alpha, \beta}(t) |\mathbf{r}_\alpha\rangle \langle \mathbf{r}_\beta|. \quad (\text{V.45})$$

La prise en compte du mouvement global du réseau se fait alors par une modulation dans le temps des coefficients tunnel :

$$J_{\alpha, \beta}(t) = J_{\alpha, \beta}^{(0)} e^{im(\mathbf{r}_\alpha - \mathbf{r}_\beta) \cdot \dot{\mathbf{p}}/\hbar}. \quad (\text{V.46})$$

On notera que la dépendance en temps intervient ici via la vitesse du réseau, et non plus l'accélération comme en (V.40). Ceci correspond à l'abaissement de degré en ω mentionné plus haut. Plus précisément, pour un couplage entre sites distants typiquement de $\lambda/2$, où λ est la longueur d'onde lumineuse servant à créer le réseau, l'argument de l'exponentielle est de l'ordre de

$$K_0 = \frac{m\lambda\omega\rho_0}{2\hbar} = \pi^2 \frac{\rho_0}{\lambda} \frac{\hbar\omega}{E_r}, \quad (\text{V.47})$$

quantité qui est choisie ~ 0.8 dans les expériences de JOTZU, MESSER et al. (2014).

2-2 Hamiltonien effectif

Le traitement d'un hamiltonien variant périodiquement en temps est en général compliqué et on doit recourir à une approche numérique utilisant la méthode de Floquet pour décrire de manière précise la dynamique sous-jacente. Toutefois, quand la fréquence de modulation ω de l'hamiltonien est grande devant les fréquences de Bohr du système (ici la largeur et l'écart entre bandes d'énergie de $\hat{H}_{\text{immobile}}$), on peut utiliser un développement en puissances de $1/\omega$ pour obtenir les composantes les plus importantes de la dynamique.

Nous ne détaillerons pas ici l'ensemble du formalisme conduisant à cet hamiltonien effectif et nous renvoyons le lecteur par exemple⁴ à l'article de GOLDMAN & DALIBARD (2014), qui détaille sa dérivation ainsi que les termes additionnels décrivant le micro-mouvement associé aux oscillations rapides de l'hamiltonien. Le résultat principal est le suivant : partant d'un hamiltonien périodique en temps représenté par ses composantes de Fourier $\hat{H}^{(n)}$:

$$\hat{H}_t = \hat{H}^{(0)} + \sum_{n>0} \left(\hat{H}^{(n)} e^{in\omega t} + \hat{H}^{(-n)} e^{-in\omega t} \right), \quad (\text{V.48})$$

l'hamiltonien effectif *indépendant du temps* s'écrit :

$$\hat{H}_{\text{eff}} = \hat{H}^{(0)} + \frac{1}{\hbar\omega} \sum_{n>0} \frac{1}{n} \left[\hat{H}^{(n)}, \hat{H}^{(-n)} \right] + \mathcal{O}(1/\omega^2). \quad (\text{V.49})$$

La procédure à suivre pour obtenir \hat{H}_{eff} est donc bien définie. Partant de l'expression de \hat{H}_t dans laquelle la dépendance en temps provient de la modulation des coefficients tunnels, on décompose ces coefficients tunnel en série de Fourier en utilisant

$$e^{iz \sin(\omega t)} = \sum_n \mathcal{J}_n(z) e^{in\omega t} \quad (\text{V.50})$$

où $\mathcal{J}_n(z)$ est la fonction de Bessel d'ordre n , ce qui conduit aux composantes $\hat{H}^{(n)}$ de l'hamiltonien. Nous allons maintenant mettre en œuvre cette procédure pour le réseau "mur de briques".

4. On pourra également consulter les articles précurseurs de AVAN, COHEN-TANNOUJJI et al. (1976) et RAHAV, GILARY et al. (2003), ainsi que BUKOV, D'ALESSIO et al. (2015) et ECKARDT (2017).

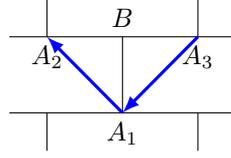


FIGURE V.10. Un site B et ses trois voisins A_α , $\alpha = 1, 2, 3$, avec les couplages induits par la vibration du réseau.

2-3 Coefficients tunnel entre seconds voisins

Nous souhaitons appliquer le résultat général (V.49), valable à l'ordre 1 inclus en $1/\omega$, au réseau mur de briques. Pour simplifier l'algèbre, nous allons nous concentrer sur une cellule donnée, plus précisément sur le site B de cette cellule que nous prendrons localisé en $\mathbf{r} = 0$. Ce site est couplé par effet tunnel aux trois sites A qui l'entourent : le site A_1 appartenant à la même cellule et situé en $\mathbf{r}_1 = -a \mathbf{u}_x$, et les sites A_2 et A_3 situés en $\mathbf{r}_{2,3} = \pm a \mathbf{u}_y$ (figure V.10).

En absence de modulation du réseau, la partie de l'hamiltonien qui fait intervenir le site B considéré s'écrit

$$-J \left(\sum_{\alpha=1,2,3} |A_\alpha\rangle\langle B| \right) + \text{H.c.} \quad (\text{V.51})$$

Supposons que le réseau est secoué selon le mouvement elliptique

$$\dot{\rho}_t = v_{0,x} \sin(\omega t + \varphi_x) \mathbf{u}_x + v_{0,y} \sin(\omega t + \varphi_y) \mathbf{u}_y, \quad (\text{V.52})$$

de sorte que l'hamiltonien correspondant aux sauts tunnel s'écrit, après passage dans le référentiel du réseau et transformation unitaire :

$$\begin{aligned} \hat{H}_t = & -J \left\{ e^{-i\kappa_y \sin(\omega t + \varphi_y)} |A_1\rangle\langle B| + e^{-i\kappa_x \sin(\omega t + \varphi_x)} |A_2\rangle\langle B| \right. \\ & \left. + e^{+i\kappa_x \sin(\omega t + \varphi_x)} |A_3\rangle\langle B| \right\} + \text{H.c.} \end{aligned} \quad (\text{V.53})$$

où l'on a posé $\kappa_{x/y} = mav_{0,x/y}/\hbar$. La décomposition en série de Fourier de

ces coefficients donne alors⁵

$$\begin{aligned} \hat{H}^{(n)} = & -J \mathcal{J}_n(\kappa_y) e^{in\varphi_y} [|B\rangle\langle A_1| + (-1)^n |A_1\rangle\langle B|] \\ & - J \mathcal{J}_n(\kappa_x) e^{in\varphi_x} [|B\rangle\langle A_2| + (-1)^n |A_2\rangle\langle B| + |A_3\rangle\langle B| + (-1)^n |B\rangle\langle A_3|] \end{aligned} \quad (\text{V.54})$$

Comme nous l'avons écrit plus haut, le paramètre $\kappa_{x/y}$ dans l'expérience de Zurich est de l'ordre de 1, ce qui entraîne que seules les deux premières fonctions de Bessel \mathcal{J}_0 et \mathcal{J}_1 prennent des valeurs significatives. Prenons à partir de maintenant

$$\kappa_x = \kappa_y \equiv \kappa \quad (\text{V.55})$$

pour simplifier les notations. Le terme $n = 0$ associé à $\mathcal{J}_0(\kappa)$ correspond à une renormalisation du coefficient tunnel entre premiers voisins :

$$J \longrightarrow \bar{J} = J \mathcal{J}_0(\kappa). \quad (\text{V.56})$$

Le terme correspondant à $n = 1$ a pour contribution

$$\frac{1}{\hbar\omega} \left[\hat{H}^{(1)}, \hat{H}^{(-1)} \right] \quad (\text{V.57})$$

qui se calcule explicitement en mettant $\hat{H}^{(\pm 1)}$ sous la forme

$$\begin{aligned} \hat{H}^{(+1)} &= +J \mathcal{J}_1(\kappa) \left(e^{+i\varphi_y} \hat{O}_1 + e^{+i\varphi_x} \hat{O}_{23} \right) \\ \hat{H}^{(-1)} &= -J \mathcal{J}_1(\kappa) \left(e^{-i\varphi_y} \hat{O}_1 + e^{-i\varphi_x} \hat{O}_{23} \right) \end{aligned} \quad (\text{V.58})$$

où nous avons introduit les opérateurs

$$\begin{aligned} \hat{O}_1 &= |A_1\rangle\langle B| - |B\rangle\langle A_1| \\ \hat{O}_{23} &= |A_2\rangle\langle B| - |B\rangle\langle A_2| - |A_3\rangle\langle B| + |B\rangle\langle A_3| \end{aligned} \quad (\text{V.59})$$

Le commutateur recherché vaut alors :

$$\left[\hat{H}^{(1)}, \hat{H}^{(-1)} \right] = -i 2J^2 \mathcal{J}_1^2(\kappa) \sin(\varphi_y - \varphi_x) [\hat{O}_1, \hat{O}_{23}] \quad (\text{V.60})$$

ce qui fait apparaître dans l'hamiltonien effectif le couplage désiré entre seconds voisins

$$- \bar{J}' \left(e^{+i\pi/2} |A_2\rangle\langle A_1| + e^{+i\pi/2} |A_1\rangle\langle A_3| \right) + \text{H.c.} \quad (\text{V.61})$$

5. On remarquera que $\hat{H}^{(n)}$ n'est pas hermitien, mais vérifie $(\hat{H}^{(n)})^\dagger = \hat{H}^{(-n)}$.

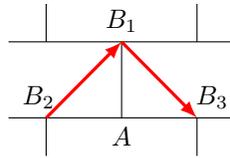


FIGURE V.11. Un site A et ses trois voisins B_α , $\alpha = 1, 2, 3$, ainsi que les couplages induits par la vibration du réseau.

avec

$$\bar{J}' = 2 \frac{J^2}{\hbar\omega} \mathcal{J}_1^2(\kappa) \sin(\varphi_y - \varphi_x) \quad (\text{V.62})$$

Ce couplage est maximal pour un mouvement circulaire du réseau ($\varphi_y - \varphi_x = \pm\pi/2$) et s'annule pour un mouvement linéaire. Quelle que soit la valeur de $\varphi_y - \varphi_x$, il correspond à un facteur de phase $e^{\pm i\pi/2}$ pour les liens entre seconds voisins $A - A$, comme représenté sur la figure V.10. L'amplitude J' est par construction petite devant l'amplitude tunnel initiale J entre premiers voisins, puisque nous avons supposé $J \ll \hbar\omega$ pour notre développement.

On peut bien sûr faire un traitement identique pour trouver le couplage entre seconds voisins $B - B$. En isolant par la pensée un site A entouré de ses trois voisins B immédiats, on arrive aux couplages indiqués sur la figure V.11 :

$$-\bar{J}' \left(e^{+i\pi/2} |B_1\rangle \langle B_2| + e^{+i\pi/2} |B_3\rangle \langle B_1| \right) + \text{H.c.}, \quad (\text{V.63})$$

qui correspondent bien au choix fait dans la première partie de ce chapitre. On pourra se convaincre qu'à cet ordre du calcul en $1/\omega$, il n'y a pas de couplage à plus longue distance qui apparaît entre les différents sites du réseau "mur de briques".

2-4 Les résultats expérimentaux de Zurich

L'expérience de JOTZU, MESSER et al. (2014) a été menée avec des atomes fermioniques de ^{40}K polarisés en spin. Ces atomes évoluent dans un réseau 2D correspondant à un "mur de briques" légèrement déformé,

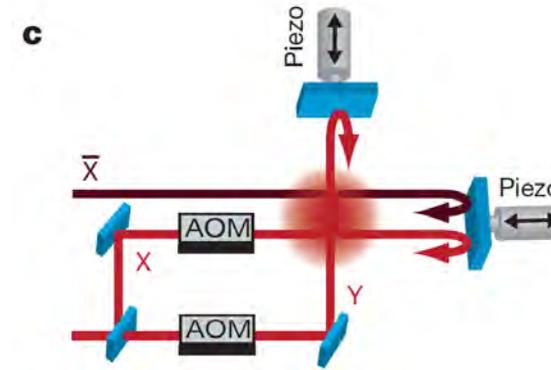


FIGURE V.12. Schéma expérimental utilisé par JOTZU, MESSER et al. (2014) pour réaliser un réseau "mur de briques" oscillant, de manière à obtenir deux bandes topologiquement non triviales.

obtenu en superposant deux ondes stationnaires le long de l'axe x et une onde stationnaire le long de y (figure V.12). L'écart en énergie $\pm\Delta$ est contrôlé en ajustant la position relative des deux ondes stationnaires le long de l'axe x . Le confinement le long de l'axe z est un piège harmonique faible, de sorte que l'expérience est effectivement menée avec des tubes d'atomes parallèles à l'axe z .

Les atomes sont d'abord préparés dans la bande fondamentale du réseau statique, puis la modulation est branchée en un temps de 20 ms. Cette modulation est obtenue en faisant vibrer les miroirs de rétro-réflexion grâce à des actionneurs piézo-électriques, en combinaison avec des modulateurs acousto-optiques situés en amont. Ceci permet de réaliser le déplacement global ρ_t souhaité pour le réseau.

Une fois la dégénérescence levée aux points de Dirac, JOTZU, MESSER et al. (2014) ont mesuré le signe de la courbure de Berry en ces points. Pour cela, ils ont préparé un paquet d'ondes au centre de la zone de Brillouin, puis utilisé la technique des oscillations de Bloch. Plus précisément, ils ont appliqué une force F qui a fait évoluer ce paquet d'ondes vers un des deux points de Dirac. Nous avons établi dans le cours précédent les équations

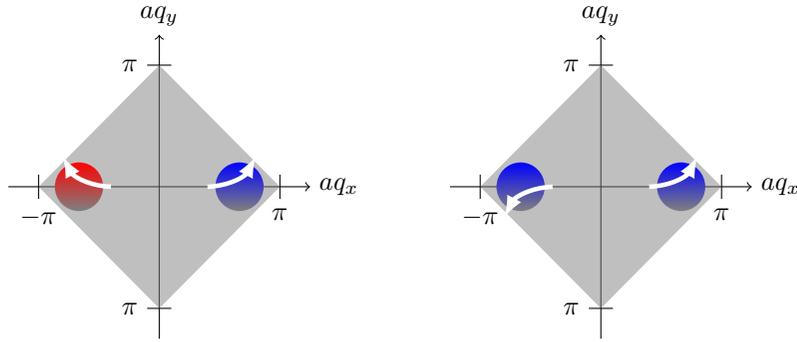


FIGURE V.13. Principe de la mesure de la courbure de Berry aux niveaux des points de Dirac. Si le gap est ouvert sans briser l'invariance par renversement du temps (figure de gauche), les courbures de Berry aux deux points de Dirac sont opposées et la déflexion d'un paquet d'ondes en ces points se fera avec des sens opposés. Au contraire, pour des bandes topologiques, on peut avoir des déflexions égales en ces deux points (figure de droite).

du mouvement correspondantes :

$$\hbar \frac{d\mathbf{q}}{dt} = \mathbf{F} \quad (\text{V.64})$$

$$\hbar \mathbf{v}_{\mathbf{q}} = \nabla E_{\mathbf{q}} + \boldsymbol{\Omega}_{\mathbf{q}} \times \mathbf{F} \quad (\text{V.65})$$

La première équation indique que le moment \mathbf{q} évolue dans la direction de la force \mathbf{F} . Dans la seconde équation, le terme en $\nabla E_{\mathbf{q}}$ ne joue pas de rôle après intégration sur une période de Bloch ; le terme $\boldsymbol{\Omega}_{\mathbf{q}} \times \mathbf{F}$ est au contraire essentiel : il va causer une déflexion de la vitesse du paquet d'ondes dans une direction perpendiculaire à \mathbf{F} et le signe de cette déflexion nous renseigne directement sur le signe de la courbure de Berry $\Omega_{\mathbf{q}}$.

Limitons-nous pour commencer aux deux cas limites (cf. figures V.4 et V.13) :

- $\Delta \neq 0, J' = 0$, ce qui doit correspondre à des bandes non-topologiques, puisqu'on brise l'invariance par réflexion, mais pas l'invariance par renversement du temps. On doit donc avoir $\Omega_{\mathbf{Q}_-} = -\Omega_{\mathbf{Q}_+}$, ce qui veut dire que les paquets d'ondes tournent en sens opposé aux deux points de Dirac, l'un dans le sens direct et l'autre dans

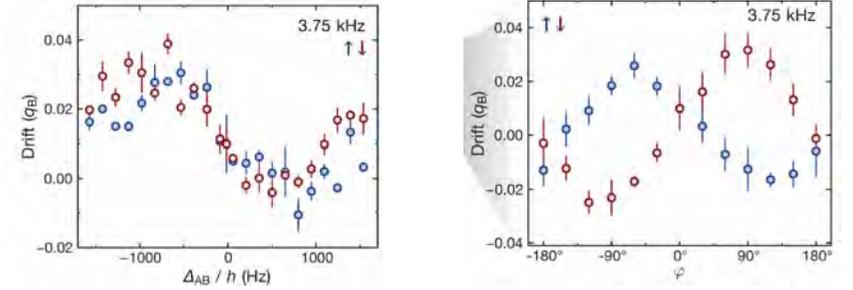


FIGURE V.14. Déplacement du centre de masse du nuage après passage sur un des deux points de Dirac. Un déplacement identique pour les deux points de Dirac signifie une courbure de Berry de signe opposé (cf. figure V.13). La figure de gauche correspond au cas non topologique : $\phi_0 = 0$ et on varie Δ . La figure de droite correspond au cas topologique : $\Delta = 0$ et on varie $\varphi_x - \varphi_y$, donc J' . Figures extraites de JOTZU, MESSER et al. (2014).

le sens rétrograde.

- $\Delta = 0, J' \neq 0$, ce qui doit au contraire conduire à des bandes topologiques. La courbure de Berry doit alors prendre la même valeur aux deux points de Dirac, et les deux paquets d'ondes doivent tourner dans le même sens.

Les résultats de JOTZU, MESSER et al. (2014) ont confirmé ces prédictions (figure V.14). La force \mathbf{F} , créée par un gradient de champ magnétique, peut être appliquée dans un sens ou dans l'autre (points bleus et points rouges de cette figure) pour aller sonder les deux points de Dirac. On observe bien une déflexion qui reflète une courbure des trajectoires identique aux deux points de Dirac dans le cas topologique : la courbure de Berry a effectivement été "rectifiée".

JOTZU, MESSER et al. (2014) ont ensuite exploré de manière systématique l'espace des paramètres Δ, J' et reconstruit un diagramme de phase qui reproduit celui attendu pour le modèle de Haldane, avec deux "lobes topologiques" entourés d'une région normale (figure V.15).

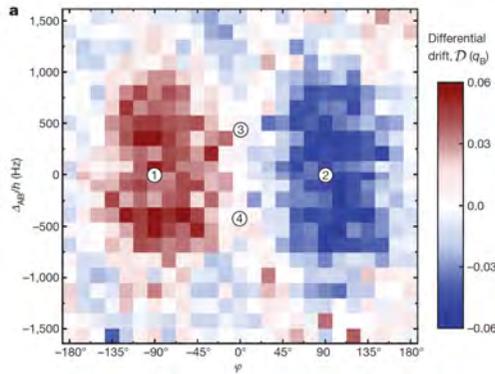


FIGURE V.15. Diagramme de phase reconstruit à partir des expériences de déflexion aux points de Dirac, à comparer avec la prédiction théorique de la figure V.4. Figure extraite de JOTZU, MESSER *et al.* (2014).

3 Les états de bord

Nous abordons maintenant un aspect essentiel de la topologie des bandes d'énergie, les états de bord qui apparaissent à la jonction entre deux phases de topologie différentes. Nous avons déjà rencontré ces états dans les problèmes 1D et nous allons justifier de manière qualitative leur existence à deux dimensions. Une discussion plus rigoureuse pourra être trouvée par exemple dans l'article de HATSUGAI (1993). Nous donnerons ensuite des exemples concrets en utilisant le réseau ⁶ "mur de briques" et nous terminerons par la description d'expériences récentes menées en photonique mettant en évidence ces états de bord de manière très claire.

3-1 La correspondance "cœur-bord"

Nous avons déjà rencontré au chapitre 2 les états de bord dans le cadre de notre étude de chaînes périodiques à une dimension. Rappelons briè-

6. Les arguments que nous allons développer sont bien adaptés au cas des réseaux décrits dans un modèle de liaisons fortes, avec un nombre n fini de bandes avec $\sum_{j=1}^n \mathcal{C}^{(j)} = 0$. Le cas des niveaux de Landau avec un nombre infini de bandes ayant toutes le nombre de Chern $\mathcal{C} = 1$ doit être traité différemment (voir par exemple le cours 2013-14 et ses références).

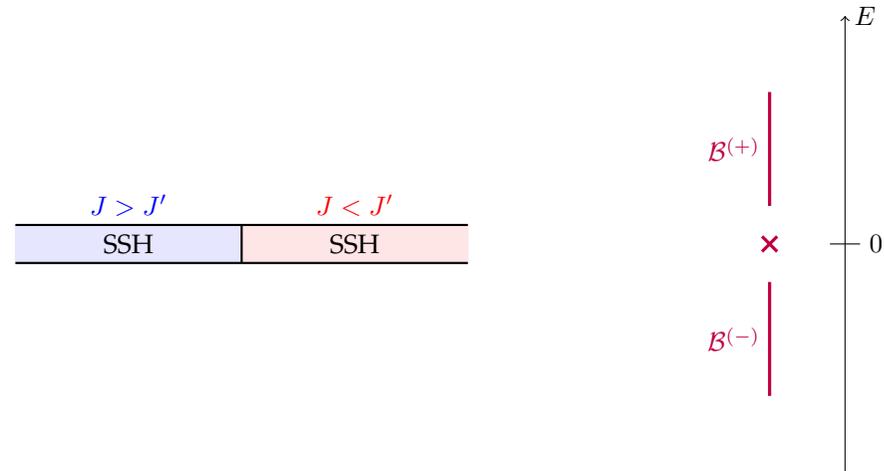


FIGURE V.16. Apparition d'un état de bord dans une géométrie unidimensionnelle, au point de contact entre deux chaînes SSH de topologies différentes. L'énergie $E = 0$ de cet état est située dans le gap entre les deux bandes d'énergie bulk $\mathcal{B}^{(\pm)}$.

vement le résultat : quand on connecte deux variantes topologiquement différentes d'un réseau, par exemple le réseau SSH, un état discret apparaît à l'intérieur du gap en énergie qui existe pour une chaîne infinie. Cet état est localisé spatialement autour du point où les deux demi-chaînes se touchent (figure V.16). Une particule préparée dans cet état y reste donc indéfiniment.

A deux dimensions, la jonction entre deux réseaux de topologie différente se fait le long d'une ou plusieurs lignes, le cas géométriquement le plus simple correspondant à deux demi-plans de natures différentes, séparés par l'axe $y = 0$. On peut avoir par exemple le vide (topologiquement trivial) dans la partie $y > 0$ et un matériau topologiquement non trivial dans la partie $y < 0$.

Nous allons voir qu'il apparaît également dans ce cas des états de bord, ou plus exactement un canal de bord. Ce canal comprend une infinité d'états, localisés au voisinage de l'axe $y = 0$ et se propageant le long de l'axe x . Chaque état est caractérisé par son moment q_x et son énergie $E(q_x)$.

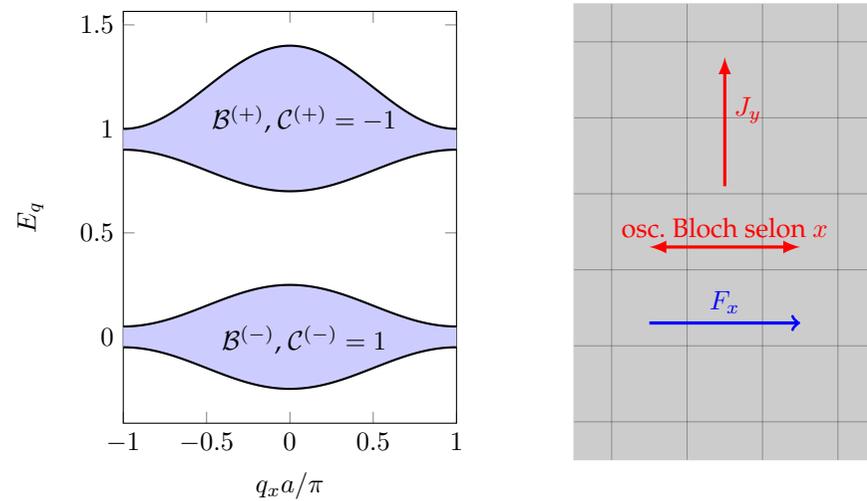


FIGURE V.17. Matériau 2D topologique à deux bandes $\mathcal{B}^{(\pm)}$. Ce matériau est supposé sans bord (il recouvre tout le plan ou occupe une région $L_x \times L_y$ avec des conditions aux limites périodiques). La bande $\mathcal{B}^{(-)}$ est supposée pleine et l'autre vide. Une force appliquée le long de l'axe x induit une oscillation de Bloch le long de l'axe x ainsi qu'une densité de courant quantifié J_y le long de l'axe y .

Pour être plus précis, considérons un matériau topologique à deux bandes, avec une bande fondamentale $E_q^{(-)}$ caractérisée par un nombre de Chern non nul $\mathcal{C}^{(-)}$ (et donc $\mathcal{C}^{(+)} = -\mathcal{C}^{(-)}$). Ces bandes sont représentées sur la figure V.17 quand l'indice q_x varie dans la zone de Brillouin. Nous supposons la bande fondamentale remplie et la bande excitée vide, soit une particule par cellule du réseau. Si ce matériau remplit l'espace entier, on sait qu'une force appliquée le long de l'axe x va induire un phénomène d'oscillation de Bloch le long de l'axe x , ainsi qu'un courant quantifié le long de l'axe y . Plus précisément, en une période de Bloch, l'indice q_x va décrire toute la zone de Brillouin et un courant de $\mathcal{C}^{(-)}$ particules/unité va circuler le long de l'axe y , par exemple vers les y positifs si l'on a choisi le sens de la force F_x de manière appropriée.

Supposons maintenant que ce même matériau ne remplit que le demi-espace $y < 0$ (figure V.18). On perd donc la périodicité en y , mais on

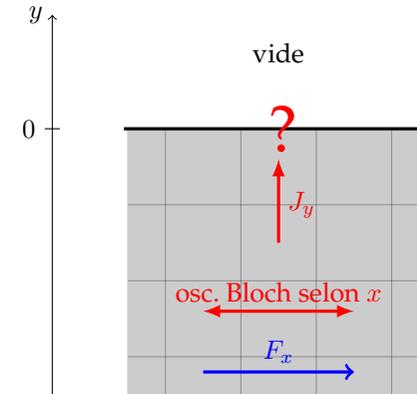


FIGURE V.18. Matériau avec une bande fondamentale topologique comme en figure V.17, mais n'occupant qu'un demi-espace. Que devient le courant J_y à l'interface ?

conserve la périodicité en x . La composante q_x du vecteur de Bloch reste donc un "bon nombre quantique", et on peut continuer à tracer les énergies des états en fonction de q_x . Pour le cœur du matériau situé loin de l'interface dans la zone $y < 0$, on s'attend à retrouver le même diagramme énergétique que pour le cas initial, de sorte qu'au moins une partie de la figure V.17 reste valable. Examinons toutefois ce qui se produit quand on applique la force F_x . On s'attend à ce qu'au cœur du matériau, le phénomène des oscillations de Bloch continue à se produire le long de la direction x et qu'un courant soit généré dans le sens des y positifs. Mais il y a un problème quand les particules arrivent en $y = 0$: elles ne peuvent pas passer du côté $y > 0$ (le vide) et elles ne peuvent pas non plus s'accumuler sur cette ligne⁷. Comment résoudre ce paradoxe ?

Ce sont les canaux de bord qui vont venir à notre secours. S'il y a dans le diagramme énergétique $\mathcal{C}^{(-)}$ lignes qui connectent la bande considérée et la bande supérieure, on va pouvoir envoyer par ce "détour" $\mathcal{C}^{(-)}$ particules vers la bande supérieure lors de chaque oscillation de Bloch, pour chaque

7. Si on a affaire à des fermions, on peut invoquer directement le principe de Pauli, mais le résultat est le même pour des bosons : deux états initialement orthogonaux (localisés en (x, y_1) et (x, y_2)) doivent rester orthogonaux au cours d'une évolution unitaire.

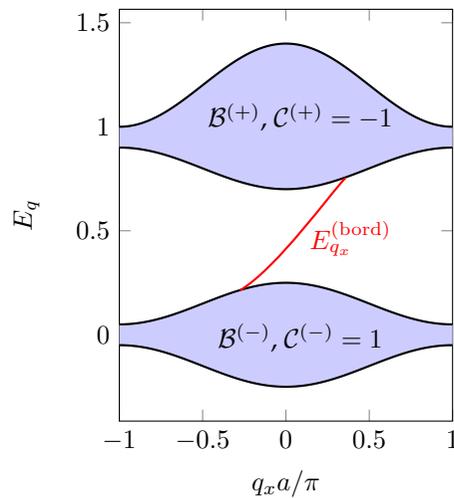


FIGURE V.19. Diagramme énergétique typique pour un matériau ne remplissant qu'un demi-espace et topologiquement non trivial (ici $C^{(-)} = 1$). Le moment q_x reste un "bon nombre quantique" et on retrouve les mêmes bandes que pour l'espace entier (figure V.17). On trouve en plus un état de bord, indiqué en rouge, d'énergie $E_{q_x}^{(\text{bord})}$. Ce canal permet "d'évacuer" vers la bande supérieure les particules qui arrivent au voisinage de l'axe $y = 0$ du fait du transport qui se produit au sein du cœur du matériau lorsqu'on applique une force parallèle à sa frontière.

cellule unité. Cela compense exactement l'arrivée du courant quantifié à la frontière $y = 0$. Une fois dans la bande supérieure, l'action de la force F_x est inversée et les particules partent vers $y = -\infty$.

On a ici une illustration simple du principe de correspondance "cœur-bord" (*bulk-edge*). La figure V.19 illustre ce principe pour le cas $C^{(-)} = 1$, avec donc un seul canal de bord, caractérisé par l'énergie $E_{q_x}^{(\text{bord})}$ et la vitesse de groupe $v_x = \frac{1}{\hbar} \frac{d}{dq_x} E_{q_x}^{(\text{bord})}$. La robustesse de cet état de bord apparaît de manière presque évidente sur ce dessin : il s'agit d'un lien qui doit nécessairement relier deux bandes d'énergie distinctes. Si on déforme de manière modérée les paramètres du réseau, ce lien ne peut pas disparaître ; le seul moyen de s'en débarrasser est de faire en sorte que les bandes se touchent puis se séparent de nouveau. Si la bande fondamentale devient

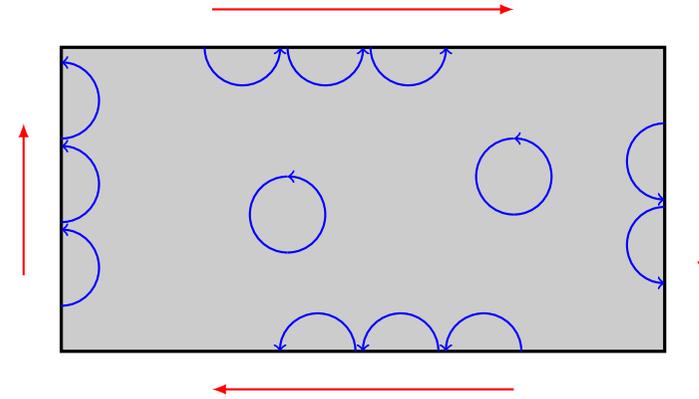


FIGURE V.20. Interprétation des états de bord dans le cas de particules chargées placées dans un champ magnétique uniforme, perpendiculaire au plan (situation de l'effet Hall quantique entier).

topologiquement triviale lors de cette opération, le canal de bord disparaît.

Une représentation imagée de ces états de bord est souvent proposée dans le cadre de l'effet Hall quantique. On considère un gaz 2D d'électrons dans un champ magnétique perpendiculaire au plan. Dans ce cas, les bandes d'énergie sont les niveaux de Landau et elles ont toutes un nombre de Chern de 1, ce qui fait que l'on s'attend effectivement à la présence d'états de bord. Dans le cœur du matériau, une représentation classique du mouvement d'un électron correspond à une trajectoire cyclotron circulaire. Il n'y a donc aucun transport. En revanche, ces trajectoires sont interrompues quand l'électron touche le bord de l'échantillon et on obtient une orbite "sautante" (*skipping orbit*) qui correspond bien à un déplacement le long de la frontière. Cette image simple ne se généralise toutefois pas aisément au cas général d'une bande topologique, contrairement au raisonnement ci-dessus fondé sur les oscillations de Bloch.

3-2 L'exemple du réseau "mur de briques" : demi-plan

Pour rendre cette discussion plus quantitative, nous avons représenté sur les figures V.22 et V.23 les énergies propres E_{q_x} pour un demi-plan

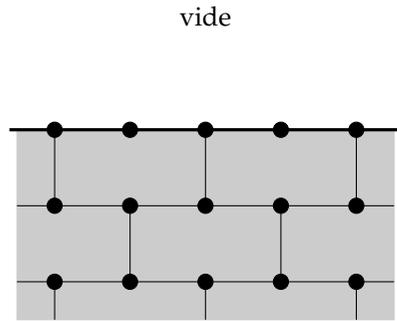


FIGURE V.21. Réseau "mur de briques" couvrant le demi-plan $y < 0$. Nous n'avons pas représenté les couplages aux seconds voisins responsables de l'apparition de propriétés topologiques.

couvert par un réseau mur de briques, comme représenté sur le schéma V.21. La figure V.22 est obtenue dans le cas topologique, pour $\Delta = 0$, $\phi_0 = \pi/2$. La figure V.23 correspond au contraire au cas normal $\Delta = J$, $\phi_0 = 0$. Dans les deux cas, on a aussi indiqué dans la partie supérieure de la figure le diagramme énergétique obtenu pour un plan entier, donc sans état de bord.

Ces deux diagrammes confirment l'intuition que nous avons développée plus haut. On voit tout d'abord que le diagramme d'énergie "bulk" (les bandes) sont inchangées quand on passe du plan entier au demi-plan. Dans le cas topologique, un canal de bord apparaît, correspondant à la branche $E_{q_x}^{(\text{bord})}$ qui joint les deux bandes d'énergie $\mathcal{B}^{(\pm)}$. Dans le cas non topologique, il y a également des branches d'états de bords visibles, mais elles ne connectent pas les deux bandes $\mathcal{B}^{(+)}$ et $\mathcal{B}^{(-)}$. Ces branches n'ont donc pas de robustesse topologique et elles peuvent disparaître quand on déforme le réseau. Elles dépendent également fortement de la manière selon laquelle on découpe l'interface matériau–vide. Ce point a été étudié en détail pour le graphène, voir par exemple le livre de BERNEVIG & HUGHES (2013) et les références qu'il indique.

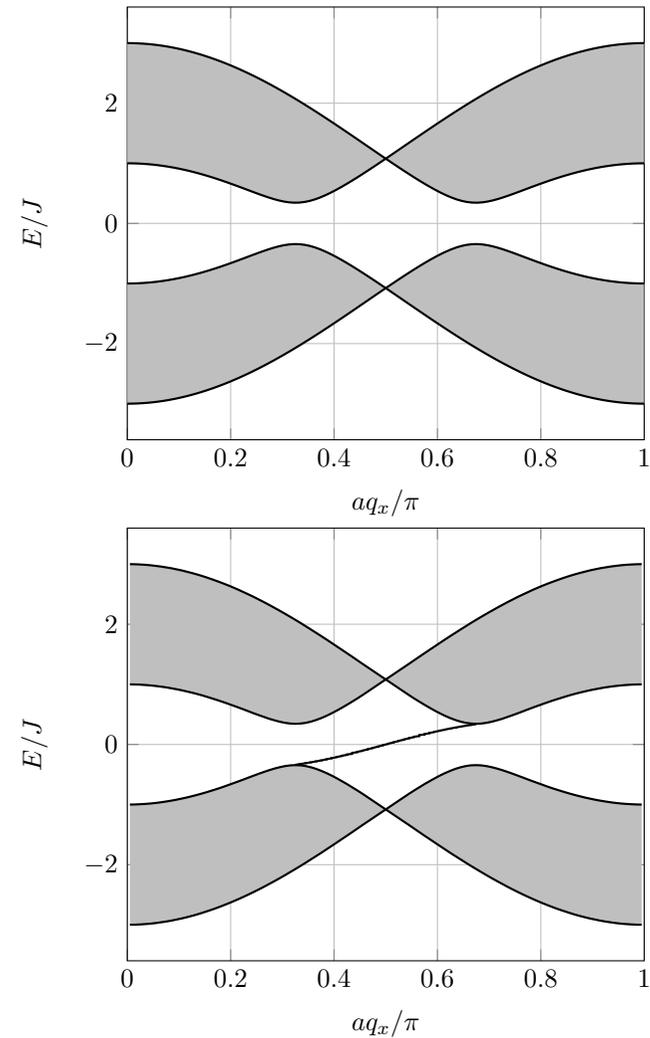


FIGURE V.22. Énergies E_{q_x} pour un réseau "mur de briques" dans le cas topologique $J' = J/10$, $\Delta = 0$, $\phi_0 = \pi/2$. Haut : plan entier. Bas : demi-plan avec la présence d'un état de bord.

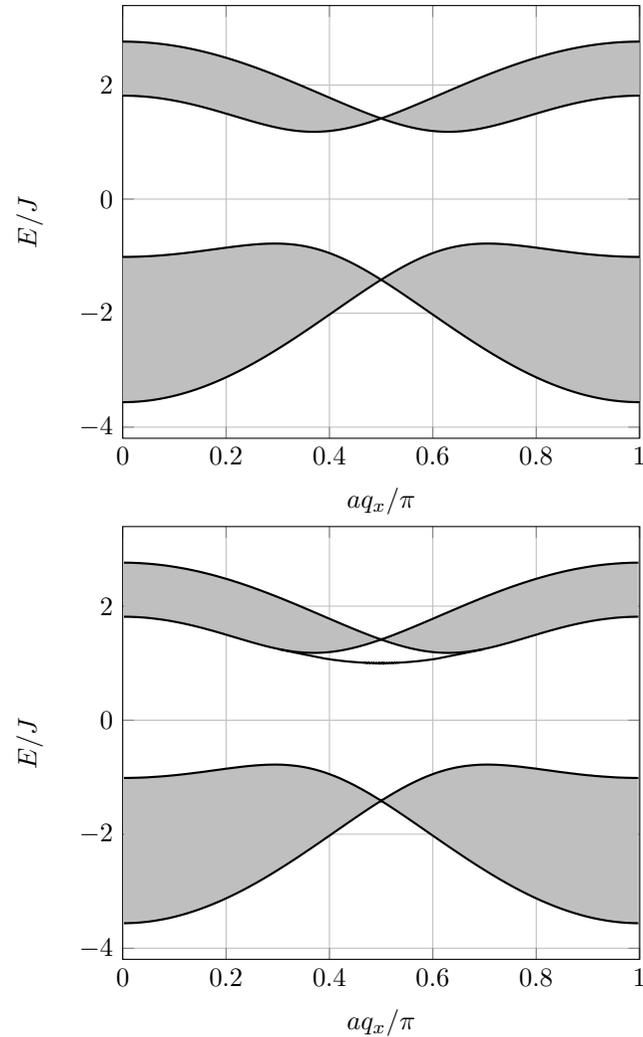


FIGURE V.23. Énergies E_{q_x} pour un réseau "mur de briques" dans le cas non topologique $J' = J/10$, $\Delta = J$, $\phi_0 = 0$. Haut : plan entier. Bas : demi-plan.

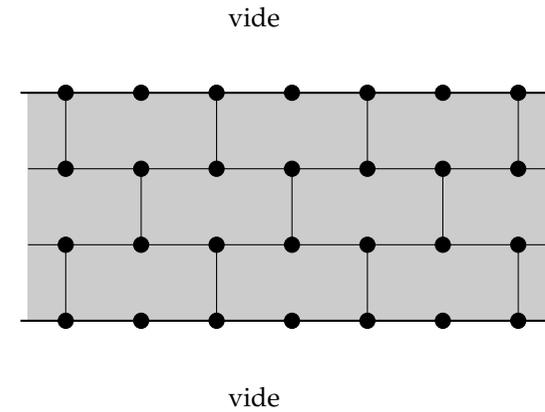


FIGURE V.24. Ruban formé avec le réseau mur de briques, infini dans la direction x et comportant n_y lignes dans la direction y (ici $n_y = 4$). On peut prendre des conditions aux limites ouvertes selon y ou des conditions aux limites périodiques en identifiant la ligne 1 avec la ligne $n_y + 1$.

3-3 L'exemple du réseau "mur de briques" : ruban

L'exemple du demi-plan que nous avons développé ci-dessus a l'avantage d'être très proche du système infini dont nous sommes partis, mais il ne permet pas de suivre de manière individuelle la variation des énergies des différents états. Pour y remédier, il est utile de s'intéresser également à la géométrie d'un ruban infini dans une direction, x par exemple, et ne comportant qu'un nombre fini n_y de lignes dans l'autre direction (figure V.24).

Pour chercher les états propres de ce système, on peut toujours utiliser le théorème de Bloch selon la direction x . Pour chaque valeur de q_x , on a un problème aux valeurs propres pour un hamiltonien de taille $(2n_y) \times (2n_y)$ que l'on diagonalise numériquement. En reprenant les mêmes paramètres qu'au paragraphe précédent, on retrouve dans le cas topologique des ca-

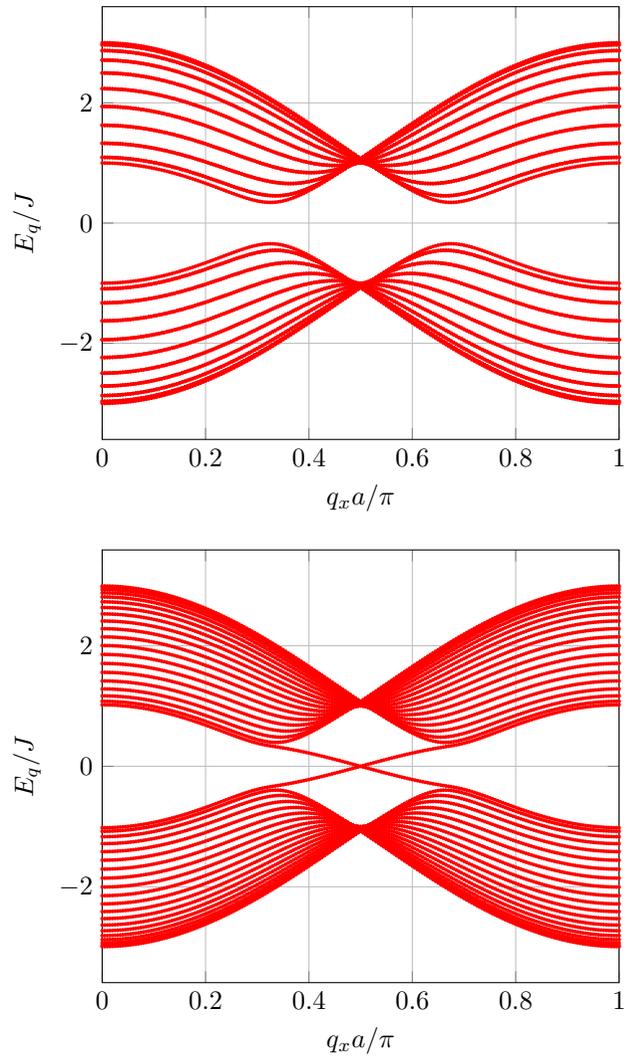


FIGURE V.25. Réseau "mur de briques" avec un ruban de $n_y = 20$ lignes, cas topologique : $J' = J/10$, $\Delta = 0$, $\phi_0 = \pi/2$. Haut : conditions aux limites périodiques selon y . Bas : conditions aux limites ouvertes.

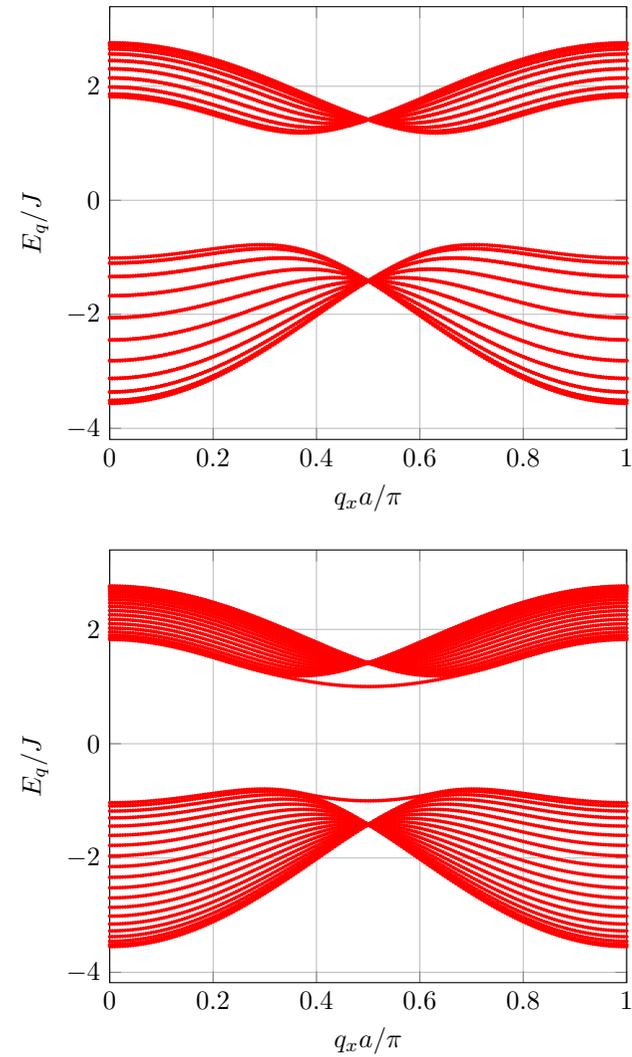


FIGURE V.26. Réseau "mur de briques" avec un ruban de $n_y = 20$ lignes, cas non topologique : $J' = J/10$, $\Delta = J$, $\phi_0 = 0$. Haut : conditions aux limites périodiques selon y . Bas : conditions aux limites ouvertes.

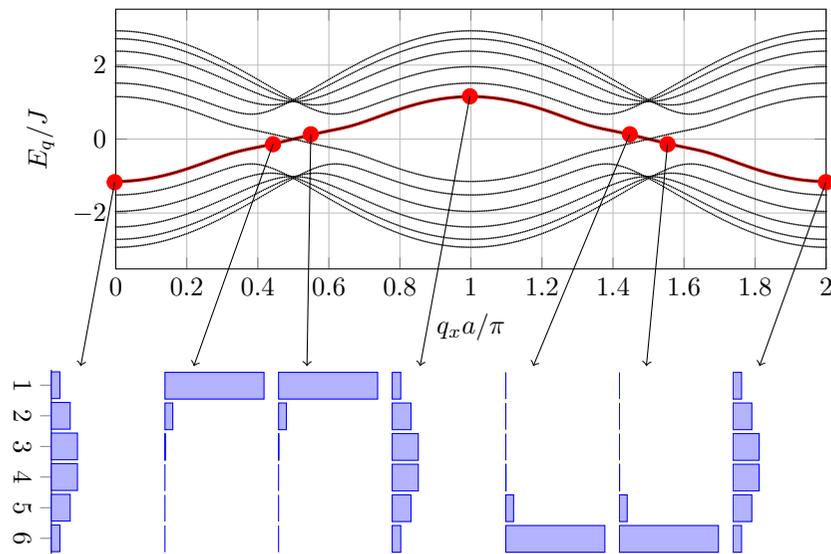


FIGURE V.27. Haut : représentation avec une zone de Brillouin étendue des états propres d'un ruban du réseau "mur de briques". On a choisi $n_y = 6$ lignes et on s'est placé dans la même situation topologique que sur la figure V.25, $J' = J/10$, $\Delta = 0$, $\phi_0 = \pi/2$. Bas : la population du canal de bord sur les $n_y = 6$ lignes est indiquée pour quelques valeurs de l'indice q_x .

naux de bord reliant les deux bandes d'énergie (figure V.25, bas). Notons que l'on a maintenant deux canaux de bord au lieu d'un, puisqu'il y a un canal se propageant sur le haut du ruban, et un canal se propageant sur le bas. Pour une valeur de q_x donnée, les vitesses de groupe de ces deux canaux $v_x = \frac{1}{\hbar} \frac{d}{dq_x} E_{q_x}^{(\text{bord})}$ sont égales en valeur absolue, et de signe opposé.

Dans le cas non topologique (figure V.26, bas), cette étude faite avec le ruban confirme également les résultats obtenus avec le demi-plan : pas d'états de bord connectant les deux bandes d'énergie, mais des états nouveaux au voisinage de chacune des bandes. Notons que ces canaux de bord, topologiques ou non, disparaissent quand on prend des conditions aux limites périodiques entre les deux bords du ruban, comme attendu (cf. haut des figures V.25 et V.26).

Pour compléter notre description de ces canaux de bord, nous avons représenté sur la figure V.27 les énergies d'un ruban de $n_y = 6$ lignes seulement, ce qui permet de suivre facilement chaque niveau d'énergie. Nous avons choisi une représentation de zone de Brillouin étendue, ce qui permet de visualiser ce qui se passe dans une oscillation de Bloch. Considérons par exemple une particule préparée à $t = 0$ dans l'état surligné en rouge avec le moment $q_x = 0$. Cet état est un état de cœur (*bulk*), puisque sa population est plutôt concentrée sur les lignes centrales du ruban. En présence d'une force F_x , le moment q_x va augmenter selon la loi $q_x = F_x t / \hbar$ et la particule va suivre l'état surligné si la force F n'est pas trop grande. Quand $q_x a \sim \pi/2$, cet état est devenu un état de bord, localisé essentiellement sur le haut du ruban. Pour $q_x a \sim \pi$, la particule est de nouveau localisée vers le centre du ruban, mais elle est passée dans la bande d'énergie supérieure. Elle redescend ensuite vers la bande inférieure, cette fois-ci en étant localisée sur le bas du ruban pour $q_x a \sim 3\pi/2$. Elle revient enfin à son état initial (à une phase près) pour $q_x a = 2\pi$. Ce comportement confirme l'argument que nous avons développé un peu plus haut pour un demi-plan.

3-4 Réservoir et transport quantifié

Les arguments développés ci-dessus permettent d'expliquer la quantification du transport sur un cas concret, quand le ruban est couplé à un réservoir imposant son potentiel chimique μ . Plus précisément, supposons que μ est situé dans le gap qui sépare la bande fondamentale de la bande excitée. Considérons un ruban de taille finie L_x selon x , comportant $n_x = L_x/a$ sites avec des conditions aux limites périodiques selon cet axe. Le moment q_x est donc quantifié et peut prendre une des n_x valeurs

$$q_x = \frac{\pi}{a} \left(-1 + \frac{2j_x}{n_x} \right) \quad \text{avec } j_x = 1, \dots, n_x. \quad (\text{V.66})$$

Supposons la bande fondamentale pleine jusqu'à la valeur μ (figure V.28, haut) et appliquons une force F_x le long de l'axe x . L'équation du mouvement $\hbar \dot{q}_x = F_x$ nous indique que la période des oscillations de Bloch, c'est-à-dire le temps nécessaire pour parcourir la zone de Brillouin de lar-

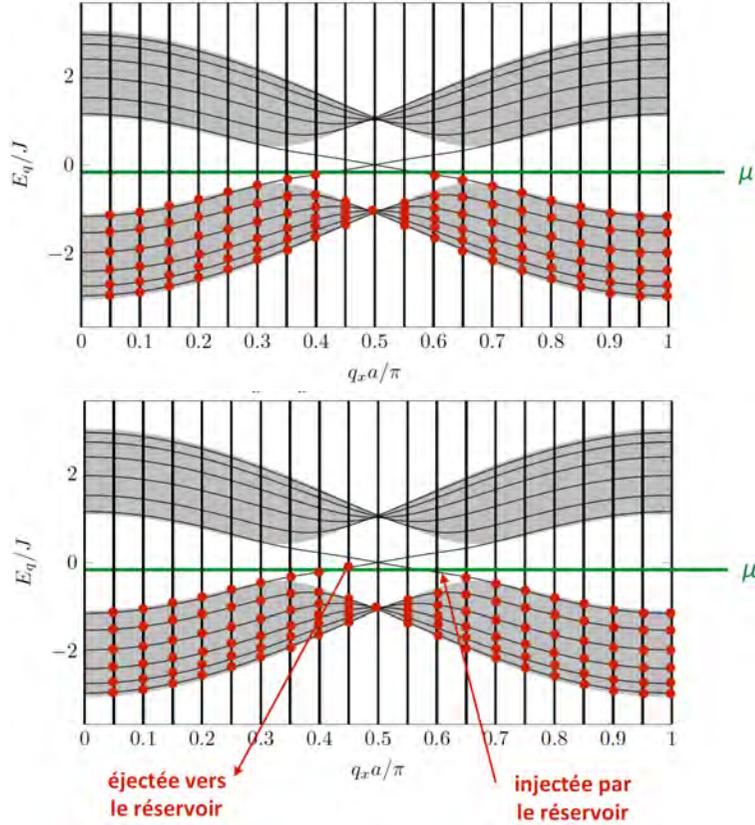


FIGURE V.28. Quantification du courant quand un réservoir impose son potentiel chimique μ . Haut : on considère un ruban de taille finie $L_x = n_x a$ selon x avec des conditions aux limites périodiques selon cet axe, de sorte que les moments q_x sont quantifiés. Bas : on applique une force F_x le long de l'axe x créant une oscillation de Bloch de période t_B . En un temps $\delta t = t_B/n_x$, chaque moment a augmenté d'un quantum, de sorte que le réservoir doit faire passer une particule du haut du ruban vers le bas du ruban pour maintenir l'équilibre.

geur $2\pi/a$, est $t_B = 2\pi\hbar/(Fa)$. En un temps

$$\delta t = \frac{t_B}{n_x} = \frac{2\pi\hbar}{F_x L_x}, \quad (\text{V.67})$$

tous les moments se sont donc décalés d'un quantum $2\pi/L_x$ vers la droite. Une particule sur le canal de bord montant est donc passée au dessus de μ et il manque une particule sur un état en dessous de μ sur le canal de bord descendant. Le rôle du réservoir est de rétablir l'équilibre, ce qui revient à transférer une particule localisée en haut du ruban vers le bas de ce ruban, le reste des particules se réajustant à l'intérieur de la bande fondamentale. Cela crée un courant selon la direction y , et la densité de courant correspondante est

$$J_y = \frac{1/\delta t}{L_x} = \frac{F_x}{2\pi\hbar}, \quad (\text{V.68})$$

soit une conductivité

$$\sigma_{yx} = \frac{J_y}{F_x} = \frac{1}{h}. \quad (\text{V.69})$$

Cette conductivité est bien quantifiée en unité de $1/h$ avec un nombre quantique $\mathcal{C} = 1$, correspondant au fait qu'il n'y a qu'un seul canal de bord montant.

3-5 Guides d'onde et systèmes passifs

Une belle illustration de l'existence d'états de bords dans un modèle de type Haldane a été fournie par RECHTSMAN, ZEUNER et al. (2013a). Il s'agit d'expériences menées avec une série de guides d'onde parallèles comme sur la figure V.29. Ces guides d'onde sont gravés par laser dans de la silice d'indice $n_0 = 1.45$ et ils correspondent à une légère augmentation de l'indice local $\Delta n(\mathbf{r}) \sim 10^{-3}$. Dans le plan transverse, ces guides d'onde sont arrangés de manière à former un réseau hexagonal. La propagation de la lumière le long de l'axe des guides se fait avec un nombre d'onde k_0 et elle joue le rôle du temps qui figurait les problèmes 2D que nous avons traités jusqu'ici. On peut ainsi écrire une équation pour le champ électrique $\mathcal{E}(\mathbf{r})$ qui est formellement identique à celle d'une particule massive évoluant à deux dimensions :

$$i \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial z} = -\frac{1}{2k_0} \left(\frac{\partial^2 \mathcal{E}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \mathcal{E}}{\partial y^2} \right) - \frac{k_0 \Delta n(\mathbf{r})}{n_0} \mathcal{E}. \quad (\text{V.70})$$

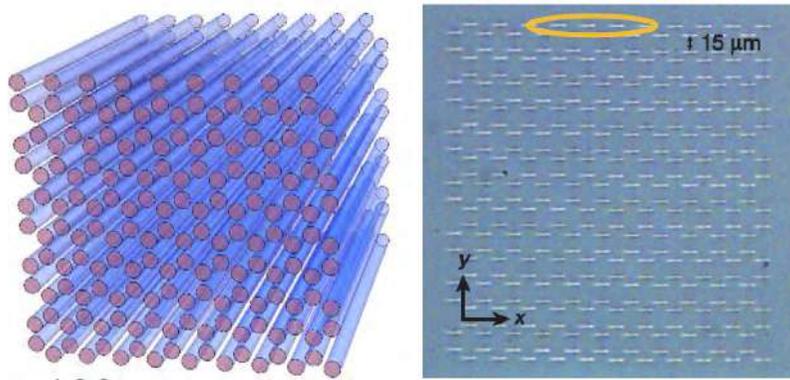


FIGURE V.29. Série de guides d'onde parallèles formant un réseau hexagonal de côté $a = 15 \mu\text{m}$. La longueur de propagation est de 10 cm. Chaque guide est elliptique avec pour grand et petit axes 11 et $4 \mu\text{m}$. Gauche : figure extraite de RECHTSMAN, ZEUNER et al. (2013b). Droite : figure extraite de RECHTSMAN, ZEUNER et al. (2013a).

Plus précisément, chaque guide d'onde ne contient qu'un mode transverse et la lumière peut passer d'un guide au guide voisin du fait du couplage par onde évanescente. On réalise ainsi une situation très proche du régime de Hubbard et du modèle des liaisons fortes pour décrire le mouvement d'une particule sur un réseau. En particulier, pour un réseau infini, la dynamique du champ électrique $\mathcal{E}(\mathbf{r})$ dans le plan xy au fur et à mesure de la progression le long de l'axe z est bien décrite par des bandes d'énergie $E(q_x, q_y)$.

Pour passer du réseau hexagonal simple au modèle de Haldane, la modulation temporelle étudiée plus haut est implémentée ici en donnant une forme hélicoïdale aux guides d'onde, avec environ 20 tours d'hélice sur la distance de propagation totale de 10 cm (figure V.30a). Comme expliqué ci dessus, cela confère aux bandes d'énergie $E(q_x, q_y)$ un caractère topologique et donne naissance à des états de bord pour un échantillon de taille finie. En l'occurrence, RECHTSMAN, ZEUNER et al. (2013a) ont travaillé avec des échantillons de section carrée, comportant de une à quelques centaines de guides d'onde. Pour sonder ces états de bord, ils ont injecté de la lumière sur un côté du carré et mesuré la distribution de la lumière en sortie,

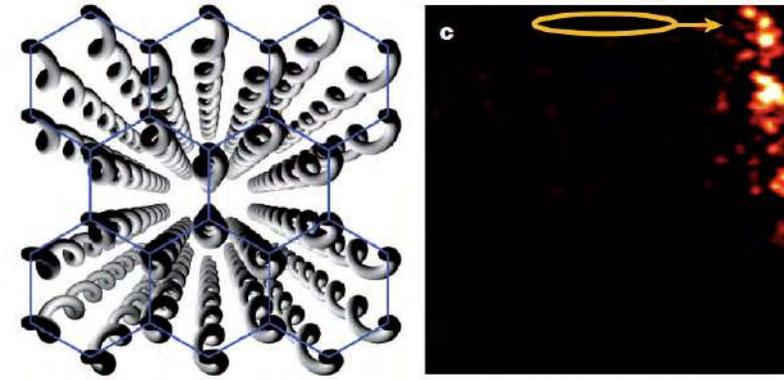


FIGURE V.30. Gauche : guides d'onde torsadés, permettant d'implémenter la modulation temporelle étudiée dans ce chapitre et conduisant à des bandes topologiques. Droite : états de bord observés pour un rayon de l'hélice égal à $8 \mu\text{m}$. Figures extraites de RECHTSMAN, ZEUNER et al. (2013a).

après propagation sur 10 cm.

Un exemple typique est représenté sur la figure V.30b, avec deux caractéristiques importantes :

- La lumière n'a pratiquement pas diffusé vers le cœur de l'échantillon.
- La lumière a progressé le long du bord de manière chirale, en longeant la frontière de l'échantillon dans le sens des aiguilles d'une montre.
- Cet état de bord chiral est robuste : même au passage sur le coin supérieur droit de l'échantillon, il n'y a pratiquement pas eu de réflexion; la lumière a ensuite longé vers le bas le bord droit de l'échantillon.

Dans leur article, RECHTSMAN, ZEUNER et al. (2013a) ont procédé à des tests complémentaires pour vérifier la pertinence du modèle, comme l'influence du rayon de courbure de l'hélice, ou encore le rôle de défauts volontairement ajoutés sur le bord de l'échantillon.

3-6 Effet Hall de spin

Nous nous sommes concentrés dans ce chapitre sur la méthode la plus simple pour créer des bandes d'énergie de topologie non triviale : nous avons considéré une particule sans spin et nous nous sommes placés dans une situation où l'invariance par renversement du temps était brisée. Cela permet d'obtenir une courbure de Berry telle que $\Omega_{-q} \neq -\Omega_q$ et donc une intégrale non nulle pour cette courbure de Berry (*i.e.* un nombre de Chern $C \neq 0$).

À partir de 2005, on a commencé à réaliser qu'il était également possible d'obtenir une topologie non triviale pour des problèmes invariants par renversement du temps, pourvu que l'on tire parti d'un degré de liberté de spin \uparrow et \downarrow (ou de pseudo-spin) (KANE & MELE 2005a; KANE & MELE 2005b; BERNEVIG, HUGHES et al. 2006). L'idée de base est de réaliser une situation où les nombres de Chern C_\uparrow et C_\downarrow prennent des valeurs égales en valeur absolue, mais de signes opposés. Il y a toujours $|C|$ canaux de bord par spin; ces canaux circulent dans des sens opposés, ce qui est bien compatible avec l'invariance par renversement du temps. La première mise en évidence expérimentale de l'effet Hall de spin a été décrite par KÖNIG, WIEDMANN et al. (2007).

Nous n'allons pas reprendre ici l'algèbre correspondant à la description de cet effet Hall de spin, qui est voisine de ce que nous avons rencontré jusqu'ici – avec la complication due à l'existence de deux états internes pour les particules au lieu d'un. Signalons simplement que la robustesse des états de bords est assurée s'il ne peut pas y avoir de diffusion depuis le canal \uparrow vers le canal \downarrow , et réciproquement. Pour des fermions, l'invariance par renversement du temps⁸ garantit une protection topologique en empêchant l'hybridation entre ces deux canaux et donc la rétro-diffusion sur d'éventuels défauts. Pour des bosons, en particulier pour des photons, cette protection n'existe pas de manière aussi forte, même si des versions plus faibles ont été analysées (WU & HU 2015).

Une expérience récente menée au QJI de l'Université du Maryland a permis de mettre en évidence ces canaux de bords pour des photons individuels (BARIK, KARSAHIN et al. 2018). On part de nouveau d'un matériau formé de cellules hexagonales, en l'occurrence un cristal photonique

8. valable en l'absence d'impuretés magnétiques

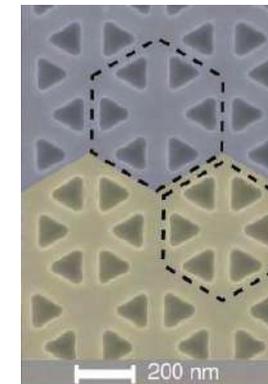


FIGURE V.31. Figure extraite de BARIK, KARSAHIN et al. (2018).

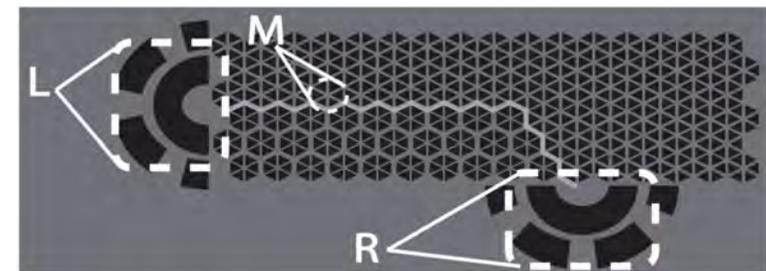


FIGURE V.32. Figure extraite de BARIK, KARSAHIN et al. (2018)

(membrane de GaAs de $0.16 \mu\text{m}$ d'épaisseur) dans lequel on découpe des ensembles de 6 triangles équilatéraux comme sur la figure V.31. On réalise deux phases topologiquement distinctes en

- poussant les trous triangulaires vers l'extérieur de chaque hexagone, comme sur la partie supérieure de la figure V.31 ;
- poussant les trous triangulaires vers l'intérieur de chaque hexagone, comme sur la partie inférieure de la figure V.31 ;

A la frontière entre deux zones correspondant à ces phases (figure VI.20), on s'attend à voir apparaître des courants de bord. Plus précisément, on s'intéresse dans cette expérience à la propagation d'un champ électromagnétique, avec le champ magnétique perpendiculaire au plan des

hexagones et le champ électrique dans le plan. Le pseudo-spin correspond à la polarisation de ce champ électrique : les deux canaux de bord circulant en sens opposé correspondent aux deux polarisations circulaires σ^- ou σ^+ .

La lumière est injectée dans ce matériau grâce à des boîtes quantiques placées au sein même de la membrane de GaAs. On éclaire une zone précise de l'échantillon de façon à n'exciter que les boîtes de cette zone (50 boîtes/ μm^2). Un champ magnétique important (9 Tesla) lève la dégénérescence entre les polarisations σ_{\pm} , ce qui permet de déterminer la polarisation d'un photon détecté en mesurant sa longueur d'onde. Ainsi sur la figure VI.20, on éclaire la zone M et on détecte les photons dans les zones L (left) et R (right). On vérifie qu'il y a bien une relation bi-univoque entre la polarisation du photon et le sens du canal de bord (figure V.33). On vérifie également la robustesse (relative) de ces canaux de bord. Les photons ont réussi à "prendre le virage" de la frontière entre les deux régions. Une analyse de la distribution temporelle des photons (la fonction de corrélation d'intensité $g^2(\tau)$) montre le caractère "particulaire" de cette propagation par canaux de bord, le dégroupement des photons émis par une boîte quantique restant vérifié au niveau des détecteurs.

Ce type de dispositif, protégé topologiquement, permet d'envisager des applications nouvelles en terme d'intrication quantique entre émetteurs, ainsi que la construction de portes logiques quantiques intégrées [voir par exemple LODAHL, MAHMOODIAN et al. (2017) et AMO (2018)].

Appendice : les couplages aux second voisins

Modèle de Haldane

Avec la convention de la figure V.2, les couplages du site A de la cellule r_j à ses six seconds voisins s'écrivent pour le modèle de Haldane :

$$-J' \sum_{\alpha=1}^3 \left(e^{+i\phi_0} |A, r_j\rangle \langle A, r_j - \rho_\alpha| + e^{-i\phi_0} |A, r_j\rangle \langle A, r_j + \rho_\alpha| \right) + \text{H.c.} \quad (\text{V.71})$$

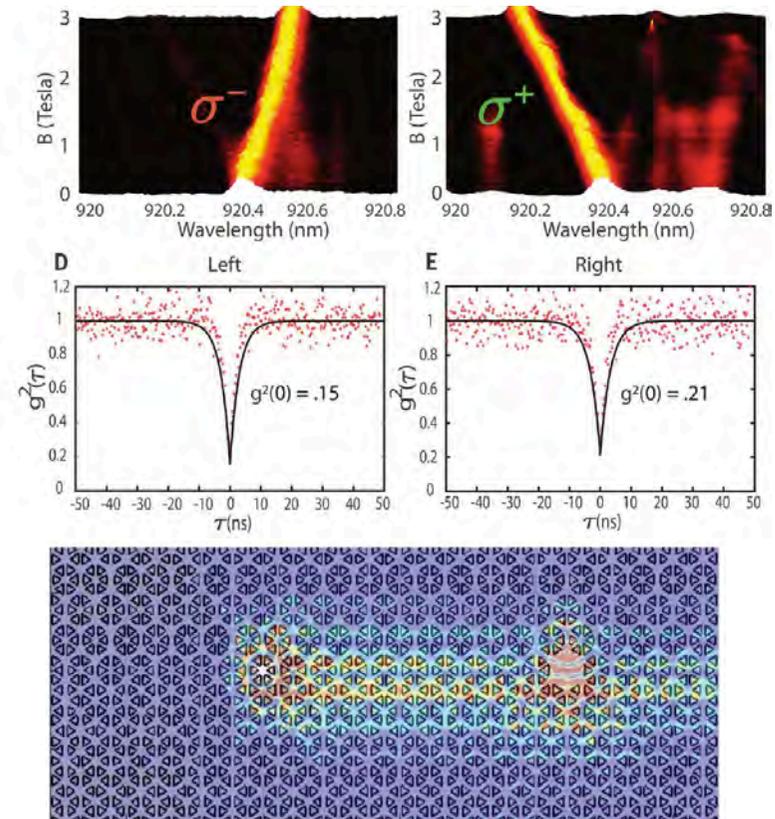


FIGURE V.33. Figure extraite de BARIK, KARSAHIN et al. (2018)

et pour le site B de cette même cellule :

$$-J' \sum_{\alpha=1}^3 (e^{-i\phi_0} |B, \mathbf{r}_j\rangle \langle B, \mathbf{r}_j - \boldsymbol{\rho}_\alpha| + e^{+i\phi_0} |B, \mathbf{r}_j\rangle \langle B, \mathbf{r}_j + \boldsymbol{\rho}_\alpha|) + \text{H.c.} \quad (\text{V.72})$$

Partant de la fonction de Bloch

$$|\psi_{\mathbf{q}}\rangle = \sum_{\mathbf{j}} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_j} (\alpha_{\mathbf{q}} |A, \mathbf{r}_j\rangle + \beta_{\mathbf{q}} |B, \mathbf{r}_j\rangle), \quad (\text{V.73})$$

écrivons l'équation aux valeurs propres pour l'hamiltonien

$$\hat{H}|\psi_{\mathbf{q}}\rangle = E_{\mathbf{q}} |\psi_{\mathbf{q}}\rangle \Rightarrow \langle A, \mathbf{r}_j | \hat{H} |\psi_{\mathbf{q}}\rangle = E_{\mathbf{q}} \langle A, \mathbf{r}_j | \psi_{\mathbf{q}}\rangle \quad (\text{V.74})$$

ce qui donne pour le couplage aux seconds voisins

$$-J' \alpha_{\mathbf{q}} \sum_{\alpha=1}^3 (e^{+i\phi_0} e^{i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{r}_j - \boldsymbol{\rho}_\alpha)} + e^{-i\phi_0} e^{i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{r}_j + \boldsymbol{\rho}_\alpha)}) = E_{\mathbf{q}} \alpha_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_j} \quad (\text{V.75})$$

ou encore

$$\begin{aligned} \hat{H}_{\mathbf{q},AA} &= -J' \sum_{\alpha=1}^3 (e^{+i(\phi_0 - \mathbf{q}\cdot\boldsymbol{\rho}_\alpha)} + e^{i(-\phi_0 + \mathbf{q}\cdot\boldsymbol{\rho}_\alpha)}) \\ &= -2J' \sum_{\alpha=1}^3 \cos(\mathbf{q}\cdot\boldsymbol{\rho}_\alpha - \phi_0). \end{aligned} \quad (\text{V.76})$$

Le passage de $\hat{H}_{\mathbf{q},AA}$ à $\hat{H}_{\mathbf{q},BB}$ se fait en changeant ϕ_0 en $-\phi_0$ [cf. (V.71-V.72)].

Le mur de briques

En parallèle avec ce que nous avons fait pour le réseau hexagonal, introduisons les deux vecteurs $\boldsymbol{\rho}_\alpha$, $\alpha = 1, 2$:

$$\boldsymbol{\rho}_1 = -\mathbf{a}_1 = \begin{pmatrix} -1 \\ -1 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\rho}_2 = \mathbf{a}_2 = \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (\text{V.77})$$

La convention de la figure V.2 que nous avons adoptée pour déterminer la phase associée à un lien tunnel donne donc pour le choix représenté en figure V.7 :

$$-J' \sum_{\alpha=1}^2 (e^{+i\phi_0} |A, \mathbf{r}_j\rangle \langle A, \mathbf{r}_j - \boldsymbol{\rho}_\alpha| + e^{-i\phi_0} |A, \mathbf{r}_j\rangle \langle A, \mathbf{r}_j + \boldsymbol{\rho}_\alpha|) + \text{H.c.} \quad (\text{V.78})$$

L'algèbre est ensuite identique à celle qui précède pour le modèle de Haldane [cf. eq. (V.76)], la seule différence étant que la somme sur α va de 1 à 2 (au lieu de 1 à 3).

Chapitre VI

Le modèle de Harper-Hofstadter : l'effet Hall retrouvé

Nous abordons dans ce dernier chapitre le problème qui est en fait à l'origine de la notion de bandes topologiques : l'effet Hall quantique. C'est en effet l'analyse du mouvement quantique à deux dimensions d'un ensemble de charges placées dans un champ magnétique qui a montré la quantification de grandeurs liées au transport, comme la conductivité de Hall, et qui a mis en avant l'importance des états de bords. C'est également cette analyse qui a permis de dégager la notion de robustesse topologique en physique de la matière condensée.

A priori l'étude de l'effet Hall quantique ne nécessite pas de réseau sous-jacent. On trouve cet effet si les particules se déplacent librement dans le plan xy , sous le seul effet du champ magnétique $\mathbf{B} = B \mathbf{u}_z$; le spectre en énergie correspond alors aux *niveaux de Landau*. Toutefois, dans le but de faire le lien avec les cours qui précèdent et pour décrire précisément les expériences récentes en photonique et en physique des atomes froids, nous allons nous concentrer essentiellement sur le cas où un potentiel périodique $V(\mathbf{r})$ est également présent dans le plan xy . La possibilité de traiter ce potentiel dans la limite des liaisons fortes permet alors de simplifier considérablement l'analyse : c'est le modèle de Harper-Hofstadter.

Une fois ce modèle posé, nous étudierons ses implémentations récentes en physique atomique et en photonique. Nous verrons comment elles ont permis la mesure explicite du nombre de Chern des bandes d'énergie. Nous montrerons également comment les états de bord associés à cette topologie non triviale permettent de réaliser de nouveaux dispositifs, des *lasers topologiques*, qui exploitent la robustesse des bandes ainsi formées.

Nous terminerons ce chapitre par un bref aperçu des nouvelles possibilités ouvertes par l'exploitation des degrés de liberté internes des atomes. Ces degrés de liberté peuvent à eux seuls former une dimension de l'espace, on parle alors de *dimension synthétique*. On peut également les utiliser pour enrichir le "paysage énergétique" dans lequel les particules évoluent : les bandes d'énergie qui apparaissent pour ces "états habillés" peuvent elles aussi posséder une topologie non triviale, très similaire à celle d'un niveau de Landau. Pour finir, nous montrerons comment cet "habillage" des atomes par la lumière peut donner naissance à des interactions non locales entre particules.

1 Le modèle de Harper-Hofstadter

L'effet Hall quantique concerne le mouvement de particules chargées en mouvement libre dans le plan xy , en présence d'un champ magnétique $\mathbf{B} = B \mathbf{u}_z$ perpendiculaire à ce plan. Le modèle de Harper-Hofstadter¹ est une version discrétisée de ce problème : les particules sont placées sur un réseau régulier, carré ou triangulaire, décrit dans la limite des liaisons fortes avec uniquement des couplages entre premiers voisins. La présence

1. Plus précisément, HARPER (1955) a montré que l'étude de ce mouvement se ramenait à un problème uni-dimensionnel, dont il a étudié la limite en champ faible, retrouvant ainsi les niveaux de Landau. HOFSTADTER (1976) a approfondi cette étude en montrant la nature fractale du spectre, qui devient significative pour de grands champs magnétiques.

du champ magnétique est prise en compte par des amplitudes de saut complexes entre sites adjacents.

Dans cette partie, nous allons commencer par rappeler quelques résultats du problème continu, en particulier le spectre en niveaux de Landau équidistants, avant de passer au problème discrétisé.

1-1 Les niveaux de Landau

Nous commençons notre discussion par un bref rappel concernant le traitement quantique du mouvement d'une particule chargée dans un champ magnétique uniforme $\mathbf{B} = B \mathbf{u}_z$. Ce problème est abordé dans de nombreux ouvrages de mécanique quantique [voir par exemple COHEN-TANNOUJJI, DIU et al. (1973)] et nous l'avons étudié en détail dans le cours 2013-14. Nous allons donc nous borner ici à donner les quelques éléments pertinents en relation avec notre thème principal, les bandes d'énergie topologiques.

L'hamiltonien décrivant le mouvement de la particule de masse m et de charge e s'écrit

$$\hat{H} = (\hat{\mathbf{p}} - e\mathbf{A}(\hat{\mathbf{r}}))^2 / 2m \quad (\text{VI.1})$$

où $\hat{\mathbf{r}}$ et $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla_{\mathbf{r}}$ désignent les opérateurs position et impulsion de la particule. Le potentiel vecteur est défini à une transformation de jauge près et vérifie

$$\nabla \times \mathbf{A} = \mathbf{B}. \quad (\text{VI.2})$$

Nous nous limiterons ici au mouvement de la particule dans le plan xy perpendiculaire au champ magnétique. Le spectre en énergie s'obtient simplement en remarquant que l'hamiltonien peut encore s'écrire

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \left(\hat{\Pi}_x^2 + \hat{\Pi}_y^2 \right), \quad (\text{VI.3})$$

où l'on a introduit l'opérateur quantité de mouvement

$$\hat{\Pi} = \hat{\mathbf{p}} - e\mathbf{A}(\hat{\mathbf{r}}). \quad (\text{VI.4})$$

Les deux composantes de cet opérateur vérifient la relation de commutation

$$[\hat{\Pi}_x, \hat{\Pi}_y] = i\hbar eB \quad (\text{VI.5})$$

de sorte que l'algèbre de ces composantes est formellement identique à celle d'un oscillateur harmonique

$$\hat{H} = \frac{\hbar\omega}{2} \left(\hat{X}^2 + \hat{P}^2 \right) \quad \text{avec} \quad [\hat{X}, \hat{P}] = i. \quad (\text{VI.6})$$

On déduit de cette équivalence que le spectre est composé de niveaux équidistants appelés *niveaux de Landau* :

$$E_n = \hbar\omega_c (n + 1/2) \quad \text{avec} \quad \omega_c = eB/m, \quad (\text{VI.7})$$

ω_c représentant la fréquence cyclotron de la particule dans le champ B .

Une étude détaillée des états propres associés à ce spectre en énergie montre que chaque niveau de Landau possède une dégénérescence macroscopique

$$\text{dégénérescence} = \frac{\mathcal{S}}{2\pi\ell^2} \quad (\text{VI.8})$$

où \mathcal{S} est la surface de l'échantillon et

$$\ell = (\hbar/eB)^{1/2} \quad (\text{VI.9})$$

est la *longueur magnétique*.

Nous obtenons donc un spectre de bande similaire à celui d'une particule dans un potentiel périodique, à ceci près que chaque bande est infiniment étroite. Un calcul détaillé permet de montrer que le nombre de Chern \mathcal{C} de chaque niveau de Landau vaut 1. Cela conduit à une conductivité de Hall σ_{xy} non nulle, ce qui généralise en fait un résultat bien connu de mécanique classique : quand on applique une force $\mathbf{F} = F\mathbf{u}_x$ (par exemple grâce à un champ électrique) sur une particule chargée placée dans un champ magnétique orienté selon z , la particule se déplace en moyenne le long de l'axe y . Ce déplacement peut être vu comme un cas particulier de la *vitesse anormale* que nous avons rencontrée au chapitre 4.

1-2 Réseau carré et champ magnétique

Nous passons maintenant au problème de Harper–Hofstadter, qui consiste à transposer la question précédente à un espace discrétisé. Plus précisément, nous souhaitons modéliser le mouvement d'une particule sur

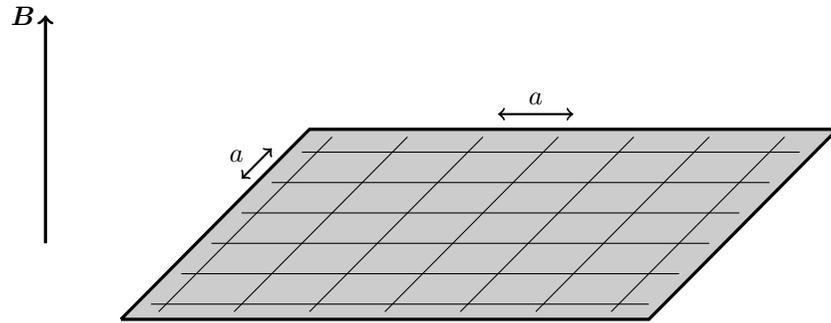


FIGURE VI.1. Réseau carré à deux dimensions de pas a en présence d'un champ magnétique B orthogonal au plan.

un réseau carré de côté a , dans le cas où la particule est chargée et soumise à un champ magnétique uniforme perpendiculaire au plan du réseau (figure VI.1). Nous supposons qu'il est légitime de limiter les couplages aux sites les plus proches et nous limiterons à l'approximation à une bande : une base de l'espace des états de la particule est donnée par $\{|A_j\rangle\}$, où la paire d'entiers relatifs $\mathbf{j} = (j_x, j_y)$ repère la position de chaque site :

$$A_j : \quad \mathbf{r}_j = a(j_x \mathbf{u}_x + j_y \mathbf{u}_y). \quad (\text{VI.10})$$

En champ magnétique nul, l'hamiltonien s'écrit

$$\hat{H}_0 = -J \sum_{\langle \mathbf{j}, \mathbf{j}' \rangle} |A_j\rangle \langle A_{j'}|, \quad (\text{VI.11})$$

où la notation $\langle \mathbf{j}, \mathbf{j}' \rangle$ restreint la somme sur les couples de proches voisins. Comme nous l'avons vu dans les chapitres précédents, les états propres de cet hamiltonien périodique pour une cellule unité à un site sont les fonctions de Bloch

$$|\psi_{\mathbf{q}}\rangle = \sum_{\mathbf{j}} e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_j} |A_j\rangle \quad (\text{VI.12})$$

et leur énergie est

$$E_{\mathbf{q}} = -2J [\cos(q_x a) + \cos(q_y a)], \quad (\text{VI.13})$$

ce qui correspond à une bande d'énergie de largeur $8J$.

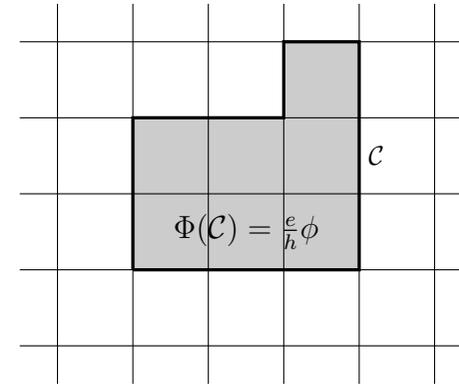


FIGURE VI.2. Pour tout contour C sur le réseau carré, le choix des phases $\gamma(\mathbf{j} \rightarrow \mathbf{j}')$ doit conduire à la valeur correcte de la phase de Aharonov–Bohm $\Phi(C) = (e/h)\phi$, où ϕ est le flux du champ magnétique à travers le contour.

La présence du champ magnétique est prise en compte dans cette approximation à une bande en attribuant une valeur complexe aux éléments de matrice tunnel entre sites adjacents (phase de Peierls) :

$$J \quad \text{remplacé par} \quad J \exp[i\gamma(\mathbf{j} \rightarrow \mathbf{j}')], \quad (\text{VI.14})$$

avec pour préserver le caractère hermitien de l'hamiltonien

$$J e^{i\gamma(\mathbf{j}' \rightarrow \mathbf{j})} = \left(J e^{i\gamma(\mathbf{j} \rightarrow \mathbf{j}')} \right)^* \Rightarrow \gamma(\mathbf{j}' \rightarrow \mathbf{j}) = -\gamma(\mathbf{j} \rightarrow \mathbf{j}'). \quad (\text{VI.15})$$

Les phases individuelles $\gamma(\mathbf{j} \rightarrow \mathbf{j}')$ sont choisies de manière à ce que la phase de Aharonov–Bohm $\Phi(C)$ accumulée le long d'un contour fermé :

$$\Phi(C) \equiv \sum_{\text{contour}} \gamma(\mathbf{j} \rightarrow \mathbf{j}') \quad (\text{VI.16})$$

vérifie

$$\Phi(C) = \frac{e}{h} \phi \quad \text{mod } (2\pi), \quad (\text{VI.17})$$

où ϕ est le flux de B à travers le contour considéré (figure VI.2). Il y a bien sûr un nombre infini de choix possibles pour les $\gamma(\mathbf{j} \rightarrow \mathbf{j}')$: c'est le principe de l'invariance de jauge.

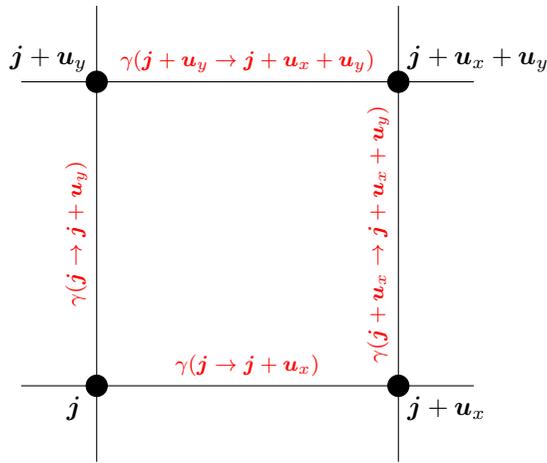


FIGURE VI.3. Facteurs de phase sur les bords d'une cellule unité donnée. La somme algébrique des coefficients γ doit vérifier la contrainte (VI.18).

En utilisant l'additivité déduite de (VI.15), on se convaincra aisément qu'une condition nécessaire et suffisante pour que la relation (VI.17) soit vérifiée pour tout contour \mathcal{C} est de la satisfaire pour chaque cellule carrée élémentaire. En suivant les bords d'une cellule unité carrée de surface a^2 dans le sens direct (figure VI.3), on doit donc avoir :

$$\begin{aligned} \Phi_{\text{cellule}} &= \gamma(\mathbf{j} \rightarrow \mathbf{j} + \mathbf{u}_x) + \gamma(\mathbf{j} + \mathbf{u}_x \rightarrow \mathbf{j} + \mathbf{u}_x + \mathbf{u}_y) & (VI.18) \\ &- \gamma(\mathbf{j} + \mathbf{u}_y \rightarrow \mathbf{j} + \mathbf{u}_x + \mathbf{u}_y) - \gamma(\mathbf{j} \rightarrow \mathbf{j} + \mathbf{u}_y) = \frac{qa^2B}{\hbar} \pmod{2\pi} \end{aligned}$$

Substitution de Peierls. Un moyen simple pour trouver un ensemble de coefficients $\gamma(\mathbf{j} \rightarrow \mathbf{j}')$ satisfaisant (VI.18) consiste à se donner un potentiel vecteur $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ pour le problème continu (c'est-à-dire faire un choix de jauge) et à poser que

$$\gamma(\mathbf{j} \rightarrow \mathbf{j}') = \frac{e}{\hbar} \int_{\mathbf{a}\mathbf{j}}^{\mathbf{a}\mathbf{j}'} \mathbf{A}(\mathbf{r}) \cdot d\mathbf{r}. \quad (VI.19)$$

Cette prescription fournit un ensemble convenable pour les coefficients γ puisque l'intégrale de contour $\oint_{\mathcal{C}} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{r}$ est par définition égale au flux du champ magnétique à travers ce contour \mathcal{C} .

Valeurs du champ magnétique. Dans ce problème discrétisé, le champ magnétique se caractérise donc entièrement par la phase Φ_{cellule} qu'il crée à travers une cellule unité, c'est-à-dire par le nombre α défini par

$$\alpha = \frac{\Phi_{\text{cellule}}}{2\pi}. \quad (VI.20)$$

Ceci vient imposer une valeur maximale pertinente : si le champ est tel que $\Phi_{\text{cellule}} = 2\pi$, il n'aura aucun effet puisqu'on peut le décrire par des coefficients tunnel tous réels positifs, comme pour le champ $B = 0$.

1-3 Nouvelle périodicité dans le cas rationnel

Le fait d'attribuer une phase $\gamma(\mathbf{j} \rightarrow \mathbf{j}')$ aux coefficients tunnel fait perdre la périodicité initiale du problème et vient compliquer considérablement la recherche du spectre de l'hamiltonien. Toutefois, on peut retrouver un problème périodique – mais de plus grande période spatiale – quand α est un nombre rationnel :

$$\alpha = \frac{p'}{p}. \quad (VI.21)$$

Considérons en effet le choix suivant, déduit de la jauge de Landau $\mathbf{A}(\mathbf{r}) = -By \mathbf{u}_x$:

— Les coefficients tunnel le long de la direction y restent tous réels et égaux à J , soit :

$$\gamma(\mathbf{j} \rightarrow \mathbf{j} \pm \mathbf{u}_y) = 1. \quad (VI.22)$$

— Les coefficients tunnel le long de la direction x ont pour valeur $J \exp[i \gamma(\mathbf{j} \rightarrow \mathbf{j}')]$ avec

$$\gamma(\mathbf{j} \rightarrow \mathbf{j} + \mathbf{u}_x) = -2\pi \frac{p'j_y}{p}. \quad (VI.23)$$

Avec ce choix, on constate que l'hamiltonien est périodique de période a selon x et de période pa selon y . Ces coefficients tunnel sont indiqués sur la figure VI.4 pour le cas particulier $\alpha = 1/4$, soit $p' = 1, p = 4$, correspondant à une phase Aharonov-Bohm de $\pi/2$ par plaquette.

Le fait de retrouver un problème périodique va nous permettre d'utiliser à nouveau le théorème de Bloch pour rechercher les états propres et

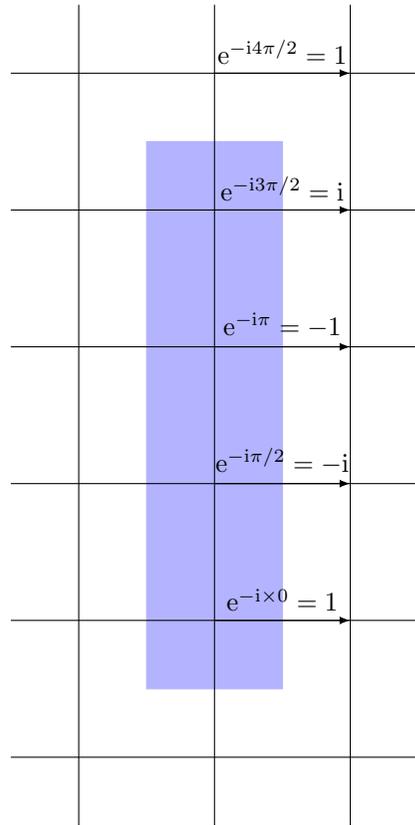


FIGURE VI.4. Jauge de Landau pour le problème de Harper–Hofstadter avec un flux $1/4$, c'est-à-dire une phase de Aharonov–Bohm $\Phi_{\text{cellule}} = \pi/2$ par cellule du réseau carré initial (phase mesurée dans le sens trigonométrique). La zone grisée d'aire $4a^2$ représente une cellule magnétique unité possible pour ce choix de jauge.

les énergies associées. Toutefois, nous notons que la nouvelle cellule unité, appelée *cellule magnétique unité*, a maintenant une taille $a \times pa$. Il y a donc p sites par cellule magnétique unité, ce qui va donner naissance à p bandes d'énergie à partie de la bande initiale de largeur $8J$ trouvée en l'absence de champ magnétique. Ce point est à contraster avec le modèle de Haldane, pour lequel l'introduction de phases complexes sur les coefficients tunnel ne changeait pas la taille de la cellule unité initiale.

Ce choix de cellule magnétique unité n'est bien sûr pas le seul possible. Dans le cas $\Phi_{\text{cellule}} = \pi/2$, une autre possibilité est indiquée sur la figure VI.5 et conduit à une cellule unité magnétique carrée $2a \times 2a$ (son aire totale de $4a^2$ n'est pas modifiée par rapport à la figure VI.4); cette seconde possibilité est en fait plus pertinente pour l'expérience de AIDELSBURGER, LOHSE et al. (2015) que nous décrivons un peu plus loin, car les coefficients complexes choisis ici se connectent plus naturellement à ceux obtenus quand on branche ou éteint les faisceaux lumineux formant le réseau optique.

1-4 Spectre de l'hamiltonien

Nous supposons dans ce qui suit que le paramètre α est un nombre rationnel qui s'écrit $\alpha = p'/p$. La forme du spectre de l'hamiltonien ne dépend bien sûr pas du choix de jauge. Plaçons-nous dans la jauge de Landau, avec la position d'une cellule unité repérée par :

$$\mathbf{r}_j = a(j_x \mathbf{u}_x + pj_y \mathbf{u}_y). \quad (\text{VI.24})$$

Pour un moment de Bloch \mathbf{q} donné, une fonction périodique sur le réseau est caractérisée par ses p amplitudes $\alpha_{\mathbf{q},\nu}$, $\nu = 1, \dots, p$ sur les p sites $A_{j,\nu}$ composant la cellule magnétique j :

$$|u_{\mathbf{q}}\rangle = \sum_{\nu=1}^p \alpha_{\mathbf{q},\nu} \left(\sum_j |A_{j,\nu}\rangle \right). \quad (\text{VI.25})$$

Les états de Bloch s'écrivent quant à eux

$$|\psi_{\mathbf{q}}\rangle = \sum_j e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_j} \left(\sum_{\nu=1}^p \alpha_{\mathbf{q},\nu} |A_{\mathbf{r}_j,\nu}\rangle \right). \quad (\text{VI.26})$$

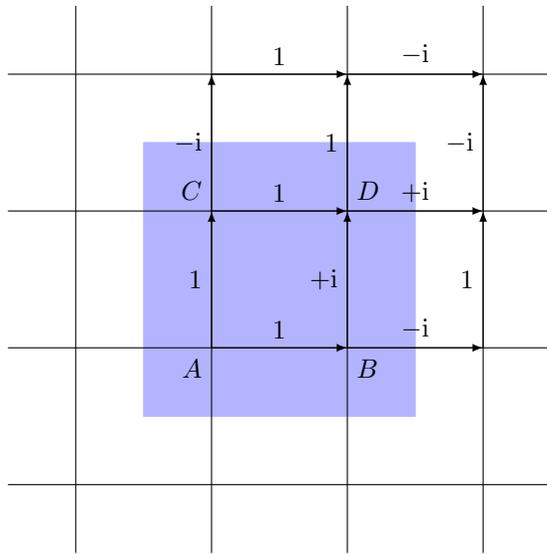


FIGURE VI.5. Autre choix de jauge possible pour le problème de Harper-Hofstadter avec un flux $1/4$, c'est-à-dire une phase de Aharonov-Bohm $\Phi_{\text{cellule}} = \pi/2$ par cellule du réseau carré initial (phase mesurée dans le sens trigonométrique). La zone grisée d'aire $4a^2$ représente une cellule magnétique unité possible pour ce choix de jauge.

En reportant cette expression dans l'équation aux valeurs propres pour l'hamiltonien pour l'énergie E_q , on obtient une équation matricielle pour le vecteur colonne à p composantes

$$V_q = \begin{pmatrix} \alpha_{q,1} \\ \alpha_{q,2} \\ \vdots \\ \alpha_{q,p} \end{pmatrix} \quad (\text{VI.27})$$

qui s'écrit sous la forme

$$\hat{H}_q V_q = E_q V_q. \quad (\text{VI.28})$$

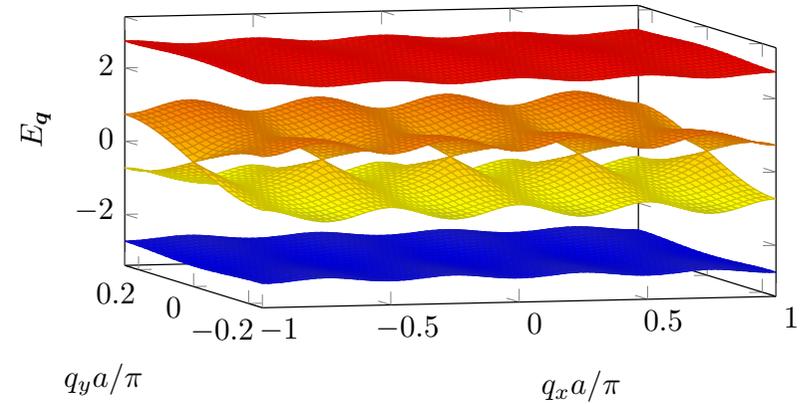


FIGURE VI.6. Bandes d'énergie pour le modèle de Harper-Hofstadter pour le flux $\alpha = 1/4$, avec la cellule magnétique unité de la figure VI.4, correspondant à la jauge de Landau.

La matrice carrée \hat{H}_q a pour taille $p \times p$ et elle s'écrit par exemple pour $\alpha = 1/4$:

$$\hat{H}_q = -J \begin{pmatrix} 2 \cos(aq_x) & 1 & 0 & e^{4iaq_y} \\ 1 & 2 \cos(aq_x + \pi/2) & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 2 \cos(aq_x + \pi) & 1 \\ e^{-4iaq_y} & 0 & 1 & 2 \cos(aq_x + 3\pi/2) \end{pmatrix}. \quad (\text{VI.29})$$

Les 4 bandes d'énergie correspondantes,

$$E_q = \pm J \left\{ 4 \pm 2 [2 + \cos^2(2aq_x) + \cos^2(2aq_y)]^{1/2} \right\}, \quad (\text{VI.30})$$

tracées sur la figure VI.6, sont disposées symétriquement par rapport à $E = 0$. Les deux bandes extrêmes sont séparées des autres par un gap alors que les deux bandes intermédiaires se touchent en 4 points de Dirac à l'intérieur de la zone de Brillouin $[-\pi/a, +\pi/a] \times [-\pi/(4a), +\pi/(4a)]$.

On peut également mener cette recherche des énergies avec le choix de cellule magnétique unité carrée, indiquée sur la figure VI.5. En repérant les 4 sites qui la composent par les lettres A, B, C, D comme indiqué sur la

figure VI.5, on peut écrire une fonction de Bloch sous la forme

$$|\psi_{\mathbf{q}}\rangle = \sum_j e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_j} (a_{\mathbf{q}}|A_j\rangle + b_{\mathbf{q}}|B_j\rangle + c_{\mathbf{q}}|C_j\rangle + d_{\mathbf{q}}|D_j\rangle) \quad (\text{VI.31})$$

où \mathbf{j} désigne désormais la position de la cellule magnétique unité de taille $2a \times 2a$

$$\mathbf{r}_j = 2a (j_x \mathbf{u}_x + j_y \mathbf{u}_y). \quad (\text{VI.32})$$

L'équation aux valeurs propres pour l'hamiltonien s'écrit

$$\hat{H}_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{q}} = E_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{q}} \quad (\text{VI.33})$$

avec

$$\hat{H}_{\mathbf{q}} = -J \begin{pmatrix} 0 & 1 - ie^{-iQ_x} & 1 - ie^{-iQ_y} & 0 \\ 1 + ie^{iQ_x} & 0 & 0 & -i + e^{-iQ_y} \\ 1 + ie^{iQ_y} & 0 & 0 & 1 + ie^{-iQ_x} \\ 0 & i + e^{iQ_y} & 1 - ie^{iQ_x} & 0 \end{pmatrix}, \quad V_{\mathbf{q}} = \begin{pmatrix} a_{\mathbf{q}} \\ b_{\mathbf{q}} \\ c_{\mathbf{q}} \\ d_{\mathbf{q}} \end{pmatrix} \quad (\text{VI.34})$$

où l'on a posé $Q_x = 2aq_x$ et $Q_y = 2aq_y$ pour alléger l'écriture. Les 4 valeurs propres de $\hat{H}_{\mathbf{q}}$ pour ce choix de cellule magnétique unité s'écrivent

$$E_{\mathbf{q}} = \pm J \left\{ 4 \pm 2 \left[4 - \cos^2(2q_x a) - \cos^2(2q_y a) \right]^{1/2} \right\}^{1/2}, \quad (\text{VI.35})$$

et sont tracées sur la figure quand \mathbf{q} varie dans la zone de Brillouin carrée $-\frac{\pi}{2a} < q_x, q_y \leq \frac{\pi}{2a}$. On retrouve bien sûr, avec une disposition différente, les mêmes éléments qu'en figure VI.6.

Rappelons finalement la forme du spectre de l'hamiltonien obtenu quand on fait varier le paramètre α entre 0 et 1, en nous limitant aux valeurs rationnelles pour conserver un problème périodique. Ce spectre, de nature fractale et appelé papillon de Hofstadter (HOFSTADTER 1976), est représenté sur la figure VI.8. Le calcul numérique a été fait pour tous les rationnels p'/p avec les entiers p, p' allant de 1 à 100. La discussion détaillée de ce spectre a été faite dans le cours 2013-14.

1-5 Topologie des bandes d'énergie

Une fois déterminés les énergies et les états propres de l'hamiltonien périodique $\hat{H}_{\mathbf{q}}$, on peut calculer la courbure de Berry $\Omega_{\mathbf{q}}^{(j)}$ et le nombre

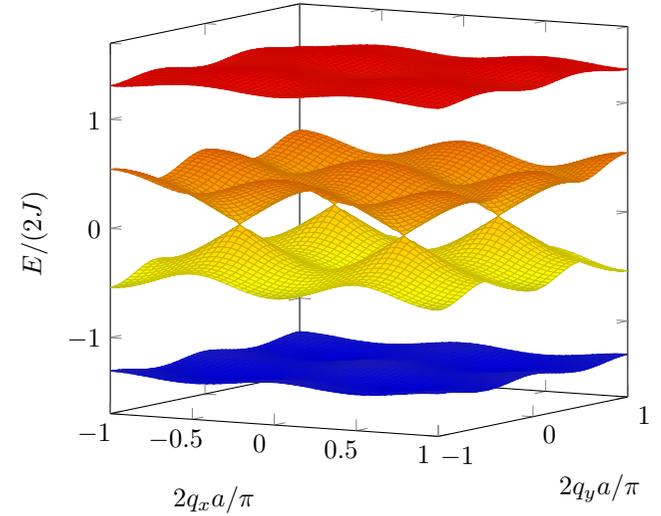


FIGURE VI.7. Bandes d'énergie pour le modèle de Harper–Hofstadter pour le flux $\alpha = 1/4$, avec la cellule magnétique unité carrée de la figure VI.5.

de Chern $\mathcal{C}^{(j)}$ pour chaque bande d'énergie. Le calcul de $\mathcal{C}^{(j)}$ a été fait par THOULESS, KOHMOTO et al. (1982); il passe par la résolution d'une équation diophantienne, c'est-à-dire une équation algébrique à coefficients entiers. Nous ne discuterons pas le cas général, assez technique, et nous allons nous concentrer sur le cas $\alpha = 1/p$. On trouve alors le résultat simple suivant :

- Si p est impair, toutes les bandes ont pour nombre de Chern $\mathcal{C} = 1$, sauf la bande centrale pour laquelle on trouve $\mathcal{C} = -p + 1$. La somme de tous les nombres de Chern est nulle comme attendu (cf. chap. 5).
- Si p est pair, les deux bandes centrales se touchent en des points de Dirac, comme on l'a vu dans le cas $\alpha = 1/4$. Le nombre de Chern pour cette paire de bandes est $\mathcal{C} = -p + 2$ et toutes les autres bandes ont pour nombre de Chern $\mathcal{C} = 1$. Là aussi, la somme de tous les nombres de Chern est nulle.

Nous avons déjà indiqué au chapitre 5 que la courbure de Berry $\Omega_{\mathbf{q}}$ dépend de la manière dont on encode la position de chaque site à l'intérieur d'une cellule unité. Pour les expériences dans lesquelles on agit sur

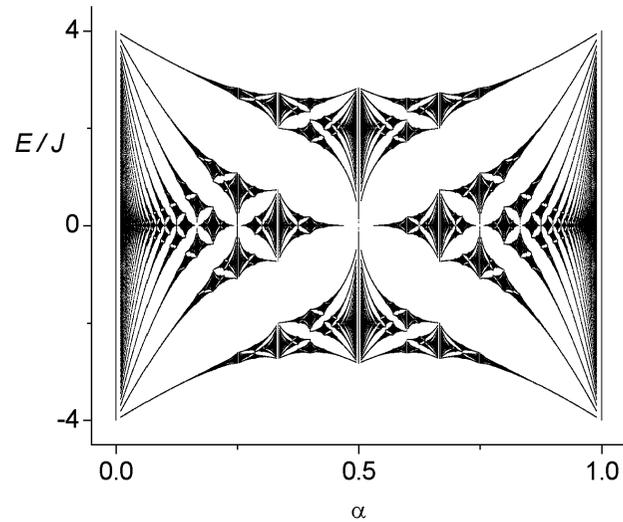


FIGURE VI.8. Le "papillon" de Hofstadter : spectre de l'hamiltonien de Harper-Hofstadter calculé pour des flux par cellule unitaire initiale $\Phi_{\text{cellule}} = 2\pi\alpha$ avec $\alpha = p'/p$ rationnel entre 0 et 1, et p, p' entiers inférieures à 100.

les atomes avec une force extérieure, il est judicieux d'encoder explicitement cette position $\mathbf{R}_\nu, \nu = 1, \dots, p$ dans la définition de $|u_q\rangle$ et $|\psi_q\rangle$. Cela revient à écrire la fonction périodique (VI.25) plutôt sous la forme :

$$|u_q\rangle = \sum_{\nu=1}^p \tilde{\alpha}_{q,\nu} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}_\nu} \left(\sum_j |A_{j,\nu}\rangle \right). \quad (\text{VI.36})$$

et utiliser l'hamiltonien périodique \hat{H}_q défini à partir des coefficients $\tilde{\alpha}_{q,\nu}$.

La courbure de Berry pour la bande fondamentale et pour cet encodage de la position est tracée en figure VI.9 pour $\alpha = 1/4$ (calcul fait en jauge de Landau). On vérifie numériquement que son intégrale sur la zone de Brillouin est bien égale à 2π , ce qui correspond à $\mathcal{C} = 1$. Un tracé similaire serait obtenu à partir de la zone magnétique unité carrée de la figure VI.5.

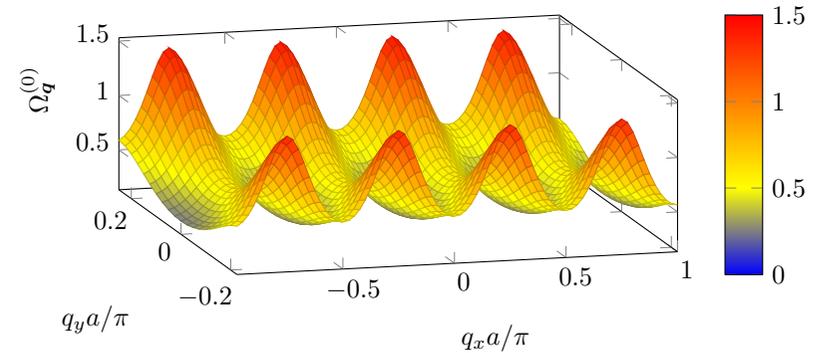


FIGURE VI.9. Courbure de Berry pour la bande fondamentale du modèle de Harper-Hofstadter pour le flux 1/4. Ce résultat a été obtenu avec un encodage de la position de chaque site à l'intérieur de la cellule unitaire magnétique.

Quand on diminue la valeur de $\alpha = 1/p$, on constate que la courbure de Berry de la bande fondamentale devient de plus en plus homogène sur l'ensemble de la zone de Brillouin. Ainsi, pour $\alpha = 1/8$, la variation relative de Ω_q est inférieure à 5%. Notons que ce résultat n'est valable que si l'on a encodé la position comme en (VI.36). Pour le choix (VI.25), la courbure de Berry reste fortement modulée même pour de très faibles valeurs de α .

2 Le modèle de HH avec des atomes

2-1 Premières propositions, premières expériences

Une idée simple pour imprimer la phase $\gamma(j \rightarrow j')$ quand un atome saute du site j au site j' est d'induire ce saut avec de la lumière : le saut se fait si et seulement si l'atome effectue un processus Raman stimulé entre deux états correspondant à des sites voisins. Dans un tel processus, appelé *effet tunnel assisté par laser*, l'atome absorbe un photon de vecteur d'onde \mathbf{k}_1 , puis effectue une émission stimulée d'un photon de vecteur d'onde \mathbf{k}_2 . La phase relative des deux faisceaux lumineux s'imprime alors sur la fonction

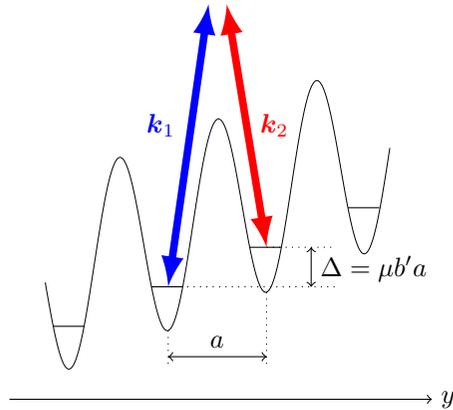


FIGURE VI.10. Principe de l'effet tunnel assisté par laser pour des atomes de moment magnétique μ . Un gradient de champ magnétique b' lève la dégénérescence entre sites adjacents distants de a et bloque l'effet tunnel direct. Une paire de faisceaux lumineux avec la différence de fréquence $\omega_1 - \omega_2 = \mu b' a / \hbar$ rétablit un couplage résonnant entre sites, avec la phase relative $e^{i(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) \cdot \mathbf{r}_j}$ "imprimée" lors de la transition.

d'onde atomique via le coefficient tunnel J qui devient complexe.

Cette proposition a été faite initialement par JAKSCH & ZOLLER (2003). On part d'un réseau carré standard dans lequel on inhibe l'effet tunnel ordinaire le long d'une direction, y par exemple, en appliquant un gradient de champ magnétique b' de sorte que deux sites adjacents \mathbf{j} et $\mathbf{j} + \mathbf{u}_y$ ont une différence d'énergie $\Delta = \mu b' a$ bien supérieure au couplage tunnel J (on suppose ici que les atomes sont préparés dans un sous-niveau Zeeman de moment magnétique μ non nul). On envoie ensuite une paire de faisceaux laser de vecteurs d'onde \mathbf{k}_i et de fréquence ω_i , $i = 1, 2$, avec le choix de fréquence $\omega_1 - \omega_2 = \Delta$ qui permet d'induire une transition résonante entre les sites adjacents (figure VI.10). La phase du coefficient tunnel associé à cette transition est directement liée à la phase relative des faisceaux laser en ce point, c'est-à-dire $e^{i(\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_2) \cdot \mathbf{r}_j}$.

Cette méthode a été mise en œuvre par AIDELSBURGER, ATALA et al. (2013) à Munich et MIYAKE, SIVILOGLOU et al. (2013) au MIT, respectivement pour $\alpha = 1/4$ et $\alpha = 1/2$. Ces premières expériences ont essentielle-

ment consisté à mesurer la structure de bande et à observer le mouvement cyclotron; elles ont été décrites dans le cours 2013-14 et nous ne les reprendrons donc pas ici de manière détaillée. Puisque l'on applique sur les atomes un potentiel dépendant périodiquement du temps, son traitement théorique quantitatif utilise le formalisme de Floquet. Il est voisin de ce que nous avons fait au chapitre précédent pour le modèle de Haldane, à ceci près que l'on s'intéresse ici à une perturbation résonnante alors qu'on utilisait auparavant une perturbation de haute fréquence.

Le résultat s'énonce simplement dans le cadre d'un modèle à deux sites $|a\rangle$ et $|b\rangle$, en prenant une perturbation périodique consistant à moduler l'énergie d'un des deux sites. Partant de l'hamiltonien

$$\hat{H}(t) = -J(|a\rangle\langle b| + |b\rangle\langle a|) + \Delta \hat{P}_b + \kappa \cos(\omega t + \phi) \hat{P}_a, \quad (\text{VI.37})$$

où \hat{P}_a et \hat{P}_b sont les projecteurs sur les états a et b , on peut montrer que dans le cas résonant $\Delta = \hbar\omega \gg J$, la dynamique à long terme est régie par l'hamiltonien effectif (ECKARDT & HOLTHAUS 2007)

$$\hat{H}_{\text{eff}} = -J \mathcal{J}_1(\kappa/\hbar\omega) (e^{i\phi} |a\rangle\langle b| + e^{-i\phi} |b\rangle\langle a|) \quad (\text{VI.38})$$

où \mathcal{J}_1 est la fonction de Bessel de première espèce. L'effet tunnel entre les deux sites a et b est donc bien restauré, avec un facteur de phase de Peierls qui dépend de la phase de la modulation. Notons que dans ce modèle à deux sites, la phase ϕ peut être éliminée² de (VI.38) par un changement de jauge qui consiste à rédéfinir l'état a : $|\tilde{a}\rangle = e^{i\phi} |a\rangle$. Ce n'est heureusement pas le cas pour un réseau à deux dimensions, lorsque la phase ϕ dépend de la position; ce cas est analysé de manière détaillée dans GOLDMAN, DALIBARD et al. (2015).

2-2 Super-réseau et projection de bandes

L'utilisation d'un gradient de champ magnétique pour lever la dégénérescence entre sites voisins pose des problèmes pratiques liés aux fluctuations du champ magnétique ambiant. Ces fluctuations viennent brouiller la phase de Peierls que l'on cherche à imposer par l'effet tunnel assisté par

2. En d'autres termes, la physique ne peut pas dépendre du choix de l'origine du temps dans (VI.37).

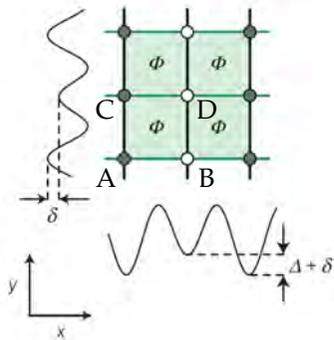


FIGURE VI.11. Un potentiel de super-réseau à deux dimensions permet de lever la dégénérescence entre 4 sites d'un réseau carré, avec les énergies $E_A = 0$, $E_B = \Delta + \delta$, $E_C = \delta$, $E_D = \Delta + 2\delta$, où le repérage des états A, B, C, D est le même qu'en figure VI.5. Une modulation dans le temps à la pulsation Δ/\hbar permet ensuite (à l'approximation du champ tournant) d'arriver aux énergies (VI.40).

laser, et elles ont empêché les groupes de Munich et du MIT de mettre en évidence les propriétés topologiques de leur réseau.

Pour contourner cette difficulté, le groupe de Munich a adopté une stratégie légèrement différente qui consiste à éliminer tout champ magnétique (AIDELSBURGER, LOHSE et al. 2015). La levée de dégénérescence entre sites adjacents se fait maintenant par un super-réseau, une méthode que nous avons déjà rencontrée dans les problèmes 1D et qui avait été proposée dans ce contexte par GERBIER & DALIBARD (2010). Plus précisément, on dispose des ingrédients suivants (figure VI.11) :

- Un réseau carré dans lequel tous les sites sont équivalents avec un coefficient tunnel J entre proches voisins.
- Un super-réseau le long de l'axe x de sorte que les sites B, D représentés sur la figure VI.5 ont un surplus d'énergie Δ par rapport aux sites A, C :

$$E_A = E_C = 0, \quad E_B = E_D = \Delta. \quad (\text{VI.39})$$

En première approximation, l'effet tunnel "nu" est inchangé le long de y mais il est bloqué le long de x du fait de l'écart en énergie Δ entre

sites voisins. La modulation va donc se faire à la pulsation Δ/\hbar pour restaurer l'effet tunnel le long de x tout en induisant une phase de Peierls différente sur les liens $A - B$ et $C - D$.

- Un deuxième super-réseau le long des deux axes x et y vient donner un surplus d'énergie δ aux sites B et C , et 2δ au site D .

Une fois pris en compte le potentiel additionnel modulé dans le temps à la fréquence Δ/\hbar , on obtient un hamiltonien effectif avec les énergies sur site :

$$E_A = -\delta, \quad E_B = E_C = 0, \quad E_D = +\delta \quad (\text{VI.40})$$

qui viennent s'ajouter à l'hamiltonien de Harper étudié en première partie.

L'intérêt du super-réseau d'énergie δ est de produire une cellule unité à quatre sites comme celle de l'hamiltonien de Harper, mais avec un paramètre de contrôle supplémentaire. Pour δ grand, la bande la plus basse correspond simplement à placer les atomes sur les sites A . Une étude plus poussée montre que l'hamiltonien périodique correspondant

$$\hat{H}_q(\delta) = -J \begin{pmatrix} \delta/J & 1 - ie^{-iQ_x} & 1 - ie^{-iQ_y} & 0 \\ 1 + ie^{iQ_x} & 0 & 0 & -i + e^{-iQ_y} \\ 1 + ie^{iQ_y} & 0 & 0 & 1 + ie^{-iQ_x} \\ 0 & i + e^{iQ_y} & 1 - ie^{iQ_x} & -\delta/J \end{pmatrix} \quad (\text{VI.41})$$

conduit à des bandes topologiquement non triviales si et seulement si

$$|\delta| < 2J. \quad (\text{VI.42})$$

On peut alors adopter la procédure expérimentale suivante :

1. On branche les réseaux et super-réseaux à δ et Δ , de façon à placer tous les atomes dans les sites de basse énergie (A).
2. On branche lentement (30 ms) la modulation à la pulsation $\omega = \Delta/\hbar$, tout en gardant δ grand ; à ce stade, la dynamique des atomes est encore figée.
3. On diminue adiabatiquement δ jusqu'à la valeur 0 pour atteindre l'hamiltonien de Harper pour un flux $\alpha = 1/4$. Cette diminution implique un passage par le point singulier $\delta = 2J$ où la topologie de la bande fondamentale devient non triviale. Toutefois, les populations des 4 bandes restent à peu près constantes dans cette opération qui dure également 30 ms.

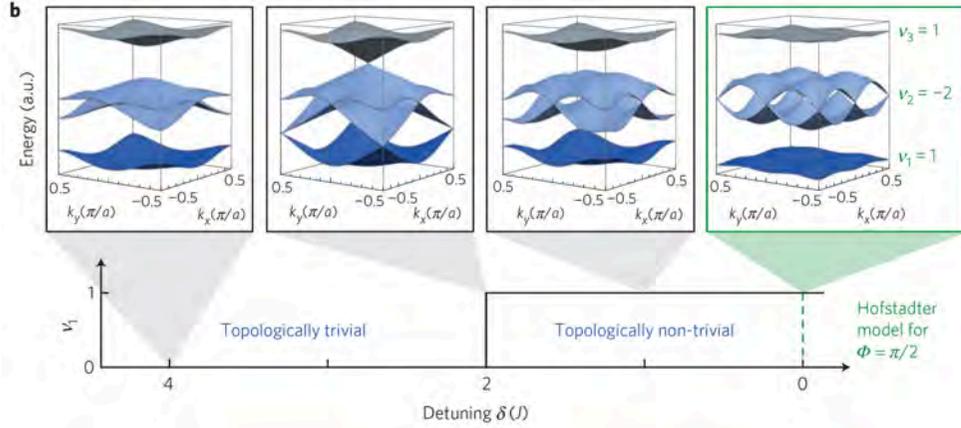


FIGURE VI.12. Procédure de chargement de la bande fondamentale du réseau de Harper–Hofstadter pour le flux $\alpha = 1/4$ utilisée par AIDELSBURGER, LOHSE et al. (2015). On part de la situation où la différence d'énergie δ est grande devant le couplage tunnel, ce qui permet de positionner les atomes sur la bande fondamentale composée essentiellement des sites A , cette bande étant non topologique. On diminue ensuite lentement la valeur de δ pour rentrer dans un régime de bande topologique pour $\delta = 2J$, puis arriver au cas de l'hamiltonien de Harper–Hofstadter avec $\delta = 0$ et un flux $\Phi_{\text{cellule}} = \pi/2$ (soit $\alpha = 1/4$).

4. On procède à l'expérience désirée.
5. Pour analyser le résultat produit, on suit le chemin inverse. On analyse la population finale des différentes bandes par la méthode de *projection de bande* usuelle, c'est-à-dire une extinction adiabatique du réseau optique suivie d'un temps de vol. Chaque bande est alors associée à un site A, B, C, D et à une zone d'impulsion bien déterminée, ce qui permet de déterminer la population de chacune de ces bandes.

2-3 La mesure du nombre de Chern

Le point central de l'expérience de AIDELSBURGER, LOHSE et al. (2015) a été la mesure du nombre de Chern associé à la bande fondamentale. Bien que cette expérience ait été menée avec des bosons, le principe de la me-

sure est directement inspiré du résultat que nous avons rencontré au chapitre précédent pour des fermions sans interaction. Dans ce cas, si la bande en question est uniformément remplie, on sait que l'on a un courant I_y quantifié selon y quand une force uniforme F_x est appliquée selon x :

$$I_y \equiv \left. \frac{dN}{dt} \right|_{\text{selon } y} = \frac{C}{2\pi} \frac{L_x F_x}{\hbar}. \quad (\text{VI.43})$$

On sait qu'il y a dans ce cas une densité surfacique $\rho^{(2D)} = 1/\ell^2$ où ℓ est la taille de la cellule unité ($\ell = 2a$ pour le réseau HH pour un flux $\alpha = 1/4$). Cela signifie que la vitesse moyenne des particules v_y le long de l'axe y définie par

$$\rho^{(2D)} v_y = \frac{1}{L_x} \left. \frac{dN}{dt} \right|_{\text{selon } y} \quad (\text{VI.44})$$

est égale à

$$v_y = C \frac{F_x \ell^2}{2\pi \hbar}. \quad (\text{VI.45})$$

Ce dernier résultat portant sur la vitesse des particules ne dépend en fait pas de l'hypothèse d'une bande complètement remplie. Si l'on examine la démonstration de la quantification de la conductance (VI.43), on constate que le point important est le remplissage uniforme de la zone de Brillouin, c'est-à-dire une population identique pour tous les états de Bloch. C'est à cette condition que l'intégrale de la courbure de Berry sur le quasi-moment fait apparaître le nombre de Chern. En revanche, la valeur exacte de cette population n'a pas d'importance pour établir (VI.45).

On peut donc transposer tel quel le résultat (VI.45) à des bosons, pourvu que la bande considérée, en l'occurrence la bande fondamentale, soit uniformément remplie et que les autres bandes soient vides. Une telle situation pourra être obtenue si la largeur de la bande fondamentale ΔE_0 est petite devant le gap entre la bande fondamentale et la première bande excitée $\bar{E}_1 - \bar{E}_0$. Il suffit alors de choisir la température T telle que

$$\Delta E_0 \ll k_B T \ll \bar{E}_1 - \bar{E}_0 \quad (\text{VI.46})$$

pour que cette hypothèse soit vérifiée. En pratique, pour le réseau HH avec $\alpha = 1/4$, on trouve $(\bar{E}_1 - \bar{E}_0)/\Delta E_0 \sim 7$, ce qui permet de valider en première approximation la condition (VI.46).

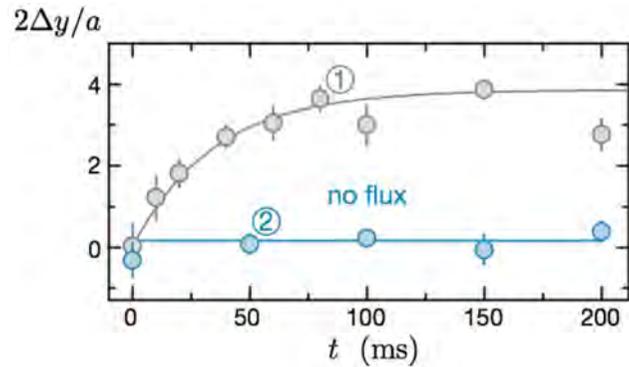


FIGURE VI.13. Transport dans un réseau carré avec un flux $\Phi_{\text{cellule}} = \pi/2$ (données 1) mesuré par AIDELSBURGER, LOHSE et al. (2015). Un courant de Hall est observé par l'intermédiaire du déplacement du centre de masse du nuage le long de la direction y quand une force uniforme induisant des oscillations de Bloch est appliquée le long de l'axe x pendant une durée ajustable. Aux temps courts, seule la bande fondamentale est appréciablement peuplée, ce qui conduit à un déplacement $\Delta y(t)$ linéaire en temps. La pente correspondante est en bon accord avec le nombre de Chern $C = 1$ attendu pour cette bande. Aux temps plus longs, des processus de chauffage égalisent les populations des différentes bandes et le courant s'interrompt. Les données 2 ont été obtenues pour une flux nul. Cette figure a été préparée avec l'aide de Monika Aidelsburger.

Dans l'expérience de AIDELSBURGER, LOHSE et al. (2015) la force F_x est une force dipolaire, créée par le gradient d'intensité d'un faisceau auxiliaire. Cette force est appliquée pendant une durée variable t et on mesure le déplacement du centre de masse du nuage d'atomes en fonction du temps. Aux temps courts, typiquement inférieurs à 50 ms, le déplacement selon y , similaire à un courant de Hall, est bien proportionnel à t (figure VI.13). La valeur trouvée pour la vitesse v_y est en accord avec la valeur attendue à partir de (VI.45) pour le nombre de Chern $C = 1$ de la bande inférieure. Plus précisément, en prenant en compte les populations mesurées des quatre bandes, on trouve $C = 0.9$ (2). Aux temps plus longs, le chauffage provenant de la modulation résonante induit des transitions entre les différentes bandes, qui finissent par être également peuplées. Le mouvement de dérive le long de l'axe y s'arrête alors, puisque la somme

des quatre nombres de Chern est nulle. Une analyse précise de cette dynamique aux temps longs, couplée à une mesure indépendante des populations de chaque bande, conduit à $C_{\text{exp}} = 0.99$ (5).

2-4 Le problème du chauffage

Le fait que l'hamiltonien ait une dépendance explicite en temps introduit une difficulté supplémentaire dès qu'on s'intéresse à une assemblée de particules en interaction. En effet, il n'y a *a priori* pas conservation de l'énergie associée à l'hamiltonien effectif; l'énergie du micro-mouvement peut être convertie en chauffage lors de processus inélastiques intervenant lors de la collision entre deux particules. Pour un hamiltonien contenant des termes oscillant à la pulsation ω , ces processus inélastiques correspondent à l'absorption ou à l'émission de phonons d'énergie $\hbar\omega$. À long terme (sauf exceptions liées par exemple au phénomène de localisation à N corps), on s'attend à ce qu'un système en interaction avec un hamiltonien ainsi modulé atteigne une température infinie, c'est-à-dire une population égale pour tous les niveaux d'énergie (LAZARIDES, DAS et al. 2014).

Une description de ces processus inélastiques à deux corps dans le cadre du formalisme des ondes de Bloch a été proposée par BILITEWSKI & COOPER (2015b) et BILITEWSKI & COOPER (2015a). Cette analyse, basée sur la règle d'or de Fermi écrite dans le formalisme de Floquet, conduit à un accord très satisfaisant avec le chauffage mesuré expérimentalement par AIDELSBURGER, LOHSE et al. (2015). Elle montre en particulier le rôle important du degré de liberté selon la direction z perpendiculaire au plan du réseau. L'expérience de AIDELSBURGER, LOHSE et al. (2015) était faite dans une géométrie de tubes parallèles à l'axe z et cette direction n'était donc que faiblement confinée. Un chauffage important pouvait alors se produire lors de collisions, en transférant l'énergie du micro-mouvement à ce mouvement selon la direction z . BILITEWSKI & COOPER (2015a) ont montré qu'un confinement beaucoup plus fort selon l'axe z pouvait réduire fortement cette source de chauffage : si l'énergie nécessaire pour exciter un quantum de ce mouvement est beaucoup plus grande que l'énergie liée à la modulation $\hbar\omega$, la densité d'états qui intervient dans la règle d'or de Fermi est fortement réduite en passant de sa valeur 3D (grande) à sa valeur 2D pour le plan xy uniquement (nettement plus faible). Ce type d'analyse

a été généralisé au cas d'un superfluide décrit par l'équation de Gross-Pitaevskii par CHOUDHURY & MUELLER (2015) et LELLOUCH, BUKOV et al. (2017).

3 L'effet Hall en photonique

La première voie suivie en photonique pour simuler l'effet Hall quantique a consisté à utiliser des effets opto-magnétiques induit par un grand champ magnétique (0.2 T) sur un cristal photonique opérant dans le domaine des micro-ondes et composé de barres de ferrite (WANG, CHONG et al. 2009). Nous allons présenter ici des expériences plus récentes, menées sans champ magnétique et dans le domaine visible (ou infra-rouge proche). Notons que dans le domaine des longueurs d'onde visibles, la réponse magnéto-optique des matériaux est en général très faible et il a donc fallu avoir recours à d'autres méthodes pour induire un comportement de type "effet Hall" dans ces systèmes.

Nous allons nous intéresser successivement à des expériences "passives", dans lesquelles on sonde essentiellement la réponse optique linéaire du système, puis des expériences "actives", dans lesquelles la topologie est utilisée pour fabriquer de nouvelles sources laser robustes. Plusieurs de ces expériences utilisent un réseau de micro-résonateurs en anneau, et nous allons commencer par décrire ce système initialement proposé par HAFEZI, DEMLER et al. (2011), avant de présenter quelques résultats représentatifs.

Dans les implémentations photoniques que nous allons considérer ici, le site élémentaire du réseau est un micro-résonateur en anneau comme celui représenté sur la figure VI.14. Il s'agit de guides d'onde monomodes en silice, dans lesquels la lumière peut circuler dans le sens direct ou dans le sens indirect. La lumière est choisie résonante avec ces anneaux, avec un facteur de qualité supérieur à 10^4 . Elle est injectée dans un des anneaux composant le réseau grâce à un guide d'onde tangentiel, qui vient imposer le sens de circulation dans cet anneau, et par suite – comme nous allons le voir – dans tous les anneaux du réseau. Dans ce qui suit, nous allons d'abord nous intéresser au cas où la lumière tourne exclusivement dans le sens direct sur ces anneaux, et nous reviendrons sur cette hypothèse à la fin du paragraphe.

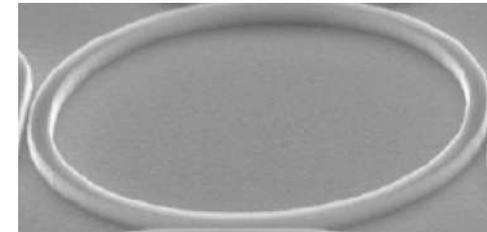


FIGURE VI.14. Micro-résonateur en anneau, utilisé comme "site" d'un réseau de Hubbard pour la lumière, formé d'un guide d'onde circulaire. Cette figure est extraite de BANDRES, WITTEK et al. (2018). Le rayon de l'anneau est de $5 \mu\text{m}$, la largeur et la hauteur du guide sont respectivement de $0.5 \mu\text{m}$ et $0.2 \mu\text{m}$.

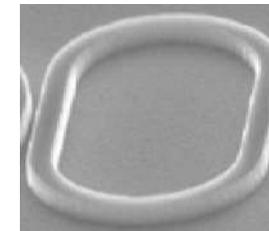


FIGURE VI.15. Lien connectant deux anneaux dans l'expérience de BANDRES, WITTEK et al. (2018). Ce lien est supposé non résonant avec la lumière.

3-1 Micro-résonateurs en anneau

L'équivalent du couplage tunnel entre sites dans le modèle de liaisons fortes est obtenu en insérant entre deux anneaux un lien en forme de rectangle aux bords arrondis (figure VI.15). Ce lien est conçu pour être non résonant avec la lumière (HAFEZI, DEMLER et al. 2011). Dans un point de vue dynamique, on peut considérer qu'un photon réside pendant une durée assez longue sur l'anneau A_1 en tournant dans le sens direct, puis saute vers l'anneau A_2 en passant par le lien L situé entre A_1 et A_2 (figure VI.16). Il va ensuite séjourner pendant une durée assez longue sur A_2 , toujours en tournant dans le sens direct. Le caractère non résonant du lien L entraîne que le passage sur L est quant à lui très bref. Pour la géométrie représentée sur la figure VI.16, ce passage de A_1 vers A_2 se fait via la partie supérieure

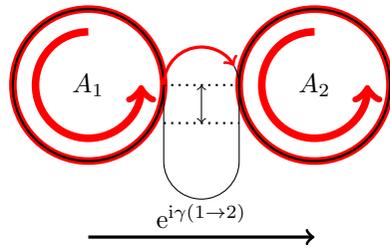


FIGURE VI.16. Passage de l'anneau A_1 vers l'anneau A_2 via le lien inséré entre les deux. Pour la lumière tournant sur les anneaux dans le sens direct, ce passage $A_1 \rightarrow A_2$ se fait sur le bord supérieur du lien.

du lien L . La phase accumulée $\gamma(1 \rightarrow 2)$ dépend donc de la longueur optique de cette partie supérieure.

Considérons maintenant le passage de l'anneau A_2 vers l'anneau A_1 , toujours pour de la lumière tournant dans le sens direct dans les anneaux (figure VI.17). On voit qu'un photon doit dans ce cas emprunter le chemin passant par le bas du lien rectangulaire. La longueur optique de ce chemin est différente du précédent si le lien rectangulaire n'est pas parfaitement centré sur le segment A_1A_2 . On dispose ainsi d'un moyen pour induire un couplage $1 \rightarrow 2$ qui n'a pas la même phase que le couplage $2 \rightarrow 1$. Si on choisit la référence de phase nulle pour un rectangle centré, on obtient $\gamma(2 \rightarrow 1) = -\gamma(1 \rightarrow 2)$: c'est l'ingrédient nécessaire pour construire l'hamiltonien de Harper.

3-2 Implémentation photonique passive

L'idée proposée par HAFEZI, DEMLER et al. (2011) a été mise en pratique par HAFEZI, MITTAL et al. (2013). L'expérience a été faite avec un réseau carré de 8×8 anneaux reliés entre eux par des liens (figure VI.18). La lumière est injectée sur un des anneaux situés en périphérie. On mesure avec un objectif de microscope la lumière diffusée par les 64 anneaux.

Une cellule unité de ce réseau est représentée sur la figure VI.19. Elle représente une implémentation directe de l'hamiltonien de Harper-Hofstadter en jauge de Landau. Les liens le long de la direction y sont cen-

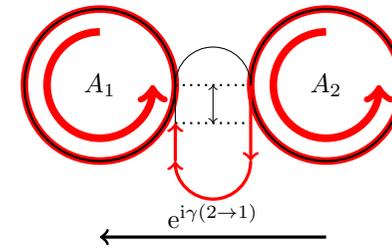


FIGURE VI.17. Passage de l'anneau A_2 vers l'anneau A_1 via le lien inséré entre les deux. Pour la lumière tournant sur les anneaux dans le sens direct, ce passage $A_2 \rightarrow A_1$ se fait sur le bord inférieur du lien. Le chemin optique est donc différent de celui de la figure VI.16, pour le passage $A_1 \rightarrow A_2$.

trés sur les anneaux, de sorte que la phase associée est nulle. En revanche, les liens le long de la direction x sont décalés d'une distance ajustable, de sorte que la phase accumulée quand on parcourt la cellule dans le sens $1 \rightarrow 2 \rightarrow 4 \rightarrow 3 \rightarrow 1$ est non nulle et constante sur tout le réseau, et bien sûr opposée à celle obtenue dans le sens $1 \rightarrow 3 \rightarrow 4 \rightarrow 2 \rightarrow 1$. L'expérience de HAFEZI, MITTAL et al. (2013) a été réalisée pour un flux par cellule unité de $2\pi\alpha$ avec $\alpha = 0.15$.

L'expérience a confirmé l'existence de canaux de bords qui se propagent sans interruption même en présence de défauts. En changeant la longueur d'onde de la lumière, on peut exciter un canal de vitesse de groupe positive ou négative, c'est-à-dire se propageant dans le sens direct ou dans le sens indirect, en bon accord avec les prévisions (figure VI.20).

Invariance par renversement du temps et effet Hall de spin. Dans l'expérience que nous venons de décrire, il n'y a aucun élément physique qui brise l'invariance par renversement du temps. Comment se fait-il que l'on puisse dans ces conditions obtenir un comportement de type effet Hall avec des états de bord chiraux ?

Le point crucial est que nous nous sommes restreints dans ce qui précède à un mouvement précis de la lumière sur un anneau donné, en supposant que ce mouvement se faisait dans le sens direct. On peut reprendre le même problème en considérant le cas où la lumière tourne dans le sens

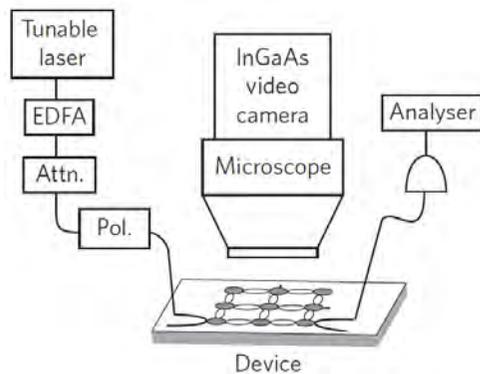


FIGURE VI.18. Schéma de l'expérience de HAFEZI, MITTAL *et al.* (2013).

rétrograde, et on trouve alors que chaque phase est changée en son opposée. Ainsi la figure VI.16 donnant le passage $A_1 \rightarrow A_2$ est modifiée pour devenir la figure VI.21.

On retrouve ici une situation d'effet Hall de spin, pour laquelle on peut obtenir une topologie non triviale pour des problèmes invariants par renversement du temps, pourvu que l'on tire parti d'un degré de liberté de spin \uparrow et \downarrow (ou de pseudo-spin) (KANE & MELE 2005a; KANE & MELE 2005b; BERNEVIG, HUGHES *et al.* 2006). Cette situation a déjà été brièvement présentée au chapitre précédent. Dans le cas présent, le pseudo-spin est associé au sens de rotation de la lumière dans un anneau; la robustesse des états de bords est assurée par le fait que la rétro-diffusion de la lumière, qui inverserait son sens de rotation dans les résonateurs en anneau, joue un rôle négligeable.

3-3 Implémentation photonique active

Un schéma similaire basé sur un réseau carré de résonateurs a récemment été utilisé pour créer³ un "laser topologique" à deux dimensions par

3. On pourra également consulter l'article de BAHARI, NDAO *et al.* (2017), qui décrit la réalisation d'un laser topologique en utilisant un milieu magnétique (yttrium iron garnet, YIG) pour briser explicitement l'invariance par renversement du temps.

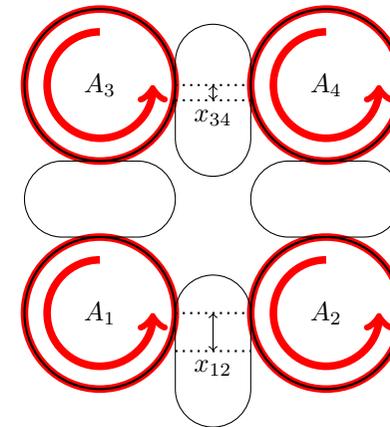


FIGURE VI.19. Cellule unité de l'expérience de HAFEZI, MITTAL *et al.* (2013). La lumière est résonnante avec les anneaux situés aux sites A_j , qui forment les nœuds d'un réseau carré. La lumière est injectée dans le réseau de telle sorte qu'elle tourne dans le sens direct sur chaque anneau. Elle passe d'un site à l'autre par les liens, dont la position déterminée par les distances x_{12} et x_{34} permet d'ajuster la phase $2\pi\alpha$ acquise par le champ électromagnétique sur une cellule ($\alpha = 0.15$ dans l'expérience). On génère ainsi un réseau de Harper-Hofstadter.

BANDRES, WITTEK *et al.* (2018) et HARARI, BANDRES *et al.* (2018). La figure VI.22 montre un réseau carré de 10×10 résonateurs de site, disposés sur une plateforme comportant des puits quantiques de InGaAsP pouvant amplifier le champ électromagnétique en présence d'un pompage adéquat. L'expérience est réalisée pour le cas $\alpha = 1/4$ que nous avons étudié ci-dessus. Les résonateurs et les liens sont représentés sur les figures VI.14 et VI.15. Pour comparaison, les mêmes expériences sont menées avec un réseau de même nature mais sans le décalage des liens, ce qui conduit à $\alpha = 0$ (topologie triviale).

L'effet laser sur les canaux de bord est obtenu en dirigeant la lumière de pompage sur le bord de l'échantillon (figure VI.23). On mesure la lumière émise par l'échantillon, à la fois au niveau de chacun des résonateurs et aussi au niveau de coupleurs de sortie disposés sur un coin de l'échantillon. La figure VI.24 montre quelques caractéristiques importantes de ce laser :

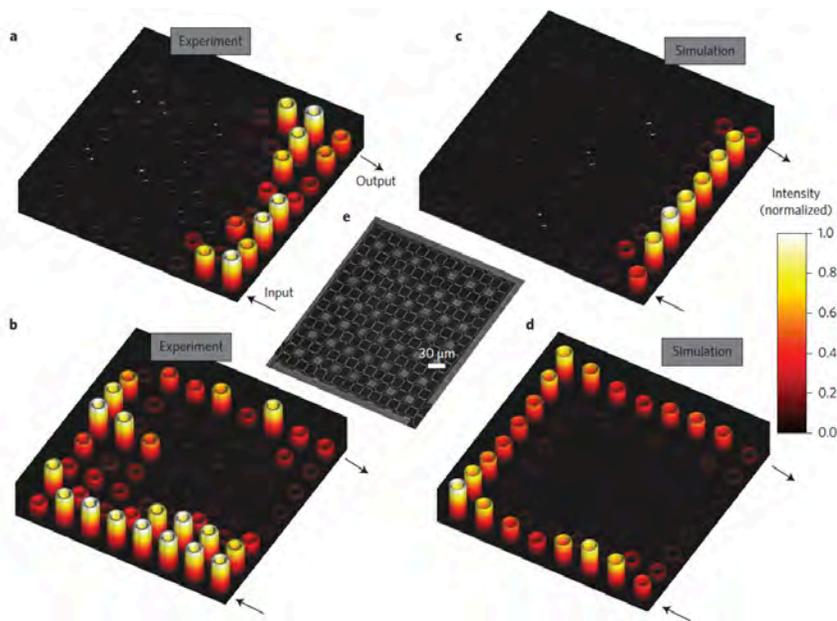


FIGURE VI.20. Mise en évidence des canaux de bord dans l'expérience de HAFEZI, MITTAL *et al.* (2013). Selon la longueur d'onde de la lumière, on excite un canal de bord avec une chiralité positive ou négative. Les images de gauche correspondent aux résultats expérimentaux et les images de droite à des simulations numériques.

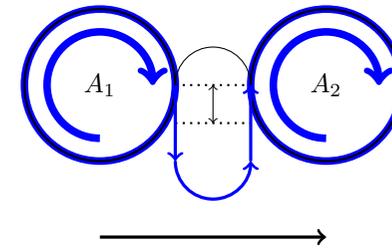


FIGURE VI.21. Passage de l'anneau A_1 vers l'anneau A_2 via le lien inséré entre les deux. Pour de la lumière tournant dans le sens indirect dans les anneaux, ce passage $A_1 \rightarrow A_2$ se fait sur le bord inférieur du lien. La phase accumulée est donc opposée à celle trouvée pour de la lumière tournant dans le sens direct dans les anneaux (figure VI.16). Ce résultat est conforme à l'invariance par renversement du temps du système.

— La puissance de sortie tracée en fonction de la puissance de pompe montre que le laser topologique opère avec une efficacité meilleure que son équivalent non topologique. Cela s'explique par le fait que dans le réseau non-topologique, les modes intervenant dans l'effet laser s'étendent dans le cœur du matériau, ce qui entraîne des pertes significatives. Ces modes ont également tendance à minimiser l'amplitude au niveau du coupleur de sortie pour maximiser le gain. Au contraire, le mode de bord topologique est par définition localisé sur la frontière de l'échantillon, il occupe cette frontière de manière uniforme et possède donc une amplitude significative au niveau du coupleur de sortie.

— Le spectre de la lumière émise est plus étroit pour le laser topologique, indiquant que ce dernier fonctionne dans un régime monomode, alors que le laser non topologique est multimode : la puissance émise dans le mode longitudinal dominant est supérieure par un ordre de grandeur dans le cas topologique. Cela s'explique par le fait que dans le cas non topologique, différentes régions de l'échantillon ont tendance à déclencher l'effet laser à des fréquences variées, du fait du désordre inévitable se produisant lors de la fabrication de l'échantillon. Cela favorise un fonctionnement multimode longitudinal, ce qui n'est pas le cas pour le laser topologique.

Ces différentes caractéristiques montrent l'intérêt de la topologie en photonique. La robustesse qu'elle apporte permet d'envisager des dispositifs dont le fonctionnement sera moins sensible aux défauts aléatoires pouvant survenir lors de la fabrication. Nous avons donné ici l'exemple de l'effet laser où le gain apporté par la topologie est clair, mais on peut également citer la fabrication de lignes à retard contrôlé, qui sont un composant essentiel du traitement optique de l'information et pour lesquelles le désordre est également un facteur limitant.

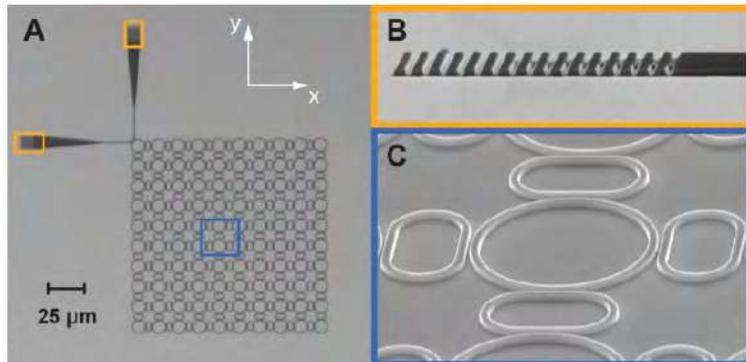


FIGURE VI.22. Réseau de 10×10 résonateurs utilisé par BANDRES, WITTEK et al. (2018) pour fabriquer un laser dans une topologie décrite par l'hamiltonien de Harper–Hofstadter. On a disposé au coin supérieur gauche des structures permettant d'extraire de manière efficace la lumière du réseau de résonateurs.

4 Utilisation de la structure interne atomique

Dans ce cours, nous nous sommes essentiellement concentrés sur le mouvement de particules dans des potentiels périodiques en négligeant toute structure interne de cette particule. Les effets topologiques sont apparus en tirant parti de coefficients tunnels variant dans l'espace, comme pour le modèle SSH, ou de coefficients tunnel avec un facteur de phase complexe, comme pour le modèle de Haldane. La possibilité d'utiliser la structure interne des atomes ouvre un nouveau champ de possibilités. Les sites des réseaux topologiques peuvent correspondre alors à des états internes différents; le passage d'un site à l'autre ne se fait plus par un effet tunnel standard, mais par changement du niveau interne résultant de l'absorption ou l'émission de photons.

Nous avons abordé dans le cours 2013-14 la description d'une partie des mécanismes qui permettent de créer un champ magnétique artificiel sur un gaz d'atomes. Une fois ce champ créé, des bandes topologiques peuvent apparaître naturellement, comme dans le cas de l'effet Hall quantique. Nous commencerons cette partie par un bref rappel de deux mécanismes déjà étudiés dans le cours de 2013-14, l'effet tunnel assisté par des

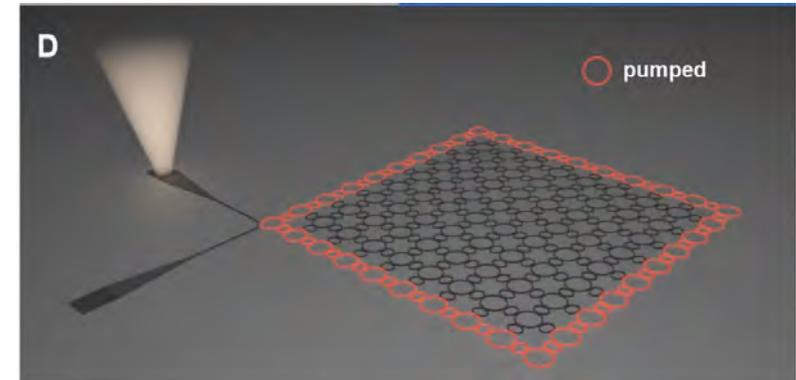


FIGURE VI.23. Schéma de principe d'un laser topologique : on envoie la lumière de pompe sur la frontière de l'échantillon de façon à fabriquer une inversion de population pour un canal de bord. Ce canal se propage de manière chirale le long de l'échantillon, et on détecte la lumière laser dans une des deux voies de sortie. Image extraite de BANDRES, WITTEK et al. (2018).

transitions Raman et la notion de dimension synthétique, avant de nous concentrer sur un autre type de systèmes, appelés *réseaux de flux*.

4-1 Transitions Raman et dimensions synthétiques

Nous avons décrit en § 2-1 l'effet tunnel assisté par laser comme processus capable d'imprimer un facteur de phase complexe sur le coefficient tunnel entre deux sites. Nous nous étions limités dans la discussion de § 2-1 au cas où seul l'état externe de l'atome était modifié. Toutefois, on peut généraliser ce principe au cas où la transition représentée en figure VI.10 affecte également l'état interne de l'atome.

Plus précisément, considérons un système à deux sites A et B séparés spatialement et piégeant respectivement les atomes dans les états internes $|a\rangle$ et $|b\rangle$ (figure VI.25). On peut induire un saut d'une particule du site A vers le site B en éclairant cette particule avec une onde électromagnétique progressive $E_0 e^{i(ky-\phi)}$ qui induit (par exemple) la transition

$$|a\rangle + \text{photon} \longrightarrow |b\rangle. \quad (\text{VI.47})$$

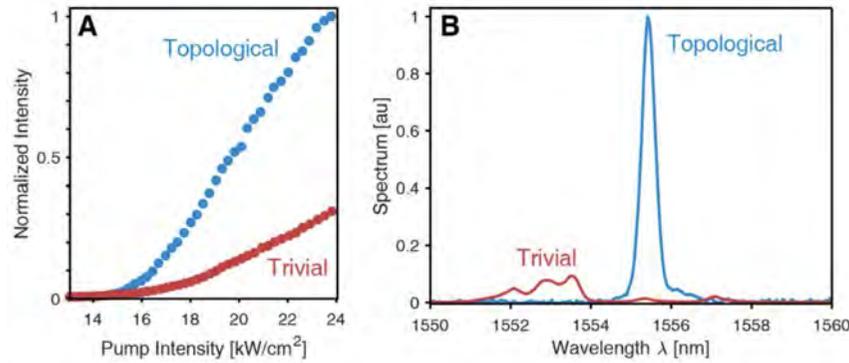


FIGURE VI.24. Gauche : puissance de sortie du laser en fonction de la puissance de pompe. Droite : spectre mesuré pour une puissance de pompe de 23.5 kW/cm^2 . Image extraite de BANDRES, WITTEK et al. (2018).

Lors de cette transition, la phase ϕ de l'onde électromagnétique sur la ligne $y = 0$ du segment AB est imprimée sur l'élément de matrice V_{AB} . En généralisant cette idée à l'échelle d'un réseau entier, on peut reproduire les éléments essentiels du modèle de Harper-Hofstadter (JAKSCH & ZOLLER 2003; GERBIER & DALIBARD 2010). Un schéma possible est d'alterner des colonnes de sites piégeant les états $|a\rangle$ et les états $|b\rangle$, puis de faire une ingénierie de l'effet tunnel assisté par laser pour reproduire (par exemple) les éléments de matrice du modèle de Harper-Hofstadter de la figure VI.4.

Si l'on souhaite simplement réaliser un ruban dont la largeur ne dépasse pas quelques sites, on peut utiliser le concept de *dimension synthétique*, représenté sur la figure VI.26. On utilise un atome dont l'état fondamental possède un moment cinétique J ($J = 1$ sur la figure), donc $2J + 1$ états Zeeman $|J, m\rangle$ avec $m = -J, -J + 1, \dots, J$; chaque état Zeeman joue le rôle d'une ligne du ruban. L'axe orthogonal (x sur la figure VI.26) est quant à lui une dimension de l'espace usuel le long de laquelle on a disposé un réseau 1D. Le mouvement le long de cet axe correspond à l'effet tunnel habituel alors que le mouvement le long de la direction synthétique est initié par des transitions Raman stimulées

$$|J, m\rangle \rightarrow |J, m \pm 1\rangle. \quad (\text{VI.48})$$

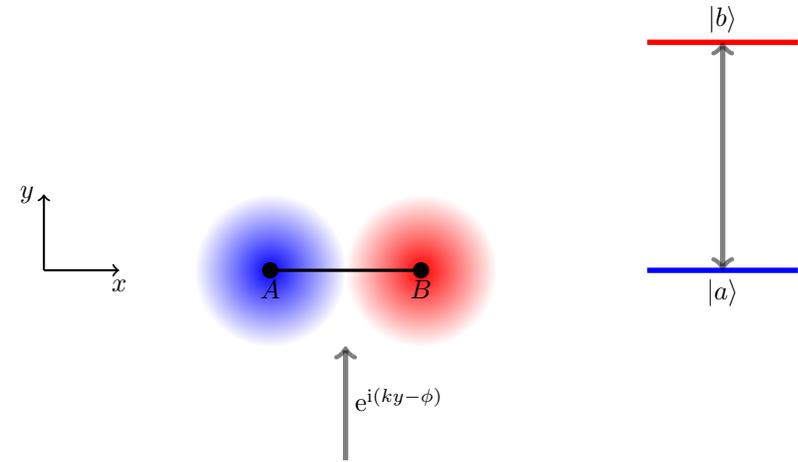


FIGURE VI.25. Effet tunnel assisté par laser accompagné par un changement d'état interne.

Ces transitions sont elles-mêmes induites par une paire de faisceaux lumineux auxiliaires, l'un polarisé σ_+ et l'autre polarisé π , qui impriment la phase souhaitée lors de la transition. Le principe de cette dimension synthétique a été proposée par CELI, MASSIGNAN et al. (2014) et a été mis en œuvre dans plusieurs groupes au cours des dernières années, d'abord avec des transitions Raman entre sous-niveaux fondamentaux (STUHL, LU et al. 2015; MANCINI, PAGANO et al. 2015), puis sur la raie étroite (transition d'horloge) d'atomes à deux électrons externes (KOLKOWITZ, BROMLEY et al. 2017; LIVI, CAPPELLINI et al. 2016).

4-2 États habillés et suivi adiabatique

Dans les situations que nous venons d'envisager, nous sommes partis d'un réseau périodique (1D ou 2D), auquel nous avons superposé un faisceau lumineux auxiliaire qui induit un couplage tunnel complexe entre sites. Le réseau optique n'était donc pas lui-même topologique, mais simplement une base pour "discrétiser" l'espace. Nous allons maintenant rechercher si un réseau optique périodique peut posséder à lui tout seul

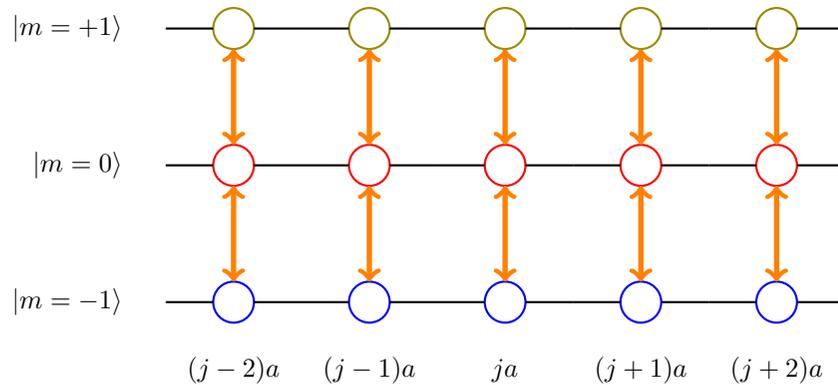


FIGURE VI.26. Utilisation d'une dimension synthétique pour un atome de spin $J = 1$, avec trois états internes $|J, m\rangle$ et $m = 0, \pm 1$. Le confinement le long de l'axe x est celui d'un réseau 1D usuel. L'axe y correspond aux 3 valeurs possibles de m . Le "mouvement" le long de cette direction se fait par des processus Raman stimulés qui induisent des transitions $\Delta m = \pm 1$ entre états internes (flèches orange).

toutes les caractéristiques nécessaires pour créer des bandes topologiques, sans avoir recours à des modulations temporelles des coefficients ou à des faisceaux lumineux annexes. Nous allons voir que la réponse est positive, et correspond à la notion de *réseau de flux*.

Nous allons nous limiter ici à un réseau créé par des faisceaux lumineux très désaccordés par rapport aux raies de résonance de l'atome, de manière à éviter tout processus d'émission spontanée. Dans ces conditions, l'interaction entre l'atome et la lumière a pour seul effet significatif un déplacement lumineux du niveau fondamental, créé par les processus à deux photons absorption–émission stimulée. Intéressons-nous aux atomes alcalins, avec un seul électron externe, qui sont majoritairement utilisés dans les expériences de gaz quantiques; le déplacement lumineux est alors décrit en tout point \mathbf{r} de l'espace par un opérateur qui comporte⁴ :

- une partie scalaire $U(\mathbf{r})$, qui déplace tous les sous-niveaux Zeeman de la même quantité. Pour un atome alcalin, cette partie scalaire s'annule

4. On pourra consulter le chapitre 1 du cours 2012-13 qui comporte une discussion détaillée de l'opérateur déplacement lumineux

si l'on choisit une lumière de longueur d'onde située au barycentre des deux raies de résonance D_1 et D_2 avec des poids $2/3-1/3$. Nous allons supposer cette condition réalisée dans la suite.

- une partie vectorielle en

$$\hat{V}(\mathbf{r}) = \kappa(\mathbf{r}) \cdot \hat{\mathbf{J}} \quad (\text{VI.49})$$

où $\kappa(\mathbf{r})$ dépend de l'amplitude et de la polarisation du champ électrique de la lumière au point \mathbf{r} . Pour simplifier notre analyse, nous allons négliger la structure hyperfine du niveau fondamental de l'atome et nous limiter au degré de liberté de spin de l'électron externe. L'opérateur moment cinétique $\hat{\mathbf{J}}$ sera donc dans la suite l'opérateur de spin $1/2$, caractérisé par les matrices de Pauli $\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z$.

Avant de traiter le mouvement de l'atome dans ce potentiel avec le formalisme quantique, commençons par un raisonnement classique et intéressons-nous au cas d'un atome au repos au point \mathbf{r} . L'hamiltonien se ramène donc au seul potentiel $V(\mathbf{r})$; pour un atome de spin $1/2$, il s'agit d'une matrice 2×2 que nous pouvons diagonaliser en tout point \mathbf{r} pour obtenir les deux niveaux habillés $|\chi_{\mathbf{r}}^{(\pm)}\rangle$, combinaisons linéaires de $|\pm\rangle_z$ avec pour énergies $\pm|\kappa(\mathbf{r})|$:

$$\hat{V}(\mathbf{r}) |\chi_{\mathbf{r}}^{(\pm)}\rangle = \pm|\kappa(\mathbf{r})| |\chi_{\mathbf{r}}^{(\pm)}\rangle. \quad (\text{VI.50})$$

Prenons maintenant en compte le mouvement de l'atome, décrit de manière quantique. L'état le plus général (spatial+spin) peut s'écrire sous la forme

$$\psi_+(\mathbf{r}, t) |\chi_{\mathbf{r}}^{(+)}\rangle + \psi_-(\mathbf{r}, t) |\chi_{\mathbf{r}}^{(-)}\rangle. \quad (\text{VI.51})$$

L'évolution des deux amplitudes de probabilité $\psi_{\pm}(\mathbf{r}, t)$ est obtenue en injectant cette forme dans l'équation de Schrödinger régie par l'hamiltonien

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{V}(\hat{\mathbf{r}}), \quad (\text{VI.52})$$

et elle se ramène en général à deux équations aux dérivées partielles couplées pour les amplitudes $\psi_{\pm}(\mathbf{r}, t)$.

Nous allons nous placer ici dans la situation où l'atome bouge suffisamment lentement pour suivre adiabatiquement un des niveaux habillés, par exemple l'état habillé inférieur $|\chi^{(-)}\rangle$, sans passer de manière significative

sur l'autre niveau. On prend donc $\psi_+(\mathbf{r}, t) \approx 0$ pour tout point \mathbf{r} et tout temps t .

L'évolution se ramène alors à une seule équation différentielle pour l'amplitude $\psi_-(\mathbf{r}, t)$, dans laquelle les termes dominants sont :

$$i\hbar \frac{\partial \psi_-}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi_- - |\boldsymbol{\kappa}(\mathbf{r})| \psi_- + \dots \quad (\text{VI.53})$$

Toutefois, nous savons que l'approximation adiabatique amène avec elle des termes supplémentaires, comme la phase géométrique décrite par une connexion de Berry. Ce sont précisément ces termes supplémentaires qui peuvent donner naissance à des propriétés topologiques pour un réseau de flux.

Pour ce problème où l'approximation adiabatique porte sur un mouvement dans l'espace réel, la connexion de Berry se définit pour l'état habillé $|\chi^{(-)}\rangle$ par

$$\mathcal{A}(\mathbf{r}) = i \langle \chi_{\mathbf{r}}^{(-)} | \nabla_{\mathbf{r}} \chi_{\mathbf{r}}^{(-)} \rangle \quad (\text{VI.54})$$

et elle vient contribuer à l'équation (VI.53) sous la forme (cf. cours 2013-14)

$$i\hbar \frac{\partial \psi_-}{\partial t} = \frac{\hbar^2}{2m} [-i\nabla - \mathcal{A}(\mathbf{r})]^2 \psi_- - |\boldsymbol{\kappa}(\mathbf{r})| \psi_- + \dots \quad (\text{VI.55})$$

La connexion de Berry joue donc le rôle d'un potentiel vecteur pour une particule de charge fictive $e = 1$ dans ce problème. L'approximation adiabatique est également à l'origine d'un potentiel de jauge scalaire $W(\mathbf{r})$ dans (VI.55), mais nous ne l'écrivons pas explicitement car il ne joue qu'un rôle mineur dans la suite.

Avec (VI.55), nous retrouvons un problème d'effet Hall quantique puisque nous sommes face au mouvement 2D d'une particule dans un champ magnétique (fictif). Ce champ magnétique est égal au rotationnel du potentiel vecteur (connexion de Berry) \mathcal{A} et est donc une courbure de Berry dans l'espace des positions. Nous la noterons ici \mathcal{B} :

$$\mathcal{B}(\mathbf{r}) = \nabla \times \mathcal{A}(\mathbf{r}) \quad (\text{VI.56})$$

pour éviter toute confusion avec la courbure de Berry $\Omega(\mathbf{q})$ que nous avons introduite auparavant dans l'espace des moments. La question ouverte est maintenant de savoir si ce champ magnétique effectif dans l'espace réel peut conduire à une bande topologique pour l'hamiltonien (VI.55).

4-3 Les réseaux de flux

Un réseau de flux est défini comme une configuration lumineuse pour laquelle le flux du champ magnétique effectif $\mathcal{B}(\mathbf{r})$ à travers la cellule unité du réseau est non nul (COOPER 2011). C'est donc une configuration pour laquelle il est naturelle de chercher si elle peut donner naissance à des bandes topologiques. Pour discuter cette notion de manière concrète, considérons l'exemple suivant. Supposons que la configuration laser résulte en l'opérateur déplacement lumineux

$$\hat{V}(\mathbf{r}) = \boldsymbol{\kappa}(\mathbf{r}) \cdot \hat{\boldsymbol{\sigma}} \quad \text{avec} \quad \boldsymbol{\kappa}(\mathbf{r}) = \kappa_0 \begin{pmatrix} \cos(kx) \\ \cos(ky) \\ \sin(kx) \sin(ky) \end{pmatrix} \quad (\text{VI.57})$$

soit dans la base $|\pm\rangle_z$ des états de spin de l'atome :

$$\hat{V}(\mathbf{r}) = \kappa_0 \begin{pmatrix} \sin(kx) \sin(ky) & \cos(kx) - i \cos(ky) \\ \cos(kx) + i \cos(ky) & -\sin(kx) \sin(ky) \end{pmatrix} \quad (\text{VI.58})$$

Une cellule unité correspondant à la périodicité de \hat{V} est un carré de côté $2\pi/k$. Cette configuration peut être obtenue en superposant des ondes stationnaires le long des axes x et y avec des polarisations adéquates (COOPER, DALIBARD et al. 2018).

Les énergies des niveaux habillés s'écrivent

$$\pm |\boldsymbol{\kappa}(\mathbf{r})| = \pm \kappa_0 [1 + \cos^2(kx) \cos^2(ky)]^{1/2}. \quad (\text{VI.59})$$

Pour l'état habillé de basse énergie, $-|\boldsymbol{\kappa}(\mathbf{r})|$, les minima de potentiel sont situés sur le réseau carré $kx = n_x\pi$, $ky = n_y\pi$ (figure VI.27, haut). Il y a 4 minima de $-|\boldsymbol{\kappa}|$ par cellule unité.

Le calcul du champ magnétique effectif \mathcal{B} se fait à partir de la formule trouvée au chapitre 4

$$\mathcal{B} = -\frac{1}{2|\boldsymbol{\kappa}|^3} \boldsymbol{\kappa} \cdot [(\partial_x \boldsymbol{\kappa}) \times (\partial_y \boldsymbol{\kappa})] \quad (\text{VI.60})$$

qui conduit à

$$\mathcal{B}_z = -k^2 \frac{1 - \cos^2(kx) \cos^2(ky)}{2 [1 + \cos^2(kx) \cos^2(ky)]^{3/2}}. \quad (\text{VI.61})$$

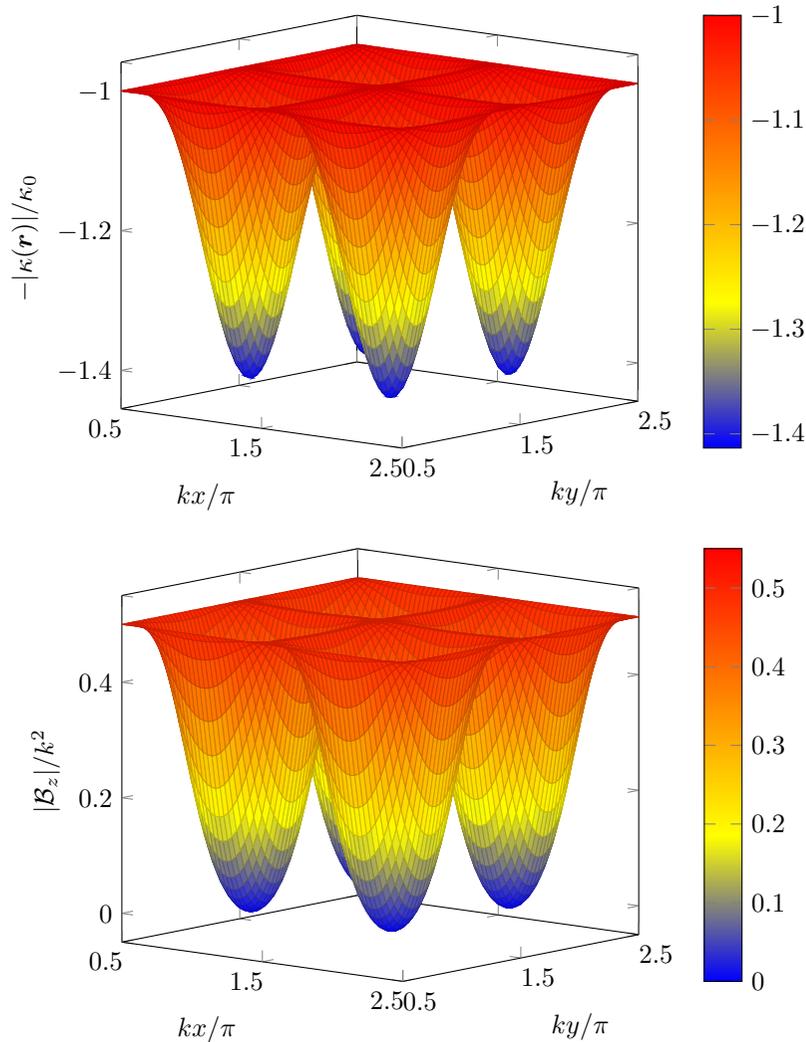


FIGURE VI.27. Haut : Variation de l'énergie de l'état habillé $|\chi^{(-)}\rangle$ sur une cellule unité carrée de côté $2\pi/k$. Bas : variation du champ magnétique effectif $|B_z|$ pour cet état habillé.

Ce champ est tracé sur la figure VI.27, bas. Le calcul montre que le flux de ce champ à travers la cellule unité carrée de côté $2\pi/k$ est égal à 4π .

Le fait que le flux soit un multiple de 2π n'est pas surprenant : on calcule ici l'intégrale d'une courbure de Berry sur une zone (x, y) avec des conditions aux limites périodiques. Un raisonnement identique à celui que l'on avait fait dans l'espace des moments pour l'intégrale de $\Omega(\mathbf{q})$ sur une zone de Brillouin permet de conclure que ce flux peut être vu comme 2π fois le nombre de Chern associé, dont on sait qu'il doit être entier.

Dans la limite des grands puits de potentiel où κ_0 devient grand devant l'énergie de recul $E_r = \hbar^2 k^2 / 2m$, on retrouve la limite de liaisons fortes, dans laquelle on peut se limiter aux sauts entre proches voisins sur le réseau carré composé par les minima de l'énergie $-\kappa$. Nous avons vu (i) qu'il y a 4 minima par cellule unité et (ii) que le flux de \mathbf{B} à travers la cellule unité est égal 4π . Cela entraîne que le flux de \mathbf{B} à travers une maille du réseau des minima est égal à π , et correspond à deux bandes se touchant en des points de Dirac.

Ce régime avec des bandes à points de Dirac n'est pas propice à l'obtention de bandes topologiques. Il vaut mieux opérer le réseau de flux dans un régime intermédiaire d'intensité, où le couplage κ_0 est de l'ordre de l'énergie de recul. On obtient alors une bande fondamentale séparée des bandes supérieures par un gap, avec un nombre de Chern égal à 1. Notons que l'approximation adiabatique devient sujette à caution puisque l'énergie cinétique des particules est alors comparable à l'écart entre les potentiels habillés $\pm|\kappa|$. Il est donc plus prudent de déterminer les bandes d'énergies à partir du problème initial à deux composantes, plutôt que d'utiliser l'expression approchée (VI.55). C'est la procédure suivie pour arriver aux bandes d'énergie montrées en figure VI.28, pour le choix $\kappa_0 = 2E_r$.

Un des points importants dans la physique des réseaux de flux est la recherche de bandes d'énergie quasi-plates, c'est-à-dire avec un rapport gap/largeur le plus grand possible. Le fait que la bande soit plate permet en effet d'obtenir facilement un effet dominant des interactions et de se rapprocher ainsi de conditions propices à l'observation d'effets similaires à l'effet Hall quantique fractionnaire (COOPER & DALIBARD 2013). En pratique, pour un atome dont l'état fondamental a un moment cinétique $J = 1$, le rapport gap/largeur peut atteindre des valeurs de l'ordre de 50 (COOPER & DALIBARD 2011b).

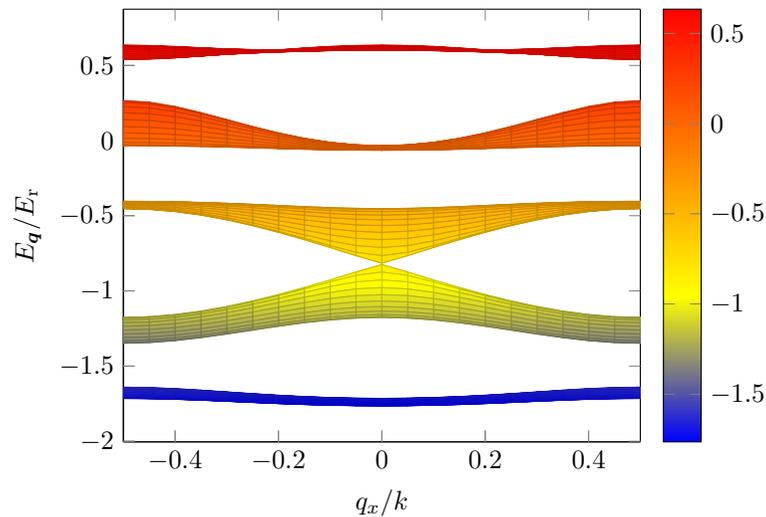


FIGURE VI.28. Bandes d'énergie les plus basses obtenues pour l'hamiltonien $\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + \hat{V}(\hat{\mathbf{r}})$ où l'opérateur $\hat{V}(\hat{\mathbf{r}})$ donné en (VI.58) agit à la fois dans l'espace des variables externes et internes. Le calcul est fait pour $\kappa_0 = 2E_r$. La bande fondamentale, relativement plate en comparaison avec le gap qui la sépare de la première bande excitée, a pour nombre de Chern $C = 1$.

À notre connaissance, le concept de réseau de flux n'a pas encore été implémenté tel quel dans un laboratoire. Signalons toutefois l'expérience récente de WU, ZHANG et al. (2016) (et sa version améliorée dans SUN, WANG et al. (2017)) qui a montré l'existence d'une bande topologique dans un réseau 2D. Dans ces deux expériences, la partie scalaire du déplacement lumineux jouait un rôle prépondérant; elle créait un réseau carré dans lequel les deux états de spin $|\pm\rangle_z$ étaient simultanément piégés, l'expérience se déroulant dans le régime des liaisons fortes. Le rôle de la partie vectorielle de l'opérateur déplacement lumineux était d'induire des couplages entre proches voisins *dépendant du spin*. On réalise alors une situation formellement similaire au modèle de Haldane, dans laquelle il n'y a pas de flux du champ magnétique artificiel \mathbf{B} , mais donnant néanmoins naissance à une bande topologique. WU, ZHANG et al. (2016) ont vérifié la nature to-

pologique de cette bande en mesurant la polarisation du spin moyen des atomes en différents points de la zone de Brillouin, suivant une proposition de LIU, LAW et al. (2013).

4-4 Interactions entre états habillés

L'ensemble de ce cours a porté presque exclusivement sur des assemblées de particules sans interaction. La seule exception a concerné notre discussion des modes de Majorana au chapitre 2, pour lesquels les interactions étaient un ingrédient indispensable pour faire apparaître un gap supraconducteur. La combinaison des considérations topologiques et des interactions dans un système à grand nombre de particules est bien sûr un problème essentiel, qui reste encore très ouvert. On pourra consulter l'article de REPELLIN & REGNAULT (2018) ainsi que la partie V de la revue de COOPER, DALIBARD et al. (2018) pour trouver une liste de références récentes sur ce problème.

Pour conclure cette partie sur l'utilisation de la structure interne atomique, nous allons simplement nous concentrer sur une collision binaire et indiquer comment l'habillage des niveaux d'un atome permet de modifier l'interaction dans ce cas. Rappelons pour commencer que pour des atomes libres et à basse température, l'interaction à deux corps est dominée par des collisions en onde s , qui peuvent être décrites par une interaction de contact, donc locale, $g\delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)$, où la distribution de Dirac $\delta(\mathbf{r})$ est supposée régularisée (HUANG 1987). Nous allons montrer que dans un réseau de flux, les interactions acquièrent un caractère non-local du fait de la dépendance en impulsion des états habillés.

Un état habillé de la bande fondamentale d'un réseau de flux s'écrit de manière générale

$$|\Psi_{\mathbf{q}}\rangle = |\psi_{\mathbf{q}}\rangle \otimes |\Sigma_{\mathbf{q}}\rangle, \quad (\text{VI.62})$$

c'est-à-dire comme le produit d'un état de Bloch $|\psi_{\mathbf{q}}\rangle$ décrivant le mouvement du centre de masse de l'atome, et un état de spin $|\Sigma_{\mathbf{q}}\rangle$. C'est la dépendance en \mathbf{q} de cet état de spin qui est à l'origine de l'interaction non-locale que nous allons trouver.

Commençons par le cas simple de particules sans spin ou complètement polarisées. Pour l'interaction de contact $\hat{V} = g\delta(\hat{\mathbf{r}})$, l'élément de ma-

trice de \hat{V} décrivant le passage d'une paire de particules *discernables* depuis l'état initial $(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2)$ vers l'état $(\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_t, \mathbf{q}_2 - \mathbf{q}_t)$ est égal à g (à un facteur de normalisation près) et il est indépendant du moment transféré \mathbf{q}_t .

Pour des particules *indiscernables*, les observables physiques font intervenir la somme sur les deux permutations

$$(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2) \rightarrow (\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_t, \mathbf{q}_2 - \mathbf{q}_t) \quad \text{et} \quad (\mathbf{q}_2 - \mathbf{q}_t, \mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_t), \quad (\text{VI.63})$$

avec un signe relatif $\varepsilon = \pm 1$ selon qu'on a affaire à des bosons ou des fermions. L'élément de matrice de \hat{V} est doublé pour des bosons polarisés et il s'annule pour des fermions polarisés : ce dernier résultat traduit simplement le fait qu'un gaz de fermions polarisés est insensible à une interaction de contact, puisque le principe de Pauli interdit à deux fermions de se trouver à la même position.

Considérons maintenant la collision entre deux atomes préparés dans la bande fondamentale d'un réseau de flux (VI.62) et supposons pour simplifier que l'interaction de contact est indépendante de l'état de spin $|\pm\rangle$. Pour des particules indiscernables (bosons ou fermions), l'élément de matrice de \hat{V} pour le processus à deux canaux (VI.63) s'écrit maintenant

$$\begin{aligned} & \langle \psi_{\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_t}, \psi_{\mathbf{q}_2 - \mathbf{q}_t} | \hat{V} | \psi_{\mathbf{q}_1}, \psi_{\mathbf{q}_2} \rangle \langle \Sigma_{\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_t} | \Sigma_{\mathbf{q}_1} \rangle \langle \Sigma_{\mathbf{q}_2 - \mathbf{q}_t} | \Sigma_{\mathbf{q}_2} \rangle \\ & + \varepsilon \langle \psi_{\mathbf{q}_2 - \mathbf{q}_t}, \psi_{\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_t} | \hat{V} | \psi_{\mathbf{q}_1}, \psi_{\mathbf{q}_2} \rangle \langle \Sigma_{\mathbf{q}_2 - \mathbf{q}_t} | \Sigma_{\mathbf{q}_1} \rangle \langle \Sigma_{\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_t} | \Sigma_{\mathbf{q}_2} \rangle \end{aligned}$$

Pour des fermions, cet élément de matrice n'est en général plus nul. Ainsi, dans le cas particulier $\mathbf{q}_t = 0$, il est proportionnel à $\left(1 - |\langle \Sigma_{\mathbf{q}_2} | \Sigma_{\mathbf{q}_1} \rangle|^2\right)$.

Ce résultat indique qu'à partir de fermions en interaction de contact et occupant une seule bande d'énergie, l'habillage par laser conduit à un gaz *en interaction*. Plus précisément, on peut montrer que ces interactions dans un gaz de fermions à une composante sont essentiellement en onde p (ZHANG, TEWARI et al. 2008b). Cette émergence d'une interaction entre deux fermions identiques peut être vue comme une correction non-adiabatique à l'habillage par laser, ce qui permet à deux fermions de se trouver au même point de l'espace, leurs états internes étant légèrement différents du fait de leur vitesse relative (COOPER & DALIBARD 2011a).

Cette conversion d'une interaction de contact en une interaction dépendant de l'impulsion via un habillage par laser des états atomiques se produit également pour des bosons; WILLIAMS, LEBLANC et al. (2012) ont

ainsi montré qu'une composante de collision en onde d apparaissait entre bosons ultra-froids du fait de cet habillage.

Références

- ADAMS, EN & EI BLOUNT (1959), « Energy bands in the presence of an external force field—II : Anomalous velocities », in *Journal of Physics and Chemistry of Solids* **10**, p. 286-303.
- AHARONOV, Y. & D. BOHM (1959), « Significance of electromagnetic potentials in quantum theory », in *Phys. Rev.* **115**, p. 485.
- AIDELSBURGER, M., M. ATALA, M. LOHSE, J. T. BARREIRO, B. PAREDES & I. BLOCH (2013), « Realization of the Hofstadter Hamiltonian with Ultracold Atoms in Optical Lattices », in *Phys. Rev. Lett.* **111** (18), p. 185301.
- AIDELSBURGER, M., M. LOHSE, C. SCHWEIZER, M. ATALA, J. T. BARREIRO, S. NASCIBÈNE, N. R. COOPER, I. BLOCH & N. GOLDMAN (2015), « Measuring the Chern number of Hofstadter bands with ultracold bosonic atoms », in *Nature Physics* **11**, p. 162.
- ALBA, E., X. FERNANDEZ-GONZALVO, J. MUR-PETIT, J. K. PACHOS & J. J. GARCIA-RIPOLL (2011), « Seeing Topological Order in Time-of-Flight Measurements », in *Phys. Rev. Lett.* **107**, p. 235301.
- ALICEA, Jason (2012), « New directions in the pursuit of Majorana fermions in solid state systems », in *Reports on progress in physics* **75**, p. 076501.
- ALICEA, Jason, Yuval OREG, Gil REFAEL, Felix VON OPPEN & Matthew PAFISHER (2011), « Non-Abelian statistics and topological quantum information processing in 1D wire networks », in *Nature Physics* **7**, p. 412.
- AMO, Alberto (2018), « When quantum optics meets topology », in *Science* **359**, p. 638-639.
- ASHCROFT, N. W. & N. D. MERMIN (1976), *Solid State Physics*, New York : Holt, Rinehardt et Winston.
- ASOREY, Manuel (juin 2016), « Space, matter and topology », in *Nature Physics* **12**, p. 616.
- 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.
- AVAN, P, C COHEN-TANNOUDJI, J DUPONT-ROC & C FABRE (1976), « Effect of high-frequency irradiation on dynamical properties of weakly bound electrons », in *Journal de Physique* **37**, 993-1009.
- BAHARI, Babak, Abdoulaye NDAO, Felipe VALLINI, Abdelkrim EL AMILI, Yeshiahu FAINMAN & Boubacar KANTÉ (2017), « Nonreciprocal lasing in topological cavities of arbitrary geometries », in *Science* **358**, p. 636-640.
- BANDRES, Miguel A., Steffen WITTEK, Gal HARARI, Midya PARTO, Jinhan REN, Mordechai SEGEV, Demetrios N. CHRISTODOULIDES & Mercedeh KHAJAVIKHAN (2018), « Topological insulator laser : Experiments », in *Science* **359**, p. 4005.
- BARDYN, C-E, MA BARANOV, E RICO, A İMAMOĞLU, P ZOLLER & S DIEHL (2012), « Majorana modes in driven-dissipative atomic superfluids with a zero Chern number », in *Physical review letters* **109**, p. 130402.
- BARIK, Sabyasachi, Aziz KARASAHIN, Christopher FLOWER, Tao CAI, Hirokazu MIYAKE, Wade DEGOTTARDI, Mohammad HAFEZI & Edo WAKS (2018), « A topological quantum optics interface », in *Science* **359**, p. 666-668.
- BEENAKKER, Carlo & Leo KOUWENHOVEN (2016), « A road to reality with topological superconductors », in *Nature Physics* **12**, p. 618.
- BEENAKKER, CWJ (2015), « Random-matrix theory of Majorana fermions and topological superconductors », in *Reviews of Modern Physics* **87**, p. 1037.
- BELLEÇ, Matthieu, Ulrich KUHLE, Gilles MONTAMBAUX & Fabrice MORTESSAGNE (2013), « Topological transition of Dirac points in a microwave experiment », in *Physical Review Letters* **110**, p. 033902.
- BERNEVIG, B Andrei & Taylor L HUGHES (2013), *Topological insulators and topological superconductors*, Princeton University Press.

- BERNEVIG, B Andrei, Taylor L HUGHES & Shou-Cheng ZHANG (2006), « Quantum spin Hall effect and topological phase transition in HgTe quantum wells », in *Science* **314**, p. 1757-1761.
- BERRY, M. V. (1984), « Quantal phase factors accompanying adiabatic changes », in *Proc. Roy. Soc. London A* **392**, p. 45-57.
- (1989), « The Quantum Phase, Five Years After », in *Geometric Phases in Physics*, sous la dir. d'A. SHAPER & F. WILCZEK, Singapore : World Scientific, , p. 7-28.
- BILITEWSKI, Thomas & Nigel R. COOPER (2015a), « Population dynamics in a Floquet realization of the Harper-Hofstadter Hamiltonian », in *Phys. Rev. A* **91** (6), p. 063611.
- (2015b), « Scattering theory for Floquet-Bloch states », in *Phys. Rev. A* **91** (3), p. 033601.
- BUKOV, Marin, Luca D'ALESSIO & Anatoli POLKOVNIKOV (2015), « Universal high-frequency behavior of periodically driven systems : from dynamical stabilization to Floquet engineering », in *Advances in Physics* **64**, p. 139-226.
- CASTRO NETO, A. H., F. GUINEA, N. M. R. PERES, K. S. NOVOSELOV & A. K. GEIM (2009), « The electronic properties of graphene », in *Rev. Mod. Phys.* **81** (1), p. 109-162.
- CELI, A., P. MASSIGNAN, J. RUSECKAS, N. GOLDMAN, I. B. SPIELMAN, G. JUZELIUNAS & M. LEWENSTEIN (2014), « Synthetic Gauge Fields in Synthetic Dimensions », in *Phys. Rev. Lett.* **112** (4), p. 043001.
- CHANG, Ming-Che & Qian NIU (1995), « Berry phase, hyperorbits, and the Hofstadter spectrum », in *Physical Review Letters* **75**, p. 1348.
- CHIU, Ching-Kai, Jeffrey C. Y. TEO, Andreas P. SCHNYDER & Shinsei RYU (2016), « Classification of topological quantum matter with symmetries », in *Rev. Mod. Phys.* **88** (3), p. 035005.
- CHOUHDURY, Sayan & Erich J. MUELLER (2015), « Transverse collisional instabilities of a Bose-Einstein condensate in a driven one-dimensional lattice », in *Phys. Rev. A* **91** (2), p. 023624.
- COHEN-TANNOUDJI, C., B. DIU & F. LALOË (1973), *Mécanique Quantique*, Hermann.
- COOPER, N. R. (2011), « Optical Flux Lattices for Ultracold Atomic Gases », in *Phys. Rev. Lett.* **106**, p. 175301.
- COOPER, N. R. & J. DALIBARD (2011a), « Optical flux lattices for two-photon dressed states », in *Europhysics Letters* **95**, p. 66004.
- COOPER, Nigel R. & Jean DALIBARD (2011b), « Optical Flux Lattices for Two-Photon Dressed States », in *EPL (Europhysics Letters)* **95**, p. 66004.
- (2013), « Reaching Fractional Quantum Hall States with Optical Flux Lattices », in *Phys. Rev. Lett.* **110** (18), p. 185301.
- COOPER, NR, J DALIBARD & IB SPIELMAN (2018), « Topological Bands for Ultracold Atoms », in *arXiv :1803.00249*.
- DAREAU, A., E. LEVY, M. Bosch AGUILERA, R. BOUGANNE, E. AKKERMANS, F. GERBIER & J. BEUGNON (2017), « Revealing the Topology of Quasicrystals with a Diffraction Experiment », in *Phys. Rev. Lett.* **119** (21), p. 215304.
- DELPLACE, P, D. ULLMO & G. MONTAMBAUX (2011), « Zak phase and the existence of edge states in graphene », in *Phys. Rev. B* **84**, p. 195452.
- DUCA, L., T. LI, M. REITTER, I. BLOCH, M. SCHLEIER-SMITH & U. SCHNEIDER (2015), « An Aharonov-Bohm interferometer for determining Bloch band topology », in *Science* **347**, p. 288.
- ECKARDT, André (2017), « Colloquium : Atomic quantum gases in periodically driven optical lattices », in *Rev. Mod. Phys.* **89** (1), p. 011004.
- ECKARDT, Andre & Martin HOLTHAUS (2007), « AC-induced superfluidity », in *EPL (Europhysics Letters)* **80**, p. 50004.
- EHRENBERG, W. & R. E. SIDAY (1949), « The Refractive Index in Electron Optics and the Principles of Dynamics », in *Proceedings of the Physical Society, Series B* **62**, p. 8-21.
- FLÄSCHNER, N, BS REM, M TARNOWSKI, D VOGEL, D-S LÜHMANN, K SENGSTOCK & C WEITENBERG (2016), « Experimental reconstruction of the Berry curvature in a Floquet Bloch band », in *Science* **352**, p. 1091-1094.
- GERBIER, Fabrice & Jean DALIBARD (2010), « Gauge fields for ultracold atoms in optical superlattices », in *New Journal of Physics* **12**, p. 033007.
- GOLDMAN, N, JC BUDICH & P ZOLLER (2016), « Topological quantum matter with ultracold gases in optical lattices », in *Nature Physics* **12**, p. 639-645.
- GOLDMAN, N. & J. DALIBARD (2014), « Periodically Driven Quantum Systems : Effective Hamiltonians and Engineered Gauge Fields », in *Phys. Rev. X* **4** (3), p. 031027.
- GOLDMAN, N., J. DALIBARD, M. AIDELSBURGER & N.R. COOPER (2015), « Periodically driven quantum matter : The case of resonant modulations », in *Phys. Rev. A* **91**, p. 033632.

- GOLDMAN, Nathan, Egidijus ANISIMOVAS, Fabrice GERBIER, P ÖHBERG, IB SPIELMAN & G JUZELIŪNAS (2013), « Measuring topology in a laser-coupled honeycomb lattice : from Chern insulators to topological semimetals », in *New journal of physics* **15**, p. 013025.
- GU, Zhenghao, H. A. FERTIG, Daniel P. AROVAS & Assa AUERBACH (2011), « Floquet Spectrum and Transport through an Irradiated Graphene Ribbon », in *Phys. Rev. Lett.* **107** (21), p. 216601.
- HAFEZI, Mohammad, Eugene A DEMLER, Mikhail D LUKIN & Jacob M TAYLOR (2011), « Robust optical delay lines with topological protection », in *Nature Physics* **7**, p. 907.
- HAFEZI, Mohammad, S MITTAL, J FAN, A MIGDALL & JM TAYLOR (2013), « Imaging topological edge states in silicon photonics », in *Nature Photonics* **7**, p. 1001.
- HALDANE, F. D. M. (1988), « Model for a Quantum Hall Effect without Landau Levels : Condensed-Matter Realization of the "Parity Anomaly" », in *Phys. Rev. Lett.* **61**, p. 2015-2018.
- HALDANE, F Duncan M (1983), « Nonlinear field theory of large-spin Heisenberg antiferromagnets : semiclassically quantized solitons of the one-dimensional easy-axis Néel state », in *Physical Review Letters* **50**, p. 1153.
- HALDANE, FDM & S RAGHU (2008), « Possible realization of directional optical waveguides in photonic crystals with broken time-reversal symmetry », in *Physical Review Letters* **100**, p. 013904.
- HARARI, Gal, Miguel A. BANDRES, Yaakov LUMER, Mikael C. RECHTSMAN, Y. D. CHONG, Mercedes KHAVIKHAN, Demetrios N. CHRISTODOULIDES & Mordechai SEGEV (2018), « Topological insulator laser : Theory », in *Science* **359**, p. 1230.
- HARPER, P. G. (1955), « Single Band Motion of Conduction Electrons in a Uniform Magnetic Field », in *Proceedings of the Physical Society. Section A* **68**, p. 874-878.
- HASAN, M. Z. & C. L. KANE (2010), « Colloquium : Topological insulators », in *Rev. Mod. Phys.* **82** (4), p. 3045-3067.
- HATSUGAI, Y. & T. FUKUI (2016), « Bulk-edge correspondence in topological pumping », in *Phys. Rev. B* **94** (4), p. 041102.
- HATSUGAI, Yasuhiro (1993), « Chern number and edge states in the integer quantum Hall effect », in *Phys. Rev. Lett.* **71**, p. 3697-3700.
- HAUKE, Philipp, Maciej LEWENSTEIN & André ECKARDT (2014), « Tomography of Band Insulators from Quench Dynamics », in *Phys. Rev. Lett.* **113**, p. 045303.
- HOFSTADTER, D. R. (1976), « Energy levels and wave functions of Bloch electrons in rational and irrational magnetic fields », in *Phys. Rev. B* **14**, p. 2239-2249.
- HUANG, K. (1987), *Statistical Mechanics*, New York : Wiley.
- HUBER, Sebastian D (2016), « Topological mechanics », in *Nature Physics* **12**, p. 621.
- IEMINI, Fernando, Leonardo MAZZA, Davide ROSSINI, Rosario FAZIO & Sebastian DIEHL (2015), « Localized Majorana-Like Modes in a Number-Conserving Setting : An Exactly Solvable Model », in *Phys. Rev. Lett.* **115** (15), p. 156402.
- JACQMIN, Thibaut, Iacopo CARUSOTTO, Isabelle SAGNES, Marco ABBARCHI, DD SOLNYSHKOV, Guillaume MALPUECH, Elisabeth GALOPIN, Aristide LEMAITRE, Jacqueline BLOCH & Alberto AMO (2014), « Direct observation of Dirac cones and a flatband in a honeycomb lattice for polaritons », in *Physical Review Letters* **112**, p. 116402.
- JAKSCH, D. & P. ZOLLER (2003), « Creation of effective magnetic fields in optical lattices : the Hofstadter butterfly for cold neutral atoms », in *New Journal of Physics* **5**, p. 56.1.
- JOTZU, G., M. MESSER, R. DESBUQUOIS, M. LEBRAT, T. UEHLINGER, D. GREIF & T. ESSLINGER (2014), « Experimental realization of the topological Haldane model with ultracold fermions », in *Nature* **515**, p. 237-240.
- KANE, Charles L & Eugene J MELE (2005a), « Quantum spin Hall effect in graphene », in *Phys. Rev. Lett.* **95**, p. 226801.
- (2005b), « Z₂ topological order and the quantum spin Hall effect », in *Phys. Rev. Lett.* **95**, p. 146802.
- KARPLUS, Robert & J. M. LUTTINGER (1954), « Hall Effect in Ferromagnetics », in *Phys. Rev.* **95** (5), p. 1154-1160.
- KHANIKAEV, Alexander B & Gennady SHVETS (2017), « Two-dimensional topological photonics », in *Nature Photonics* **11**, p. 763.
- KITAEV, A. Y. (2001), « Unpaired Majorana fermions in quantum wires », in *Physics Uspekhi* **44**, p. 131.
- KOHMOTO, M. (1985), « Topological Invariant and the Quantization of the Hall Conductance », in *Annals of Physics* **160**, p. 343-354.
- KOLKOWITZ, S, SL BROMLEY, T BOTHWELL, ML WALL, GE MARTI, AP KOLLER, X ZHANG, AM REY & J YE (2017), « Spin-orbit-coupled fermions in an optical lattice clock », in *Nature* **542**, p. 66.
- KÖNIG, Markus, Steffen WIEDMANN, Christoph BRÜNE, Andreas ROTH, Hartmut BUHMANN, Laurens W MOLENKAMP, Xiao-Liang QI & Shou-

- Cheng ZHANG (2007), « Quantum spin Hall insulator state in HgTe quantum wells », in *Science* **318**, p. 766-770.
- KRAUS, Yaacov E & Oded ZILBERBERG (2016), « Quasiperiodicity and topology transcend dimensions », in *Nature Physics* **12**, p. 624.
- LAZARIDES, Achilleas, Arnab DAS & Roderich MOESSNER (2014), « Periodic Thermodynamics of Isolated Quantum Systems », in *Phys. Rev. Lett.* **112** (15), p. 150401.
- LELLOUCH, S., M. BUKOV, E. DEMLER & N. GOLDMAN (2017), « Parametric Instability Rates in Periodically Driven Band Systems », in *Phys. Rev. X* **7** (2), p. 021015.
- LIU, Xiong-Jun, Kam-Tuen LAW, Tai-Kai NG & Patrick A LEE (2013), « Detecting topological phases in cold atoms », in *Phys. Rev. Lett* **111**, p. 120402.
- LIVI, LF, G CAPPELLINI, M DIEM, L FRANCHI, C CLIVATI, M FRITTELLI, F LEVI, D CALONICO, J CATANI, M INGUSCIO et al. (2016), « Synthetic dimensions and spin-orbit coupling with an optical clock transition », in *Phys. Rev. Lett.* **117**, p. 220401.
- LODAHL, Peter, Sahand MAHMOODIAN, Søren STOBBE, Arno RAUSCHENBEUTEL, Philipp SCHNEEWEISS, Jürgen VOLZ, Hannes PICHLER & Peter ZOLLER (2017), « Chiral quantum optics », in *Nature* **541**, p. 473.
- LOHSE, M., C. SCHWEIZER, O. ZILBERBERG, M. AIDELSBURGER & I. BLOCH (avr. 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.
- LU, Ling, John D JOANNOPOULOS & Marin SOLJAČIĆ (2014), « Topological photonics », in *Nature Photonics* **8**, p. 821.
- (2016), « Topological states in photonic systems », in *Nature Physics* **12**, p. 626.
- MAJORANA, Ettore (1937), « Teoria simmetrica dell'elettrone e del positrone », in *Il Nuovo Cimento (1924-1942)* **14**, p. 171.
- MANCINI, M, G PAGANO, G CAPPELLINI, L LIVI, M RIDER, J CATANI, C SIAS, P ZOLLER, M INGUSCIO, M DALMONTE et al. (2015), « Observation of chiral edge states with neutral fermions in synthetic Hall ribbons », in *Science* **349**, p. 1510-1513.
- MEAD, C. Alden & Donald G. TRUHLAR (1979), « On the determination of Born–Oppenheimer nuclear motion wave functions including complications due to conical intersections and identical nuclei », in *J. Chem. Phys.* **70**, p. 2284-2296.
- MESSIAH, A. (1961), *Quantum Mechanics, Chapter XVII, § 13*, t. II, Amsterdam : North-Holland Publishing Company.
- (2003), *Mécanique Quantique*, Dunod.
- MIKITIK, G. P. & Yu. V. SHARLAI (1999), « Manifestation of Berry's Phase in Metal Physics », in *Phys. Rev. Lett.* **82**, p. 2147-2150.
- MILIĆEVIĆ, Marijana, Tomoki OZAWA, Gilles MONTAMBAUX, Iacopo CARUSOTTO, Elisabeth GALOPIN, Aristide LEMAÎTRE, L LE GRATIET, Isabelle SAGNES, Jacqueline BLOCH & Alberto AMO (2017), « Orbital edge states in a photonic honeycomb lattice », in *Physical Review Letters* **118**, p. 107403.
- MIYAKE, Hirokazu, Georgios A. SIVIOGLOU, Colin J. KENNEDY, William Cody BURTON & Wolfgang KETTERLE (2013), « Realizing the Harper Hamiltonian with Laser-Assisted Tunneling in Optical Lattices », in *Phys. Rev. Lett.* **111** (18), p. 185302.
- MONTAMBAUX, G., F. PIÉCHON, J.-N. FUCHS & M. O. GOERBIG (2009), « Merging of Dirac points in a two-dimensional crystal », in *Phys. Rev. B* **80** (15), p. 153412.
- MOURIK, Vincent, Kun ZUO, Sergey M FROLOV, SR PLISSARD, Erik PAM BAKKERS & Leo P KOUWENHOVEN (2012), « Signatures of Majorana fermions in hybrid superconductor-semiconductor nanowire devices », in *Science* **336**, p. 1003-1007.
- NADJ-PERGE, Stevan, Ilya K DROZDOV, Jian LI, Hua CHEN, Sangjun JEON, Jungpil SEO, Allan H MACDONALD, B Andrei BERNEVIG & Ali YAZDANI (2014), « Observation of Majorana fermions in ferromagnetic atomic chains on a superconductor », in *Science* **346**, p. 602-607.
- 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.
- NASCIMBENE, Sylvain (2013), « Realizing one-dimensional topological superfluids with ultracold atomic gases », in *J. Phys. B : At. Mol. Opt. Phys.* **46**, p. 134005.
- OKA, Takashi & Hideo AOKI (2009), « Photovoltaic Hall effect in graphene », in *Phys. Rev. B* **79** (8), p. 081406.

- 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*.
- PANCHARATNAM, S. (1956), « Generalized Theory of Interference, and Its Applications. Part I. Coherent Pencils », in *Proc. Indian Acad. Sci. A* **44**, p. 247-262.
- POLI, Charles, Matthieu BELLEC, Ulrich KUHLMANN, Fabrice MORTESSAGNE & Henning SCHOMERUS (2015), « Selective enhancement of topologically induced interface states in a dielectric resonator chain », in *Nature communications* **6**, p. 6710.
- QI, Xiao-Liang & Shou-Cheng ZHANG (2011), « Topological insulators and superconductors », in *Rev. Mod. Phys.* **83** (4), p. 1057-1110.
- RAHAV, Saar, Ido GILARY & Shmuel FISHMAN (2003), « Effective Hamiltonians for periodically driven systems », in *Phys. Rev. A* **68** (1), p. 013820.
- RECHTSMAN, Mikael C, Julia M ZEUNER, Yonatan PLOTNIK, Yaakov LUMER, Daniel PODOLSKY, Felix DREISOW, Stefan NOLTE, Mordechai SEGEV & Alexander SZAMEIT (2013a), « Photonic Floquet topological insulators », in *Nature* **496**, p. 196.
- RECHTSMAN, Mikael C, Julia M ZEUNER, Andreas TÜNNERMANN, Stefan NOLTE, Mordechai SEGEV & Alexander SZAMEIT (2013b), « Strain-induced pseudomagnetic field and photonic Landau levels in dielectric structures », in *Nature Photonics* **7**, p. 153.
- REPELLIN, Cécile & Nicolas REGNAULT (2018), « Lattices for fractional Chern insulators », in *Science* **360**, p. 31-32.
- RICE, MJ & EJ MELE (1982), « Elementary excitations of a linearly conjugated diatomic polymer », in *Physical Review Letters* **49**, p. 1455.
- RUHMAN, Jonathan, Erez BERG & Ehud ALTMAN (2015), « Topological States in a One-Dimensional Fermi Gas with Attractive Interaction », in *Phys. Rev. Lett.* **114** (10), p. 100401.
- ST-JEAN, P, V GOBLOT, E GALOPIN, A LEMAÎTRE, T OZAWA, L LE GRATIET, I SAGNES, J BLOCH & A AMO (2017), « Lasing in topological edge states of a one-dimensional lattice », in *Nature Photonics* **11**, p. 651.
- STUHL, BK, H-I LU, LM AYCOCK, D GENKINA & IB SPIELMAN (2015), « Visualizing edge states with an atomic Bose gas in the quantum Hall regime », in *Science* **349**, p. 1514-1518.
- SU, W. P., J. R. SCHRIEFFER & A. J. HEEGER (1979), « Solitons in Polyacetylene », in *Phys. Rev. Lett.* **42**, p. 1698-1701.
- SUN, Wei, Bao-Zong WANG, Xiao-Tian XU, Chang-Rui YI, Long ZHANG, Zhan WU, Youjin DENG, Xiong-Jun LIU, Shuai CHEN & Jian-Wei PAN (2017), « Long-lived 2D Spin-Orbit coupled Topological Bose Gas », in *ArXiv eprints*, p. 1710.00717.
- TARRUELL, Leticia, Daniel GREIF, Thomas UEHLINGER, Gregor JOTZU & Tilman ESSLINGER (2012), « Creating, moving and merging Dirac points with a Fermi gas in a tunable honeycomb lattice », in *Nature* **483**, p. 302.
- THOULESS, D. J. (1983), « Quantization of particle transport », in *Phys. Rev. B* **27**, p. 6083-6087.
- THOULESS, D. J., M. KOHMOTO, M. P. NIGHTINGALE & M. den NIJS (1982), « Quantized Hall Conductance in a Two-Dimensional Periodic Potential », in *Phys. Rev. Lett.* **49**, p. 405-408.
- TORRENT, Daniel & José SÁNCHEZ-DEHESA (2012), « Acoustic analogue of graphene : observation of Dirac cones in acoustic surface waves », in *Physical Review Letters* **108**, p. 174301.
- VELASCO, Carlos G & Belén PAREDES (2017), « Realizing and Detecting a Topological Insulator in the AIII Symmetry Class », in *Physical Review Letters* **119**, p. 115301.
- VON KLITZING, Klaus (1986), « The quantized Hall effect », in *Reviews of Modern Physics* **58**, p. 519.
- WANG, Zheng, Yidong CHONG, John D JOANNOPOULOS & Marin SOLJAČIĆ (2009), « Observation of unidirectional backscattering-immune topological electromagnetic states », in *Nature* **461**, p. 772.
- WEIMANN, S, M KREMER, Y PLOTNIK, Y LUMER, S NOLTE, KG MAKRIS, M SEGEV, MC RECHTSMAN & A SZAMEIT (2017), « Topologically protected bound states in photonic parity–time-symmetric crystals », in *Nature materials* **16**, p. 433.
- WILLIAMS, R. A., L. J. LEBLANC, K. JIMENEZ-GARCIA, M. C. BEELER, A. R. PERRY, W. D. PHILLIPS & I. B. SPIELMAN (2012), « Synthetic Partial Waves in Ultracold Atomic Collisions », in *Science* **335**, p. 314-317.
- 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.
- WU, Long-Hua & Xiao HU (2015), « Scheme for achieving a topological photonic crystal by using dielectric material », in *Physical review letters* **114**, p. 223901.
- WU, Zhan, Long ZHANG, Wei SUN, Xiao-Tian XU, Bao-Zong WANG, Si-Cong Ji, Youjin DENG, Shuai CHEN, Xiong-Jun LIU & Jian-Wei PAN

- (2016), « Realization of two-dimensional spin-orbit coupling for Bose-Einstein condensates », in *Science* **354**, p. 83-88.
- XIAO, Di, Ming-Che CHANG & Qian NIU (2010), « Berry phase effects on electronic properties », in *Rev. Mod. Phys.* **82** (3), p. 1959-2007.
- YAN, Zhongbo, Shaolong WAN & Zhong WANG (2015), « Topological Superfluid and Majorana Zero Modes in Synthetic Dimension », in *Scientific Reports* **5**, p. 15927.
- ZAK, J. (1989), « Berry's phase for energy bands in solids », in *Phys. Rev. Lett.* **62** (23), p. 2747-2750.
- ZHANG, Chuanwei, Sumanta TEWARI, Roman M. LUTCHYN & S. DAS SARMA (2008a), « $p_x + ip_y$ Superfluid from s -Wave Interactions of Fermionic Cold Atoms », in *Phys. Rev. Lett.* **101** (16), p. 160401.
- (2008b), « $p_x + ip_y$ Superfluid from s -Wave Interactions of Fermionic Cold Atoms », in *Phys. Rev. Lett.* **101** (16), p. 160401.
- ZHANG, Peng, Koichiro YAJI, Takahiro HASHIMOTO, Yuichi OTA, Takeshi KONDO, Kozo OKAZAKI, Zhijun WANG, Jinsheng WEN, GD GU, Hong DING et al. (2018), « Observation of topological superconductivity on the surface of an iron-based superconductor », in *Science*, p. 4596.
- ZHANG, Shou-Cheng & Jiangping HU (2001), « A four-dimensional generalization of the quantum Hall effect », in *Science* **294**, p. 823-828.