Introduction aux isolants topologiques

Laurent Lévy
Institut Néel, Université de Grenoble

Plan

- Cours n° 1: Structure de bandes topologiques des solides

  - Structure de bande des solides; espace fibré de la physique quantique
  - Phase, courbure de Berry et indice de Chern
  - Mouvement semi-classique en présence de courbure de Berry
  - Application au mouvement en champ magnétique: mouvement semi-classique, quantification de Hall, application de la formule de Streda. Effets magnéto-galvanométriques

  Théorème TKNN: la conductance de Hall comme invariant topologique

  - Les isolants topologique a 2D - Le modèle BZH
  - Observabilité de la phase de Berry: la polarisation électrique des solides

  - Les isolants topologiques 3D

- Cours n° 2: Les états de surface des isolants topologiques

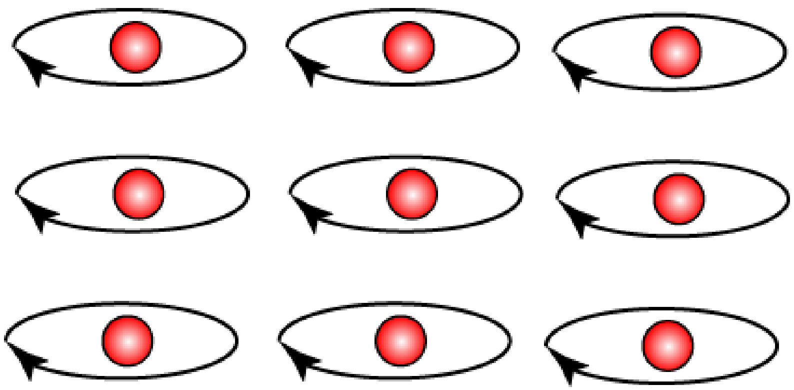
- 3D: l'inversion de bande et les états de surfaces; le modèle le plus simple des états de surface
- L'ARPES (spectroscopie de photoémission résolue en angle)
- Exemples de structure de bandes expérimentales; Bi2Te3, HgTe. La chiralité des états de surface (résolution en spin et dichroisme).
- Exemple de système polaire BiTeI: le rôle de l'interaction Rashba (spin orbite)
- calcul réaliste de structure de bande: le modèle de Kane (semiconducteur Zinc-Blende)
- Applications au tellurure de Mercure: spectre ARPES, dichroisme circulaire et polarisation de spin

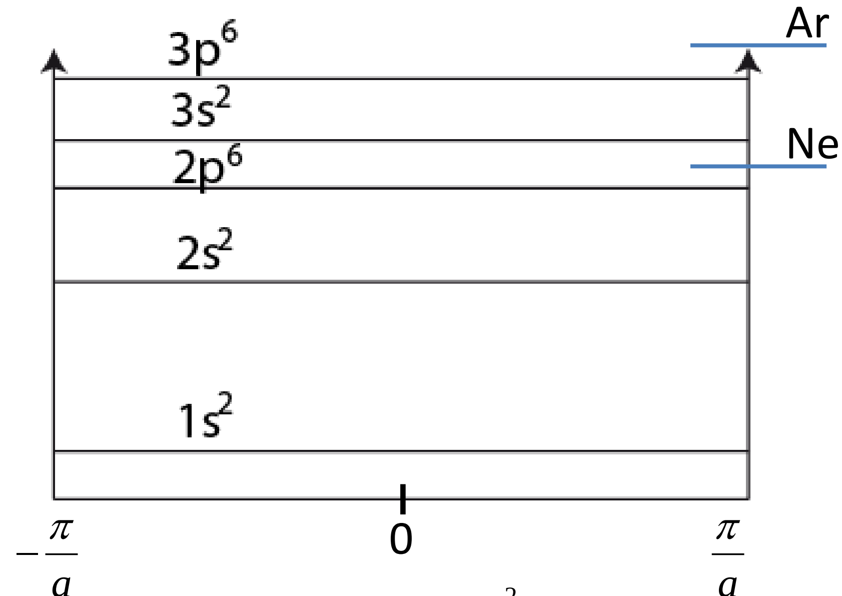
- Cours n° 3: Les propriétés de transports

- 2D: Effet Hall de spin: expériences multicontacts, le filtrage et la détection du spin: premiers pas vers la spintronique des isolants topologiques
- 3D: Propriétés des fermions de Dirac chiraux (différences avec le graphene)
- L'effet de la phase de Berry et l'anti-localisation en présence de désordre
- La quantification de Hall, le diagramme des phases de Hall des isolants topologique

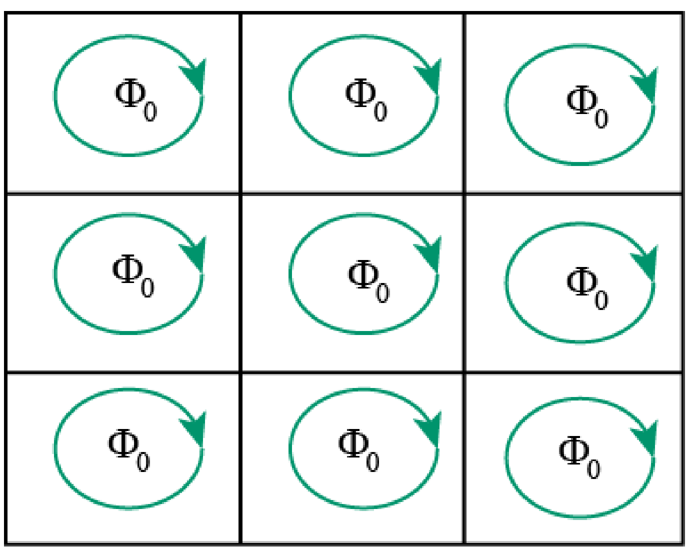
Isolants vs états de Hall quantique

Argon solide: isolant atomique



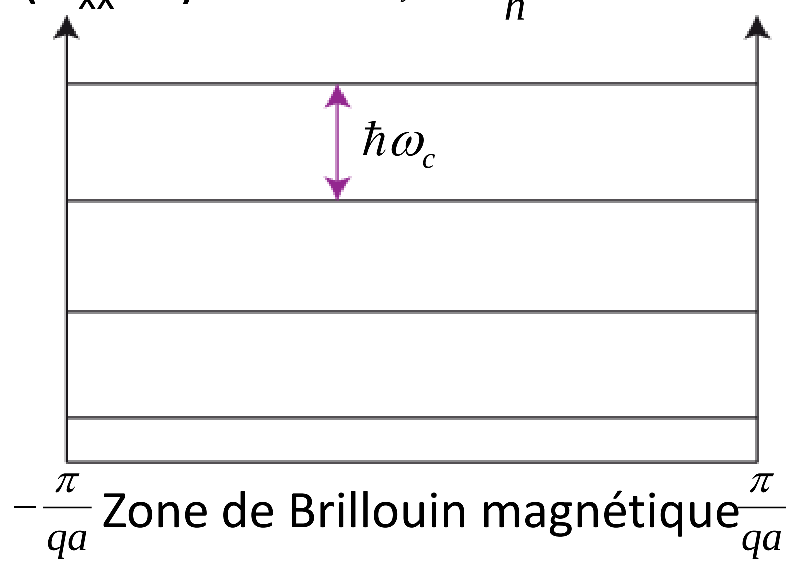


Etat de Hall quantique: « isolant » 2D (σ_{xx}=0) mais $\sigma_{xy} = n\frac{e^2}{h}$



B

Niveaux de Landau

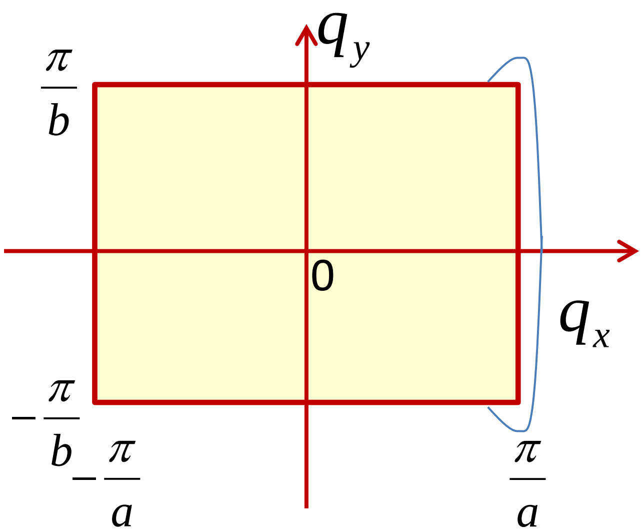


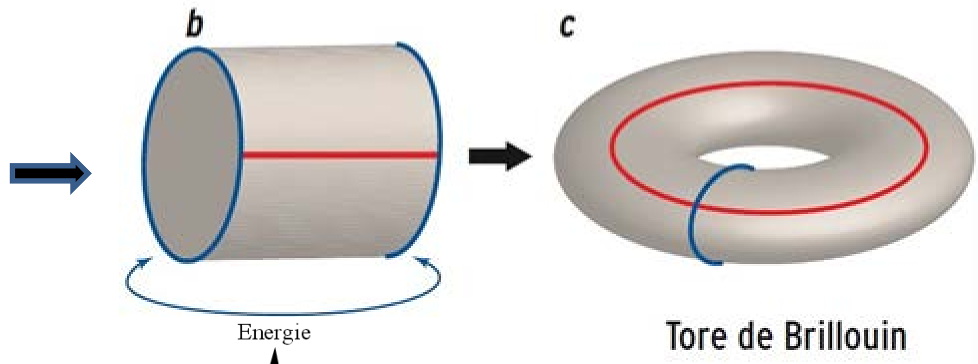
Théorie des bandes dans les solides

$$H=\frac{p^2}{2m}+V(\vec r) \qquad V(\vec r+\vec R_n)=V(\vec r)$$

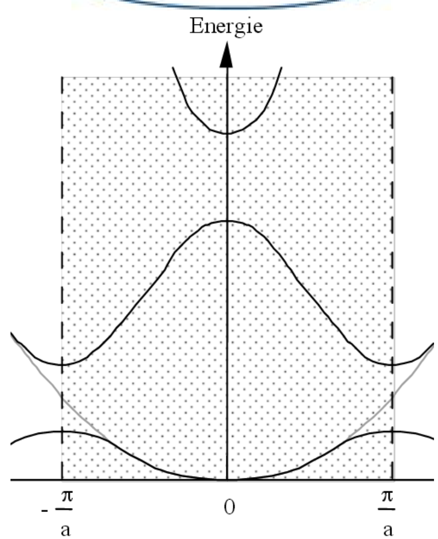
Théorème de Bloch

$$T(\vec R_n)|\psi_{\vec q}\rangle=e^{i\vec q\bullet\vec R_n}|\psi_{\vec q}\rangle,\ |\psi_{\vec q}\rangle=e^{i\vec q\bullet\vec r}|u_{\vec q}\rangle \quad H(\vec q)=e^{-i\vec q\bullet\vec r}He^{i\vec q\bullet\vec r} \quad H(\vec q)|u^n_{\vec q}\rangle=\varepsilon_n|u^n_{\vec q}\rangle$$





Structure de bande



Correspondance

$$\vec q\to\{\varepsilon_n(q),u_n(q)\}$$

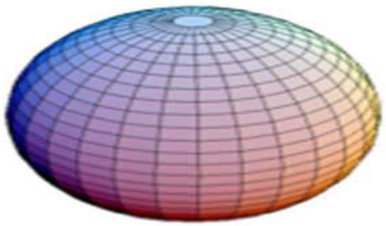
Deux représentations

$$\psi^n_{\vec q}(\vec r)=e^{i\vec q\bullet\vec r}u^n_q(\vec r) \quad \text{Bloch}$$

$$w^n(r)=\int d^2q e^{i\vec q\bullet\vec r}u^n_{\vec k}(r) \quad \text{Wannier}$$

$$\psi^n_{\vec q}(\vec r)=\sum_i e^{-i\vec q\bullet\vec R_i}w^n(\vec r-\vec R_i)$$

Invariant de surface (théorème de Gauss-Bonnet)

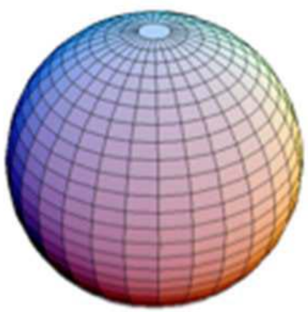


Courbure gaussienne

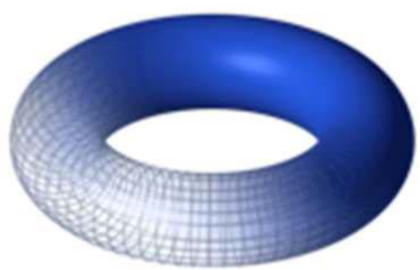
$$\kappa = \frac{1}{R_1 R_2}$$

R_1, R_2 rayons de courbure locale

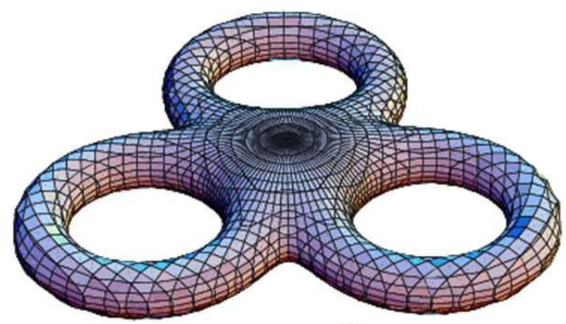
Surfaces fermées: théorème de Gauss-Bonnet



$g = 0$



$g = 1$



$g = 3$

$$\iint_S d^2 S \kappa = 2\pi(2 - 2g)$$

g, genre de la surface (entier≡nombre de trous)

Généralisation: indice de Chern des espaces fibrés

L'espace fibré de la physique quantique

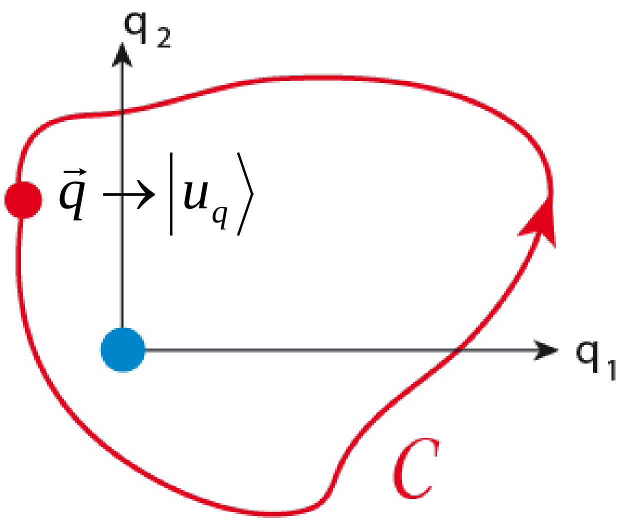
$$H = \gamma \vec{\sigma} \bullet \vec{B}$$

$$H = \frac{\left(\hbar \vec{q} + e\vec{A}\right)^2}{2m} + U_{res}(\vec{r})$$

$$[\vec{q}, H] = 0$$

$$H|u_q\rangle = \varepsilon_q |u_q\rangle$$

$$P|u_q\rangle = \hbar q |u_q\rangle$$



Espace des états $\{ |u_q> \}$ (espace de Hilbert)
Espace fibré: correspondance entre
q (Zone de Brillouin, paramètres (B, V_g))
$\rightarrow$ Espace des états $\{ |u_q> \}$

<u>Topologie: propriétés globales de cette correspondance</u>

Cas importants: l'espace sous-jacent (Zone de Brillouin, paramètres (flux magnétique, charge) est périodique

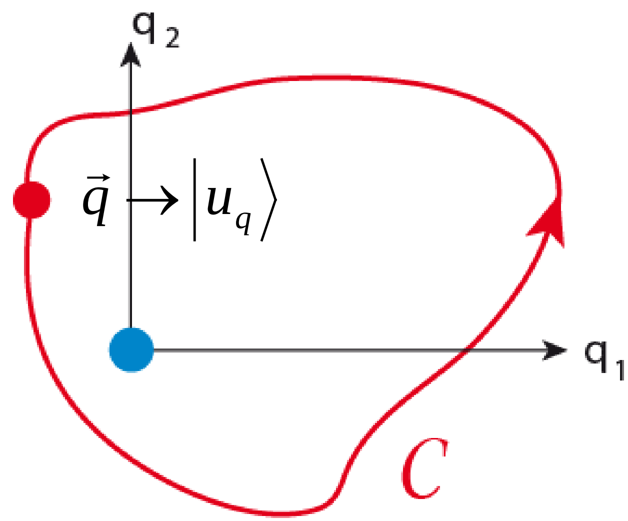
La phase de Berry en physique quantique

Ambigüité de la phase en physique quantique

$$|u_q\rangle \to e^{i\phi_q}|u_q\rangle$$

$$|u_{q0}\rangle \to e^{i\gamma_C}|u_{q0}\rangle$$

$$\underbrace{\gamma_C}_{\text{Phase de Berry}} = i\oint_C \underbrace{\langle u_q | du_q\rangle}_{\text{transport parallèle}}$$



Connection de Berry

$$\vec{A}(\vec{q}) = i\langle u_{\vec{q}}|\vec{\nabla}_{\vec{q}}|u_{\vec{q}}\rangle$$

Courbure de Berry

$$\vec{F} = \vec{\nabla}_{\vec{q}} \times \vec{A}_q$$

Comme un potentiel vecteur

$$|u_q\rangle \to e^{i\phi_q}|u_q\rangle, \vec{A}(\vec{q}) \to \vec{A}(\vec{q}) + \vec{\nabla}\phi_q$$

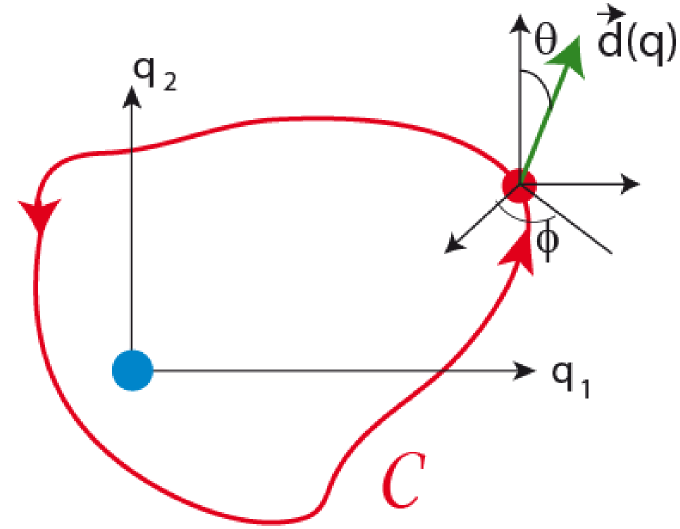
<u>Exemple important</u>: la phase de Berry des spins-1/2

γ_C ne dépend pas du choix de la phase de $|u_q>$

$$\gamma_C = \iint_C \vec{F} \bullet \hat{n} dS$$

Flux de F à travers la surface C $\Rightarrow$ devient l'indice de Chern pour des surfaces fermées

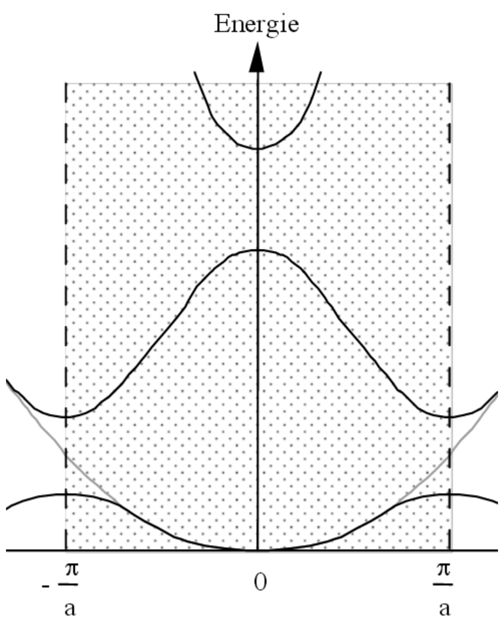
La phase de Berry de deux bandes (spin-1/2)



$$H(\vec{q}) = \vec{\sigma} \bullet \vec{d}(\vec{q}) = \begin{pmatrix} d_z(\vec{q}) & d_-(\vec{q}) \\ d_+(\vec{q}) & -d_z(\vec{q}) \end{pmatrix}$$

$$\varepsilon_\pm(\vec{q}) = \pm\left|\vec{d}(\vec{q})\right|$$

$$|+\rangle_q = \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{\theta_q}{2}\right) \\ e^{i\phi}\sin\left(\frac{\theta_q}{2}\right) \end{pmatrix}, |-\rangle_q = \begin{pmatrix} -\sin\left(\frac{\theta_q}{2}\right) \\ e^{i\phi}\cos\left(\frac{\theta_q}{2}\right) \end{pmatrix},$$



Cas d’une rotation de $\vec{d}$ autour de z (θ const),

$$d|+\rangle_q = i\begin{pmatrix} 0 \\ e^{i\phi}\sin\left(\frac{\theta_q}{2}\right) \end{pmatrix} d\phi$$

angle solide convert par $\vec{d}$

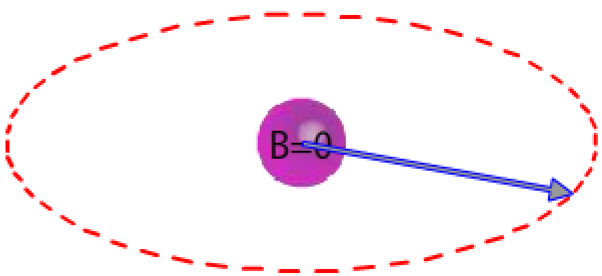
$$\gamma_C = i\oint_C {}_q\langle + | d + \rangle_q = -\sin^2\frac{\theta}{2}\int_0^{2\pi} d\phi = \pi(1-\cos\theta) = \Omega$$

Phase de Berry d'un spin ½ dans un champ magnétique tournant: ruban de Moebius

$$H = B_x \sigma_x + B_z \sigma_z$$

$$|\uparrow\rangle = \begin{bmatrix} \cos(\theta/2) \\ \sin(\theta/2) \end{bmatrix}$$

$.d\ell$



$$\phi_B = \int \langle \chi_\uparrow(\theta) | \partial_\theta \, \chi_\uparrow(\theta) \rangle d\theta =$$

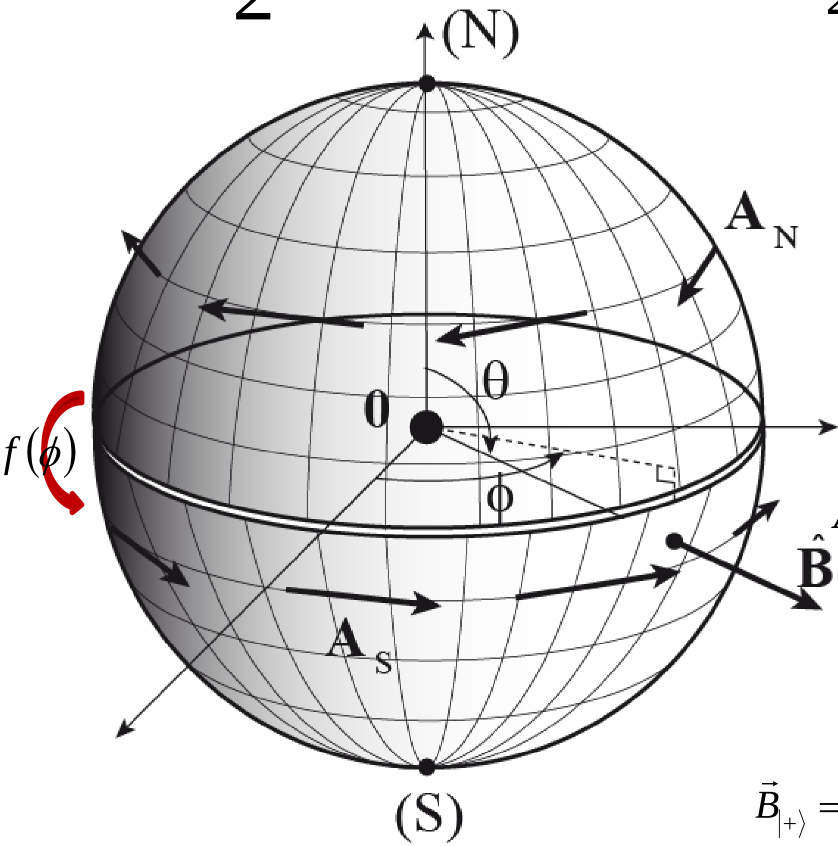
$$\int \quad \vec{A}$$

Cas d'un spin dans un champ magnétique orientable (sphère→sphère): notion d'indice de Chern

$$H=\frac{b}{2}\vec{\sigma}\bullet\hat{B}$$

$$\varepsilon_{\pm}=\pm\frac{b}{2}$$

$$|+\rangle=\begin{pmatrix}\cos\left(\frac{\theta}{2}\right)\\ e^{i\phi}\sin\left(\frac{\theta}{2}\right)\end{pmatrix},|-\rangle=\begin{pmatrix}-\sin\left(\frac{\theta}{2}\right)\\ e^{i\phi}\cos\left(\frac{\theta}{2}\right)\end{pmatrix},$$



$$\vec{\nabla}|+\rangle=\frac{1}{2}\begin{pmatrix}-\sin\left(\frac{\theta}{2}\right)\\ e^{i\phi}\cos\left(\frac{\theta}{2}\right)\end{pmatrix}\hat{e}_{\theta}+\frac{i}{b\sin\theta}\begin{pmatrix}\cos\left(\frac{\theta}{2}\right)\\ e^{i\phi}\sin\left(\frac{\theta}{2}\right)\end{pmatrix}\hat{e}_{\phi}$$

$$\vec{A}^{N}_{|+\rangle}=\langle+|\vec{\nabla}+\rangle=\frac{\cos\theta-1}{2b\sin\theta}\hat{e}_{\phi}\qquad \vec{A}^{S}_{|+\rangle}=\langle+|\vec{\nabla}+\rangle=\frac{1+\cos\theta}{2b\sin\theta}\hat{e}_{\phi}$$

Vector potential of
a monopole of "charge" ½

$$\vec{B}_{|+\rangle}=\vec{\nabla}\times\vec{A}_{|+\rangle}=-\frac{\vec{b}}{2|b|^{3}}$$

$$\vec{\nabla}\bullet\vec{B}_{|+\rangle}=-\frac{1}{2}\delta\left(\vec{b}\right)$$

$$\boxed{\begin{aligned}C_{|+\rangle}&=\frac{1}{2\pi}\iint\vec{B}\bullet\hat{n}dS=-\frac{1}{2\pi}\frac{1}{2b^{2}}4\pi b^{2}=-1\\ C_{|-\rangle}&=1\end{aligned}}$$

$$f(\phi)=A^{N}\left(\frac{\pi}{2},\phi\right)-A^{S}\left(\frac{\pi}{2},\phi\right)=-\frac{1}{b}$$

$$\int_{0}^{2\pi}f(\phi)d\phi=-\frac{1}{b}\times 2\pi b=2\pi C$$

Mouvement semiclassique des états de Bloch

Rappel: états de Bloch dans un potentiel périodique

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

Connection de Berry's $\vec{A}^{n}(\vec{q}) = i\iint d^{3}r u_{\vec{q}}^{n*}(\vec{r})\vec{\nabla}_{\vec{q}} u_{\vec{q}}^{n}(\vec{r})$

Position moyenne $\vec{r} = \dfrac{\vec{\nabla}_{\vec{q}}}{i} + \vec{A}_{\vec{q}}$ $\quad \mathbf{F}(\vec{q}) = \vec{\nabla}_{q} \times \vec{A}(\vec{q})$

$$[r_a, r_b] = i\varepsilon^{abc}\mathbf{F}_c(q)$$

Les coordonnées ne commutent pas !

$$\boxed{\begin{aligned} \hbar\frac{d\vec{q}}{dt} &= e\vec{E} + e\frac{d\vec{r}}{dt}\times\vec{B} \\ \hbar\frac{d\vec{r}}{dt} &= \vec{\nabla}_{q}\varepsilon_{n}(\vec{q}) + \hbar\frac{d\vec{q}}{dt}\times\vec{\mathbf{F}}_{n} \end{aligned}}$$

La courbure de Berry a le même effet dans l'espace des q qu'un champ magnétique dans l'espace réel

Dualité entre l'espace des q et l'espace réel

Effet de B et F sur le volume de l'espace des phases

$$\hbar\begin{pmatrix} \frac{e}{\hbar}\varepsilon_{abc}B^c(\vec{r}) & -\delta_a^b \\ \delta_b^a & \varepsilon_{abc}\mathbf{F}^c(\vec{q}) \end{pmatrix}\frac{d}{dt}\begin{pmatrix} r^b \\ q^b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \nabla_a U(\vec{r}) \\ \nabla_{q_a}\varepsilon_n(\vec{q}) \end{pmatrix}$$

$$-i\begin{pmatrix} [q_a, q_b] & [q_a, r_b] \\ [r_a, q_b] & [r_a, r_b] \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} \nabla_a H(\vec{r}, \vec{q})) \\ \nabla_{q_a} H(\vec{r}, \vec{q}) \end{pmatrix}$$

$$H(\vec{r}, \vec{q}) = \varepsilon_n(\vec{q}) + U(\vec{r})$$

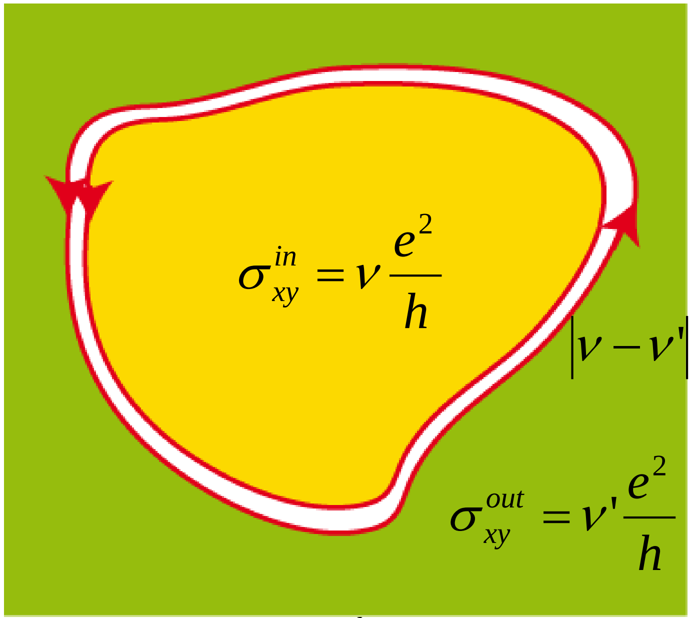
Crochets de Poisson
(commutateurs)

Jacobien

$$J(\vec{q}) = \det|\cdots| = 1 + \varepsilon_{abc}\mathbf{F}^b(\vec{q})\frac{eB^c}{\hbar}$$

Affecte le volume à intégrer
dans l'espace des phases

Formule de Strěda



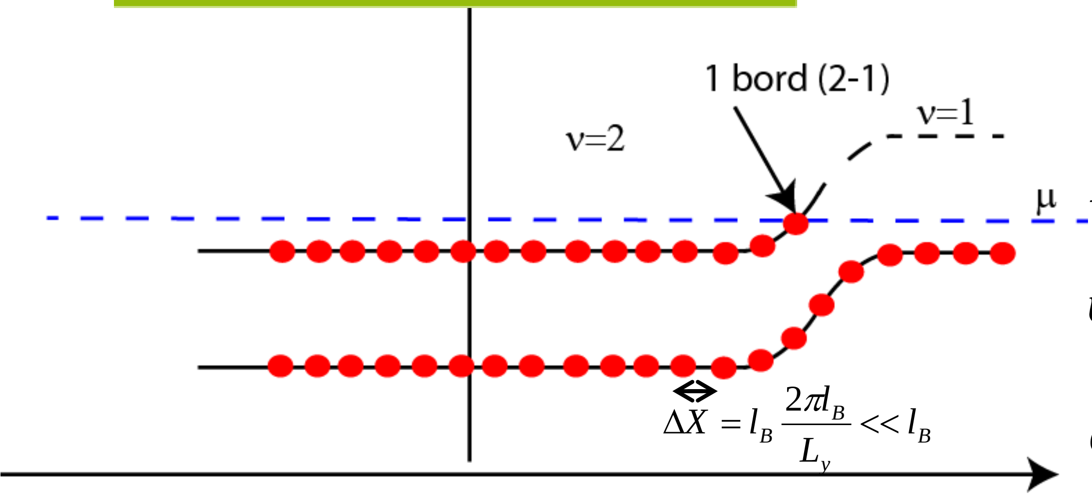
$$\sigma_{ab} = \left(\frac{\partial J_a}{\partial E_b} - \frac{\partial J_b}{\partial E_a} \right) = \frac{e^2}{h} \varepsilon_{abc} \frac{K_c}{2\pi}$$ (compressibilité)

$$\frac{K_c}{2\pi} = \frac{h}{e} \frac{\partial n}{\partial B}\Big|_{\mu, T=0} \qquad n = \iint d^2 q J(\vec{q}) n(\vec{q})$$ occupation de Fermi

états de bords chiraux

Filaments de largeur l_B, le long d'équipotentielles

Jauge de Landau $\vec{A} = Bx\hat{y}$ $\qquad \hbar v_y = \frac{\partial \varepsilon_q}{\partial q} = \frac{\partial U(X_q)}{\partial q}$



$$H = \frac{(p + eA)^2}{2m} + U(x)$$ X_m=centre de « guidage »

$$\psi_n(x, y) = \phi_n(x - X_m) e^{i q_m y}$$

$$q_m = \frac{2m\pi}{L_y}, X_m = q_m l_B^2, l_B = \sqrt{\frac{\hbar}{eB}}$$

Application de la formule de Strěda

Gaz d'électrons libres

$$\sigma_D = n\frac{e^2\tau}{m} \quad \rightarrow \sigma_{xy} = \sigma_D \frac{\omega_c\tau}{1+\omega_c^2\tau^2} \approx \frac{\sigma_D}{\omega_c\tau} = \frac{ne}{B}$$

$$\rho = ne = \sigma_{xy} B$$

$$K = \frac{\partial \rho}{\partial B} = \sigma_{xy}$$

Effet Hall quantique (porteurs massiques)

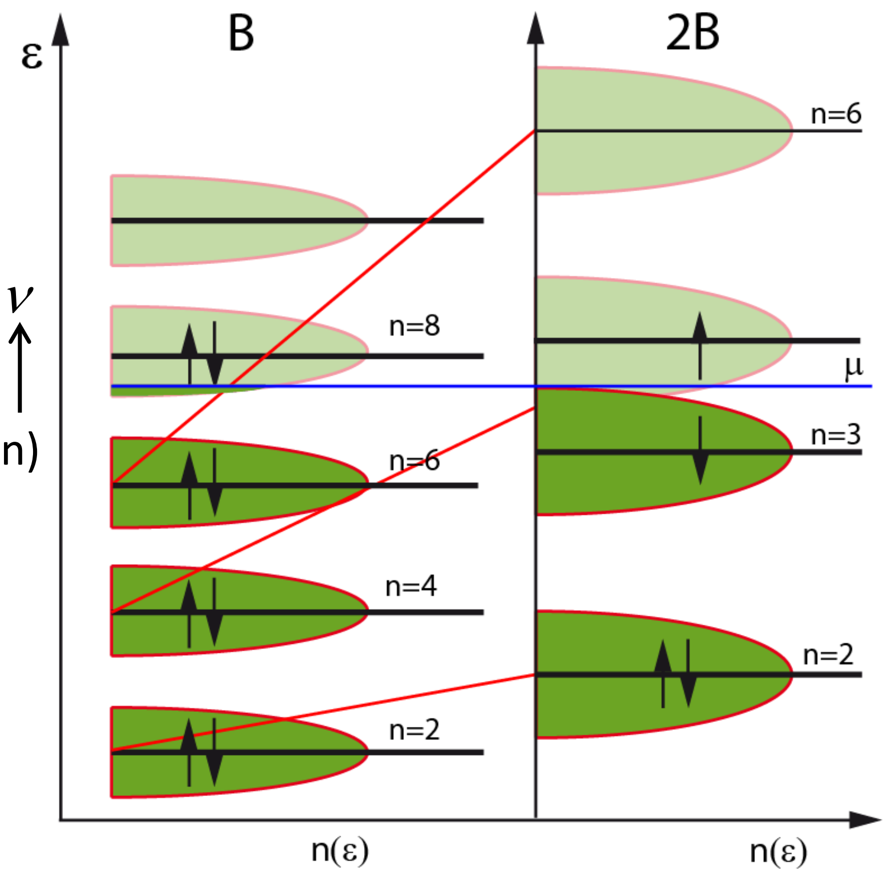
niveaux de Landau $\varepsilon_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\frac{eB}{m}$

$$N = g\frac{\Phi}{\Phi_0} = g\frac{e}{h}BS$$

$$\boxed{\sigma_{xy} = \frac{\partial \rho}{\partial B} = \nu\frac{e^2}{h}}$$

$$\rho = ne = e\frac{N}{S} = \frac{e^2}{h}B\nu$$

de niveaux de Landau remplis (incl. deg. de spin)



électrons sans int. sans états étendus au niveau de Fermi: ν entier

Généralisation (FQHE)

$$\nu = \frac{q}{2q+1}, \frac{q+1}{2q+1}$$

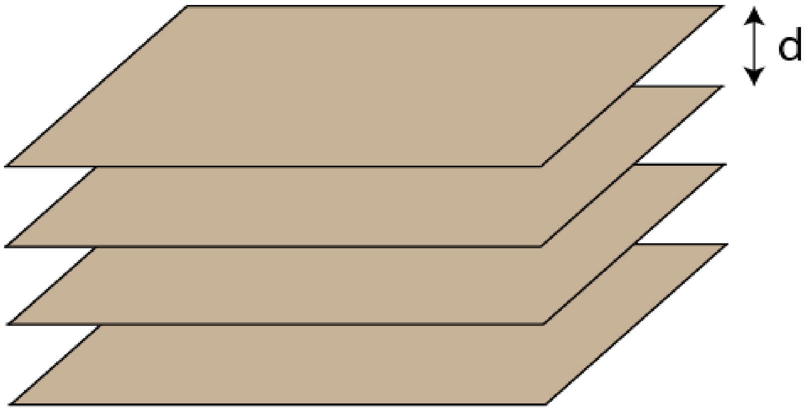
q de niveaux de fermions composites remplis

Application de la formule de Strěda – cont.

Généralisation a 3D

Pas d'états étendus (bulk) au niveau de Fermi

Réseau de plans 2D périodiques
(organiques, graphène)



$$\sigma_{ab} = \frac{1}{2\pi}\frac{e^2}{h}\varepsilon_{abc}G^c \rightarrow \frac{e^2}{h}\frac{n}{d}$$

$$G = \frac{2\pi}{d}$$ vecteur du réseau réciproque

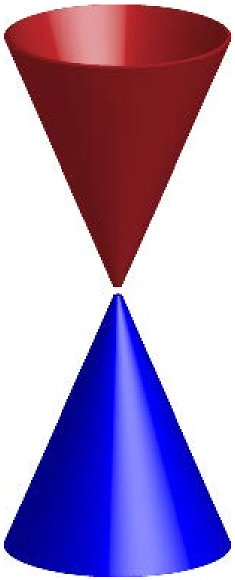
Graphene, états de surface des isolants topologique

$$\varepsilon(q) = \hbar cq \qquad \varepsilon_n = \hbar c\sqrt{2enB}$$

$$N = g\frac{\Phi}{\Phi_0} = g\frac{e}{h}BS \qquad \rho = ne = e\frac{N}{S} = \frac{e^2}{h}B\nu$$

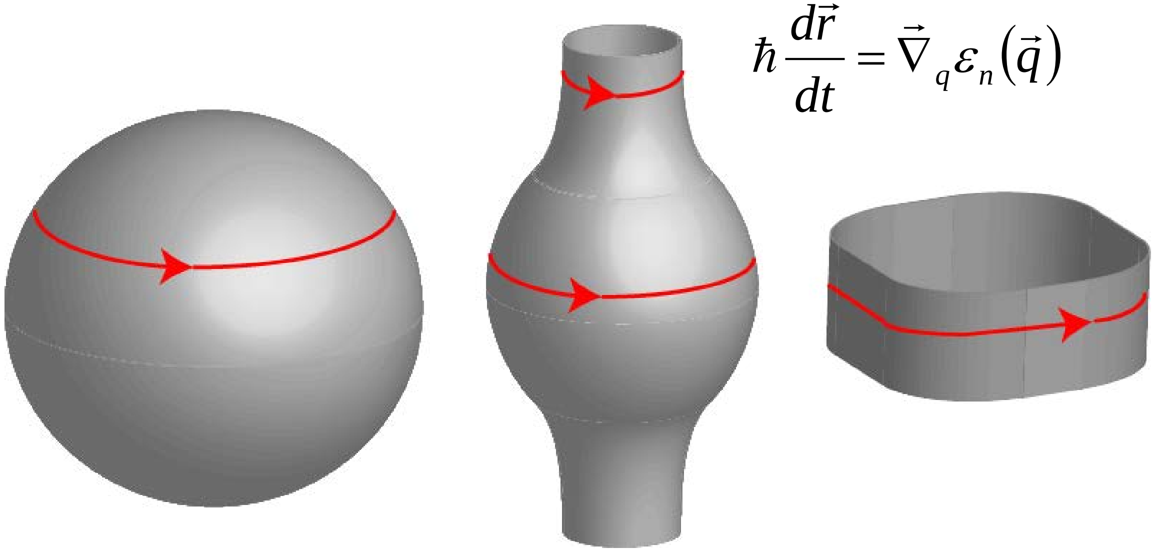
$$\boxed{\sigma_{xy} = \frac{\partial\rho}{\partial B} = \nu\frac{e^2}{h}}$$

Même résultat que pour les électrons massiques



Analyse des trajectoires a la surface de Fermi

Exemples de surfaces de Fermi



$$\hbar \frac{d\vec{q}}{dt} = e\frac{d\vec{r}}{dt}\times\vec{B}$$

$$\hbar \frac{d\vec{r}}{dt} = \vec{\nabla}_q \varepsilon_n(\vec{q})$$

$$\frac{d\vec{q}}{dt} \perp B, \frac{d\vec{r}}{dt}$$

$$\frac{d\vec{q}}{dt}.\vec{\nabla}_{\vec{q}}\varepsilon(\vec{q}) = 0$$

Mouvement à énergie constante

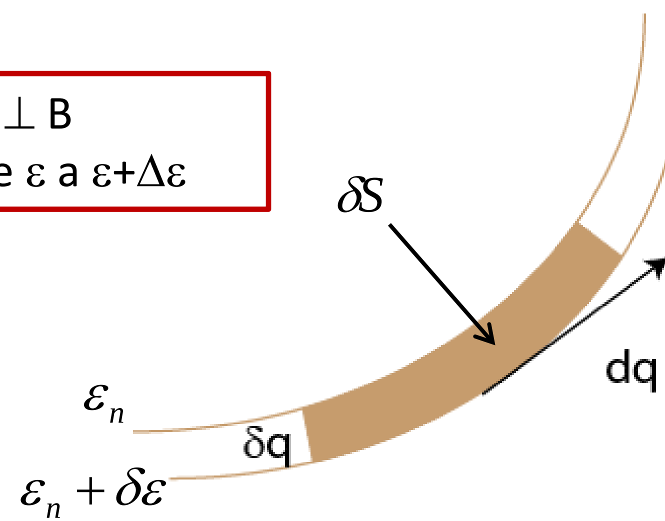
(reste vrai si F≠0)

$$\hbar dq = \frac{e}{\hbar}\left|\nabla_q^{\perp}\varepsilon_n\right| Bdt = \frac{e}{\hbar}\frac{\delta\varepsilon}{\delta q}Bdt$$

$$dt = \frac{\hbar^2}{eB}\frac{dq\,\delta q}{\delta\varepsilon} = \frac{\hbar^2}{eB}\frac{\delta S}{\delta\varepsilon}$$

$$\boxed{T = \frac{\hbar^2}{eB}\frac{\Delta S}{\Delta\varepsilon}}$$

Variation de l'aire ⊥ B lorsqu'on passe de ε a ε+Δε



Cas simple

$$\varepsilon = \frac{\hbar^2}{2m_*}\left(q_x^2+q_y^2+q_z^2\right) = \frac{\hbar^2}{2m_*}q_z^2 + \frac{\hbar^2}{2\pi m_*}S(\varepsilon)$$

$$\frac{\delta S}{\delta\varepsilon} = \frac{2\pi m^*}{\hbar^2}, T = \frac{2\pi m_*}{eB}, \omega_c = \frac{eB}{m_*}$$

Quantification des orbites

$$\varepsilon = \frac{\hbar^2}{2m_*}\left(q_x^2 + q_y^2 + q_z^2\right) = \frac{\hbar^2}{2m_*}q_z^2 + \frac{\hbar^2}{2\pi m_*}S(\varepsilon)$$

Semiclassique

$$\oint \vec{p} \bullet d\vec{r} = (n+\gamma)2\pi\hbar$$

$$\hbar\frac{d\vec{q}}{dt} = e\frac{d\vec{r}}{dt}\times\vec{B}, \hbar(q-K) = e\vec{r}\times\vec{B}$$

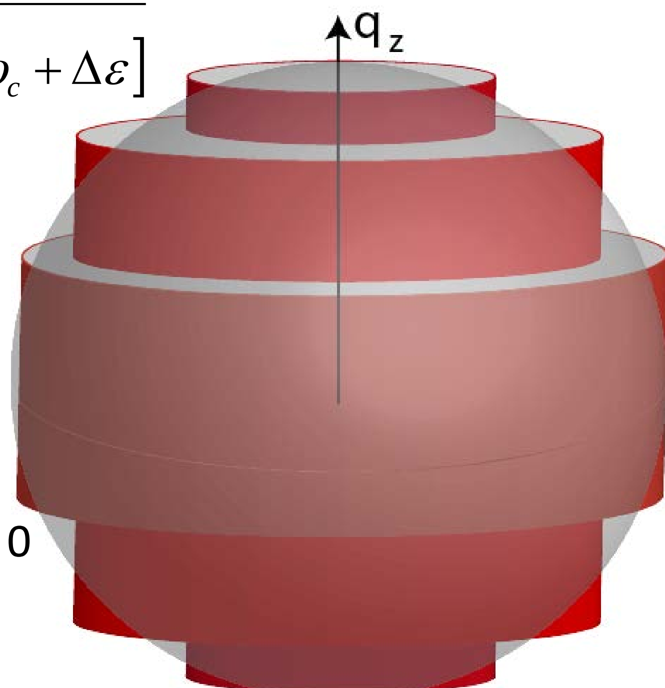
$$S_n = \frac{2\pi eB}{\hbar}(n+\gamma)$$

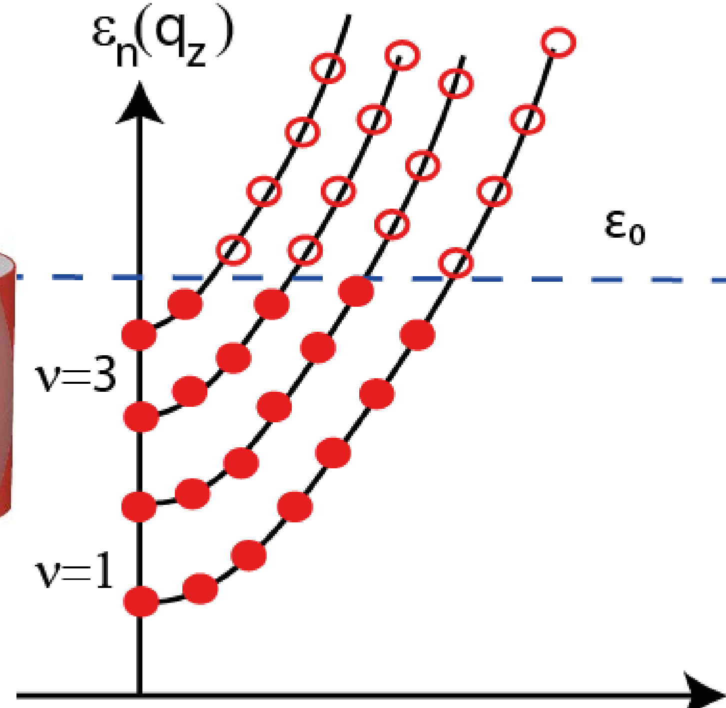
$$\varepsilon_n(q_z) = \frac{\hbar^2}{2m_*}q_z^2 + \hbar\omega_c(n+\gamma)$$

$$q_z(n) = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2}\left[(n_{\max}-n)\hbar\omega_c + \Delta\varepsilon\right]}$$

Densité d'états: a ε_0 donné, sélection des $q_z(n)$ tel que $\varepsilon_n(q_z(n))=\varepsilon_0$

Pour ε_0 donne, n varie de 0 a nmax





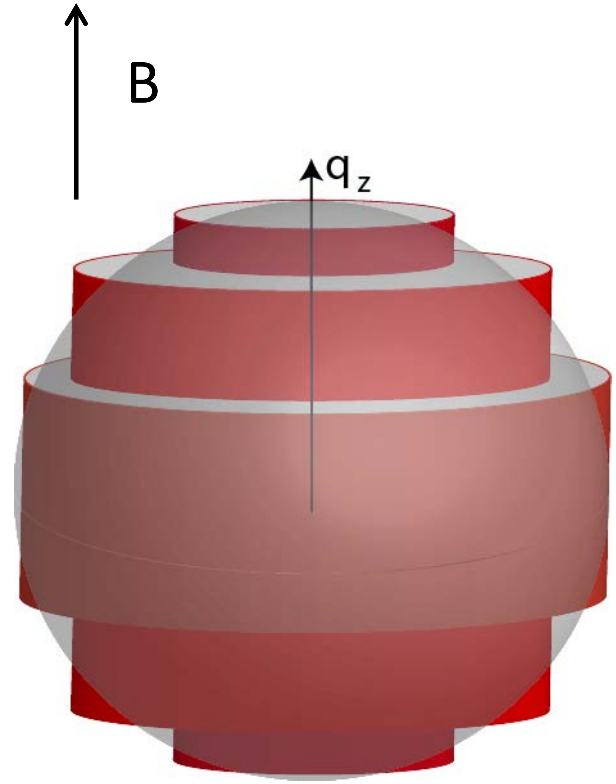
Calcul de la densité d'états

$$\frac{dN}{d\varepsilon}=\frac{2L_z}{2\pi}\frac{L_xL_y}{\Phi_0}\sum_{n=0}^{n_{\max}}\frac{dq_z(n,\varepsilon)}{d\varepsilon}$$

$$d\varepsilon_n(q_z)=\frac{\hbar^2}{m_*}q_z(n)dq_z(n),\ \frac{dq_z(n)}{d\varepsilon}=\frac{m_*}{\hbar^2 q_z(n)}$$

$$\frac{dn}{d\varepsilon}=\frac{m_*}{\pi\hbar^2\Phi_0}\sum_{n=0}^{n_{\max}}\frac{1}{q_z(n)}\rightarrow\frac{m_*}{\pi\hbar^2\Phi_0}\sqrt{\frac{\hbar^2}{2m_*\hbar\omega_c}}2\sqrt{\frac{\varepsilon}{\hbar\omega_c}}$$

$$=\frac{(2m_*)^{3/2}}{4\pi\hbar^3}\sqrt{\varepsilon}$$



Identique a celle d'un système sans champ

$$\frac{N}{V}=\frac{1}{8\pi^3}\frac{4}{3}\pi q^3=\frac{q^3}{6\pi^2}=\frac{(2m)^{3/2}}{6\pi^2\hbar^3}\varepsilon^{3/2}$$

$$\frac{dn}{d\varepsilon}=\frac{(2m)^{3/2}}{4\pi^2\hbar^3}\varepsilon^{1/2}$$

Par contre elle diverge lorsque $\Delta\varepsilon \rightarrow 0$ i.e. lorsque

$$\varepsilon_n=\left(n_{\max}+\frac{1}{2}\right)\hbar\omega_c$$

$$\frac{1}{B_n}=\left(n+\frac{1}{2}\right)\frac{\hbar e}{m\varepsilon}$$

Oscillations periodiques en 1/B

M → deHaas-van Alphen

ρ_{xx} → Shubnikov deHaas

Généralisation aux structures de bandes

Operateur p+eA

$$\vec{\Pi} = \vec{p} + e\vec{A} = \begin{pmatrix} p_x - \frac{e}{2}By \\ p_y + \frac{e}{2}Bx \end{pmatrix}$$

Jauge symétrique

$$\vec{A} = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2}By \\ \frac{1}{2}Bx \end{pmatrix}$$

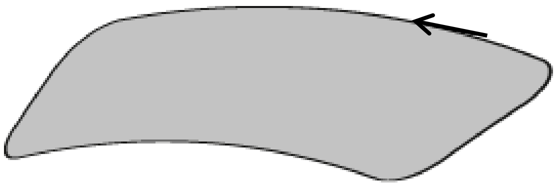
$$\left[\Pi_x, \Pi_y\right] = -ieB\hbar$$

$$\frac{\Pi_x}{\sqrt{eB}} \to Q, \frac{\Pi_y}{\sqrt{eB}} \to P$$

Variables canoniques conjuguées d'un système 1D

$$\omega = \frac{dH(J)}{dJ}$$

EBSK $J = \frac{1}{2\pi}\oint PdQ = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar$



Orbite dans le plan Q-P

$$Q \to \frac{\hbar q_x}{\sqrt{eB}}, P \to \frac{\hbar q_y}{\sqrt{eB}}$$

Aire délimitée par la trajectoire qans le plan Q-P

$$J = \frac{\hbar^2}{2\pi eB} S$$

$$T = \frac{2\pi}{\omega} = \frac{2\pi eB}{\hbar^2}\frac{d\varepsilon}{dS}$$

Formule très générale

Singularité de la densité d'états

Orbites fermées
ou ouvertes suivant
la direction de B

$$\frac{dn}{d\varepsilon} = \frac{B}{\pi\Phi_0}\sum_{n=0}^{n_{\max}} \frac{dq_z(n,\varepsilon)}{d\varepsilon}$$

Critère géométrique pour que $dq_z/d\varepsilon \rightarrow \infty$

$$\boxed{\varepsilon = \varepsilon_n(q_z(n))}$$

Orbite quantifiée

$$\boxed{S(\varepsilon, q_z) = \frac{2\pi eB}{\hbar}\left(n+\frac{1}{2}\right)}$$

$$\frac{dS}{d\varepsilon}\delta\varepsilon + \frac{dS}{dq_z}\delta q_z = 0$$

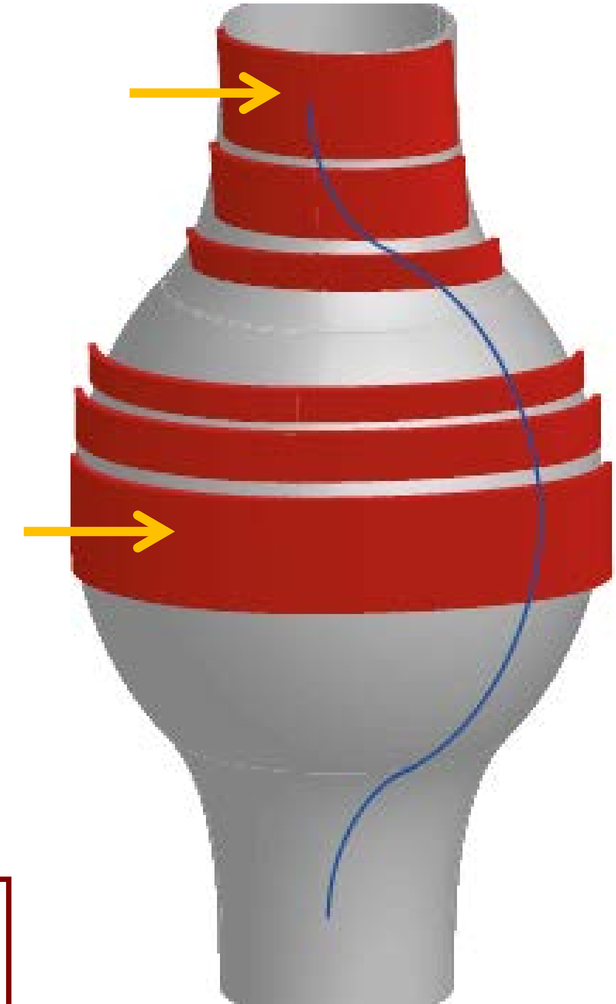
$$\frac{dq_z}{d\varepsilon} = -\frac{\frac{dS}{d\varepsilon}}{\frac{dS}{dq_z}}$$

$\rightarrow 0$ pour les orbites extrémales

Pour chaque surface extrémale S_i

$$\boxed{\frac{1}{B_n^i} = \frac{2\pi e}{\hbar S_i}\left(n+\frac{1}{2}\right)}$$

Fréquence magnétique détermine S_i



$S_i(\theta)$

Forme de la surface
de Fermi

Gaz d'électrons en champ magnétique

groupe de translation magnétique

$$U(\vec{r}+\vec{R})=U(\vec{r}) \qquad \vec{R}=n\vec{a}+m\vec{b} \qquad T_{\vec{R}}=e^{i\vec{R}\bullet\vec{k}} \qquad T_{\vec{R}}f(\vec{r})=f(\vec{r}+\vec{R})$$

$$\boxed{H=\frac{\left(\hbar\vec{k}+e\vec{A}\right)^2}{2m}+U(\vec{r})}$$

$$H=\hbar c\left\{\left(k_x+\frac{e}{\hbar}A_x\right)\sigma_y-\left(k_y+\frac{e}{\hbar}A_y\right)\sigma_x\right\}+U(\vec{r})$$

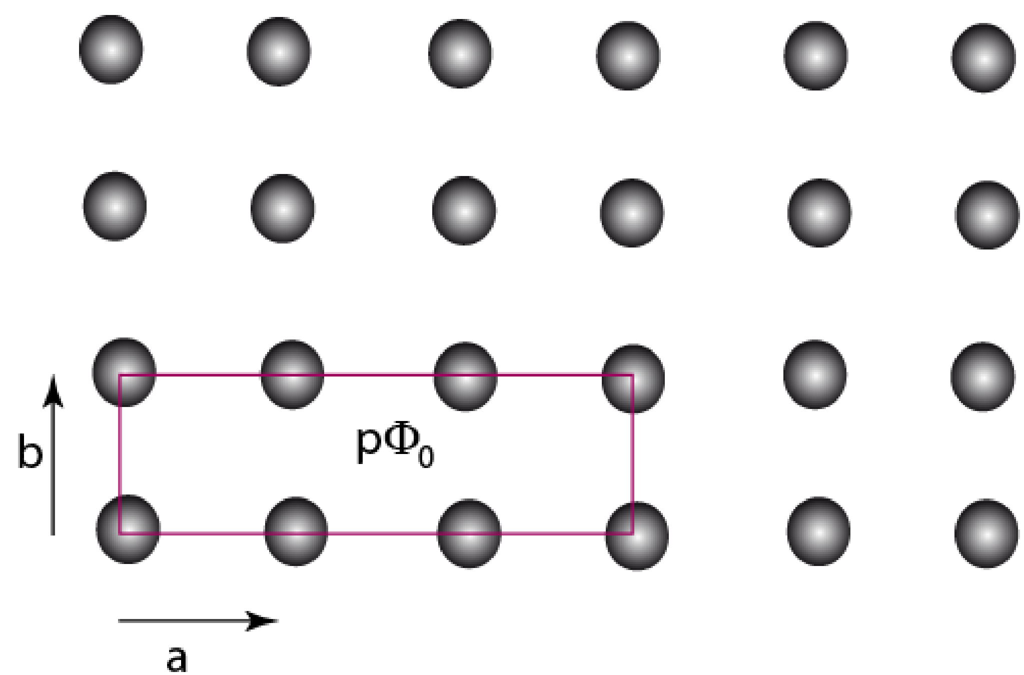
$$\vec{A}=\frac{1}{2}\vec{r}\times\vec{B}$$

$$\widehat{T}_{\vec{R}}=e^{i\vec{R}\bullet\left[\vec{k}+\frac{e}{2\hbar}\vec{r}\times\vec{B}\right]}=T_{\vec{R}}e^{i\frac{e}{2\hbar}\vec{R}\times\vec{B}}$$

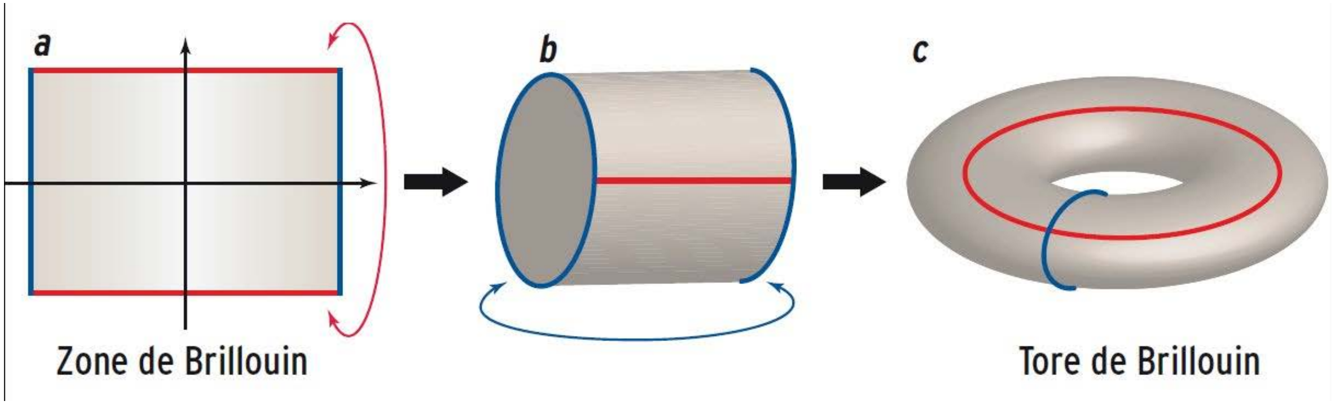
$$\widehat{T}_{\vec{a}}\widehat{T}_{\vec{b}}=e^{i\varphi}\widehat{T}_{\vec{b}}\widehat{T}_{\vec{a}} \qquad \varphi=2\pi\frac{Bab}{\Phi_0}=2\pi\frac{p}{q}$$

Maille « magnétique »

$$\vec{R}'=nq\vec{a}+m\vec{b}$$



Cas d'un espace sous-jacent périodique (Zone de Brillouin): notion d'indice de Chern



$$H(\vec{q}) = m1 + \vec{\sigma} \bullet \vec{d}(\vec{q})$$ Exemple/ espace sous-jacent est 2D-périodique≡tore

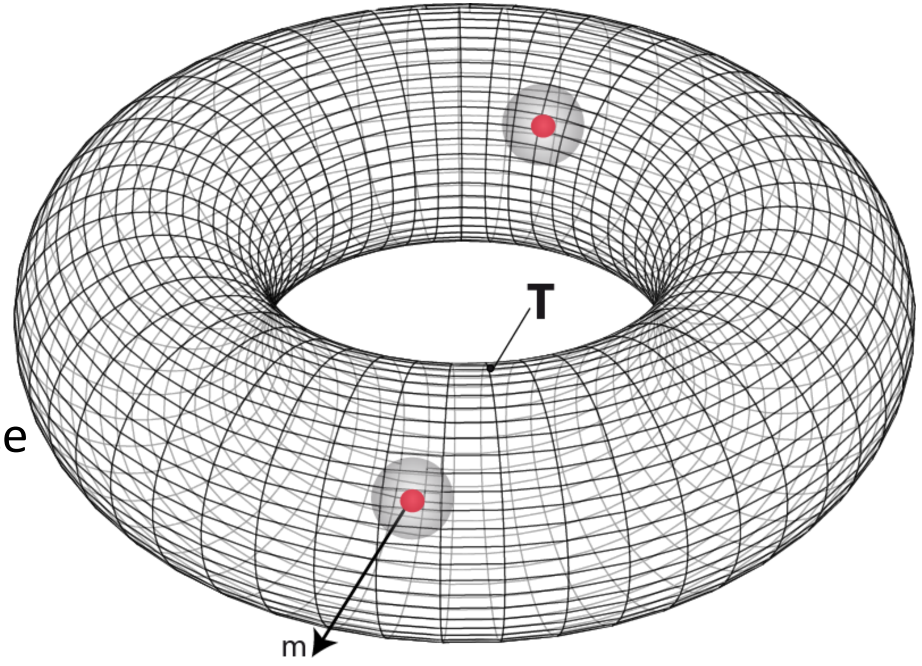
Espace des états: SU(2)≡SO(3)≡sphère

m: rayon du tore

dégénérescences

sphère autour de la dégénérescence

Indice de Chern: tore→sphère



Expression de la conductance de Hall en terme d'invariant topologique (TKNN)

Formule de Kubo

$$\sigma_{xy} = \frac{e^2\hbar}{i} \sum_{\alpha,\beta} \frac{\langle\alpha|v_y|\beta\rangle\langle\beta|v_x|\alpha\rangle - \langle\alpha|v_x|\beta\rangle\langle\beta|v_y|\alpha\rangle}{\left(E_\alpha - E_\beta\right)^2}$$

Indice de bandes (NdL)

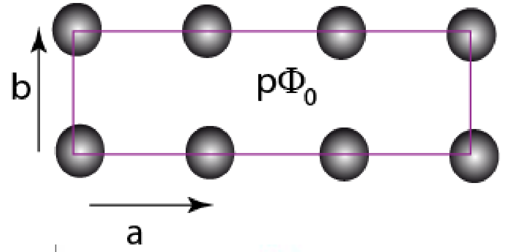
$$\langle\alpha|\vec{v}|\beta\rangle = \int_0^{qa}\int_0^{b} u_\alpha^* \vec{v} u_\beta \, dx dy$$

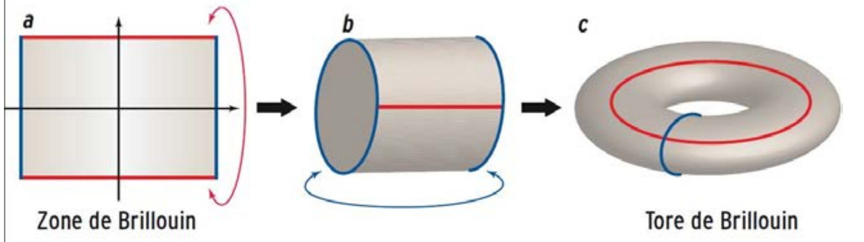
$$\langle\alpha|v_x|\beta\rangle = \frac{1}{\hbar}\langle\alpha|\frac{\partial \hat{H}}{\partial k_1}|\beta\rangle = \left(E_\beta - E_\alpha\right)\left\langle\alpha\left|\frac{\partial u_\beta}{\partial k_1}\right.\right\rangle$$

$$\sigma_{xy} = \frac{e^2}{i\hbar}\sum_{\alpha,\beta}\left\langle\frac{\partial u_\alpha}{\partial k_2}\middle|\beta\right\rangle\left\langle\beta\middle|\frac{\partial u_\alpha}{\partial k_1}\right\rangle - \left\langle\frac{\partial u_\alpha}{\partial k_1}\middle|\beta\right\rangle\left\langle\beta\middle|\frac{\partial u_\alpha}{\partial k_2}\right\rangle$$

def: $\vec{A}(\vec{k}) = \langle u_{\vec{k}}|\vec{\nabla}|u_{\vec{k}}\rangle$

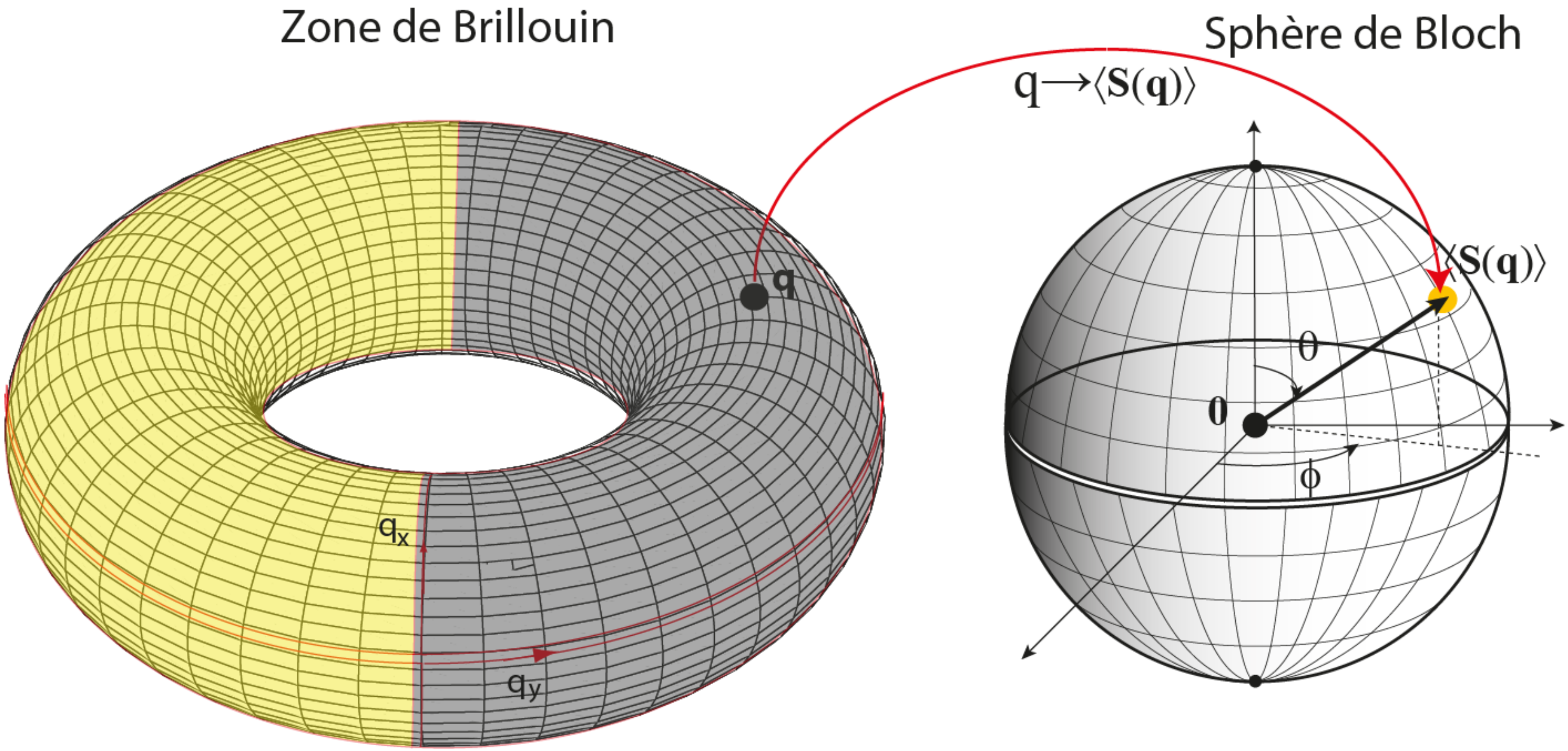
$$\boxed{\sigma_{xy}^\alpha = \frac{e^2}{h}\frac{1}{2i\pi}\int_{ZBM} d^2k\left(\nabla_{\vec{k}} \times A(\vec{k})\right)\bullet \hat{z} = \frac{e^2}{h}C_1^\alpha}$$





Zone de Brillouin 2D (tore)→SU(2)≡SO(3)

Hamiltoniens de spin des systèmes 2D: indice de Chern ≡degré d'homotopie



Application inverse au voisinage de S

$$\vec{q} = \left\langle \vec{S}(\vec{q}) \right\rangle^{-1}$$

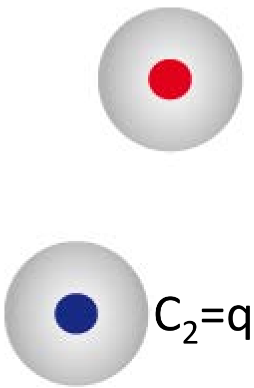
≡1 si l'orientation est préservée
≡-1 si l'orientation est inversée

} Signe du Jacobien

Degré d'homotopie est la somme de ces signes

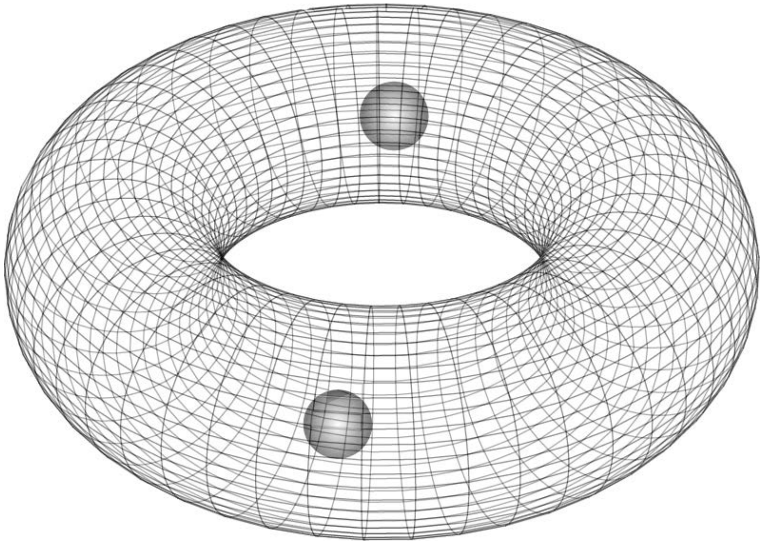
Dégénérescences →zéros du Jacobien

L’indice de Chern (2D)≡nombre de dégénérescences à l’intérieur du tore



$C_1=q_1$

$C_2=q_2$



Théorème de Gauss

$$C_T - \sum_i C_i = 0$$

$$C_T = \sum_i q_i \in Z$$

Changement d’indice de Chern: sortie d’une dégénerescence du tore:
Fermeture du gap en un point de la zone de Brillouin

Changement de phase autour de la maille magnétique

ψ état propre commun à H et $T_{R'}$

$$\hat{T}_{qa}\psi = e^{ik_1 qa}\psi, 0 < k_1 < \frac{2\pi}{qa}$$

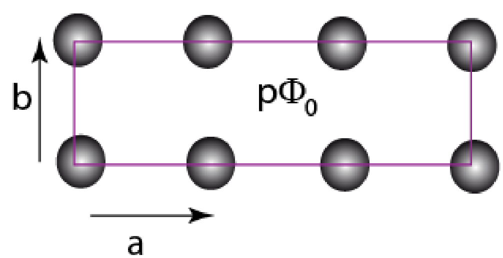
$$\hat{T}_b\psi = e^{ik_2 b}\psi, 0 < k_2 < \frac{2\pi}{b}$$

Zone de Brillouin magnétique

$$\psi_{k_1k_2}(x,y) = e^{i(k_1x+k_2y)}u_{k_1k_2}(x,y)$$

$$u_{k_1k_2}(x+qa,y) = e^{-i\pi py/b}u_{k_1k_2}(x,y)$$

$$u_{k_1k_2}(x,y+b) = e^{i\pi px/qa}u_{k_1k_2}(x,y)$$



$$u_{\vec{k}}(\vec{r}) = \left|u_{\vec{k}}(\vec{r})\right| e^{i\theta_{\vec{k}}(\vec{r})}$$

Contrainte topologique

$$\boxed{\begin{aligned}\sigma_{xy}^{\alpha} &= \frac{e^2}{h}\frac{1}{2i\pi}\int_{ZBM} d^2k\left(\nabla_{\vec{k}} \times A(\vec{k})\right)\bullet\hat{z} \\ &= \frac{e^2}{h}\frac{1}{2i\pi}\oint_{ZBM}\vec{A}(\vec{k})\bullet d\ell\end{aligned}}$$

$$\boxed{p = -\frac{1}{2\pi}\oint_{UM} d\vec{l}\bullet\vec{\nabla}\theta_{\vec{k}}}$$

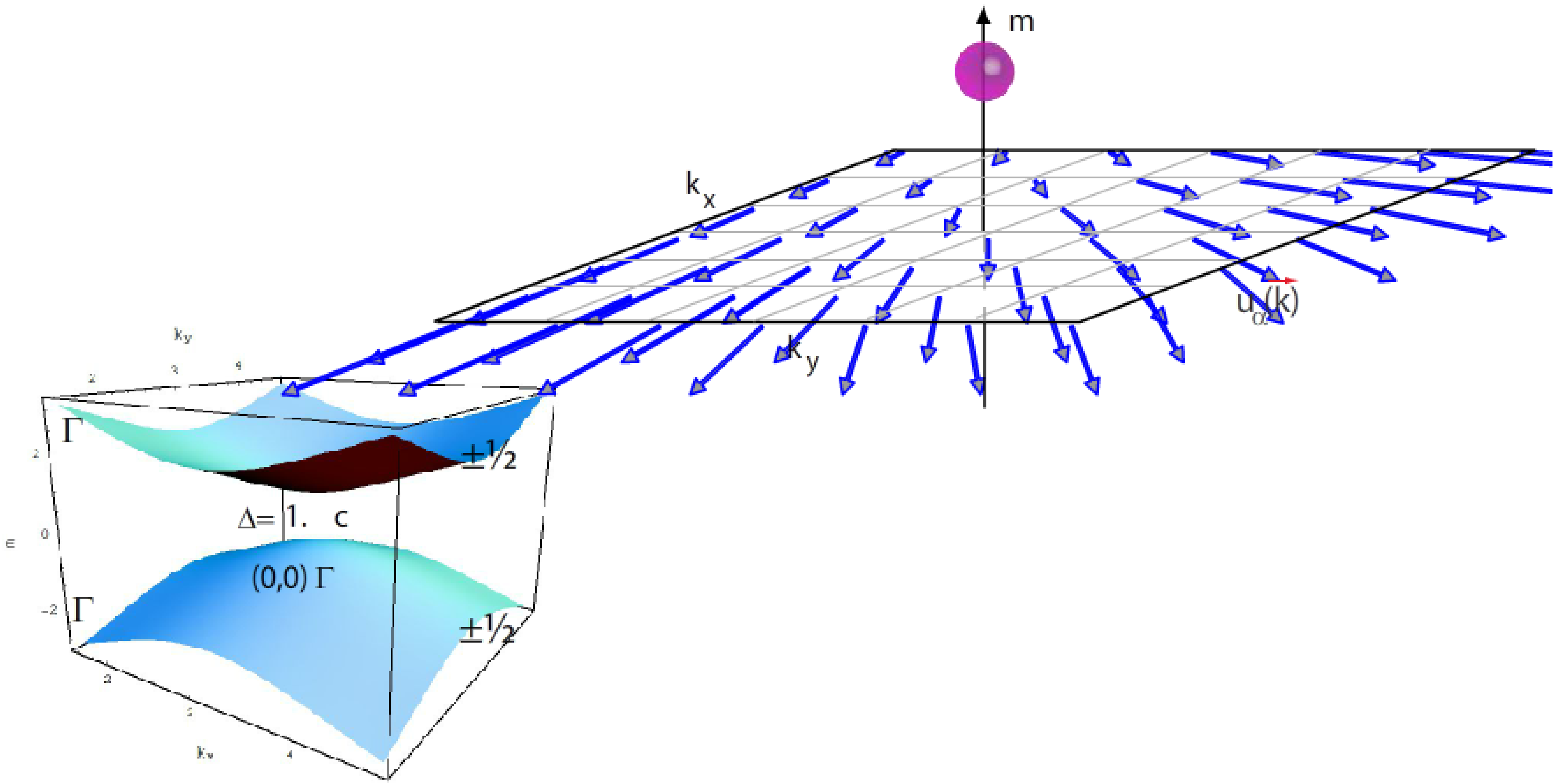
La phase fait p tours autour de la maille magnétique

Exemple: modèle BHZ de l'effet Hall de spin

Zhang model Hamiltonian

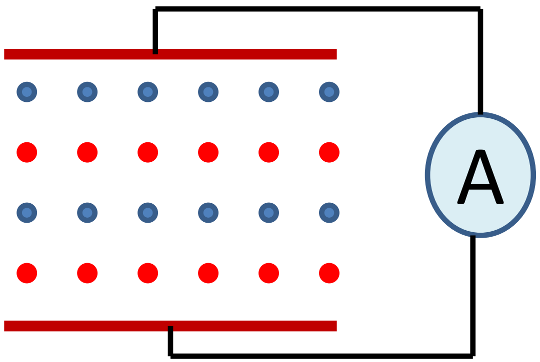
$$H=1.\quad c-c[\cos k_x+\cos k_y]\sigma_z+\underbrace{\sin k_x\sigma_x+\sin k_y\sigma_y}_{\text{Spin-Orbit}}=\vec{\sigma}.\vec{d}(k)$$

$$\varepsilon=\pm|d|=m-2c \qquad \vec{d}(k)=(\sin k_x,\sin k_y,m-c[\cos k_x+\cos k_y])$$



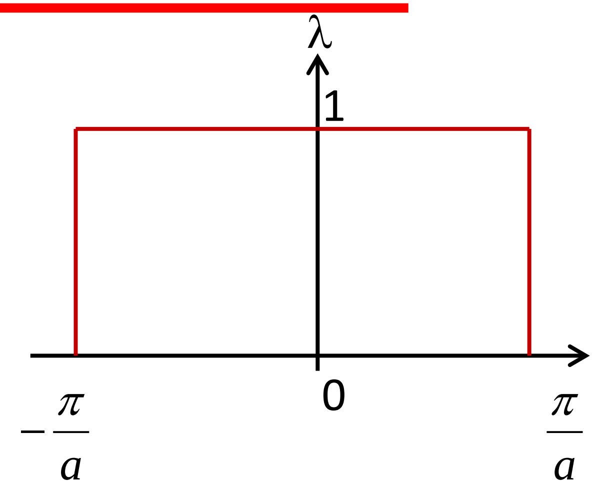
B.A. Bernevig, T.L. Hughes, S.-C. Zhang, Science 314, 1757 (2006)

Polarisation dans les solides et phase de Berry



$$\psi^{\lambda}\left(\vec{k},\vec{r}\right)=e^{i\vec{k}\bullet\vec{r}}u_{\vec{k}}^{\lambda}\left(\vec{r}\right)$$

$$u_{k}^{0}\left(\vec{r}\right)\rightarrow u_{k}^{\lambda}\left(\vec{r}\right)\rightarrow u_{\alpha}^{1}\left(\vec{r}\right)$$



transition ferroélectrique,
λ, paramètre 0<λ<1

Calcule du dipôle electrique

$$w^{\lambda}(r)=\int d^{3}k e^{i\vec{k}\bullet\vec{r}}u_{\vec{k}}^{\lambda}(r)$$

$$\left\langle \vec{r}\right\rangle_{\lambda}=\int d^{3}r\vec{r}\left|w^{\lambda}\left(\vec{r}\right)\right|^{2}=\int d^{3}q\left\langle u_{q}^{\lambda}\left|\nabla_{q}\right|u_{q}^{\lambda}\right\rangle$$

$$P=\frac{2e}{(2\pi)^{3}}\left\langle r\right\rangle_{\lambda}$$

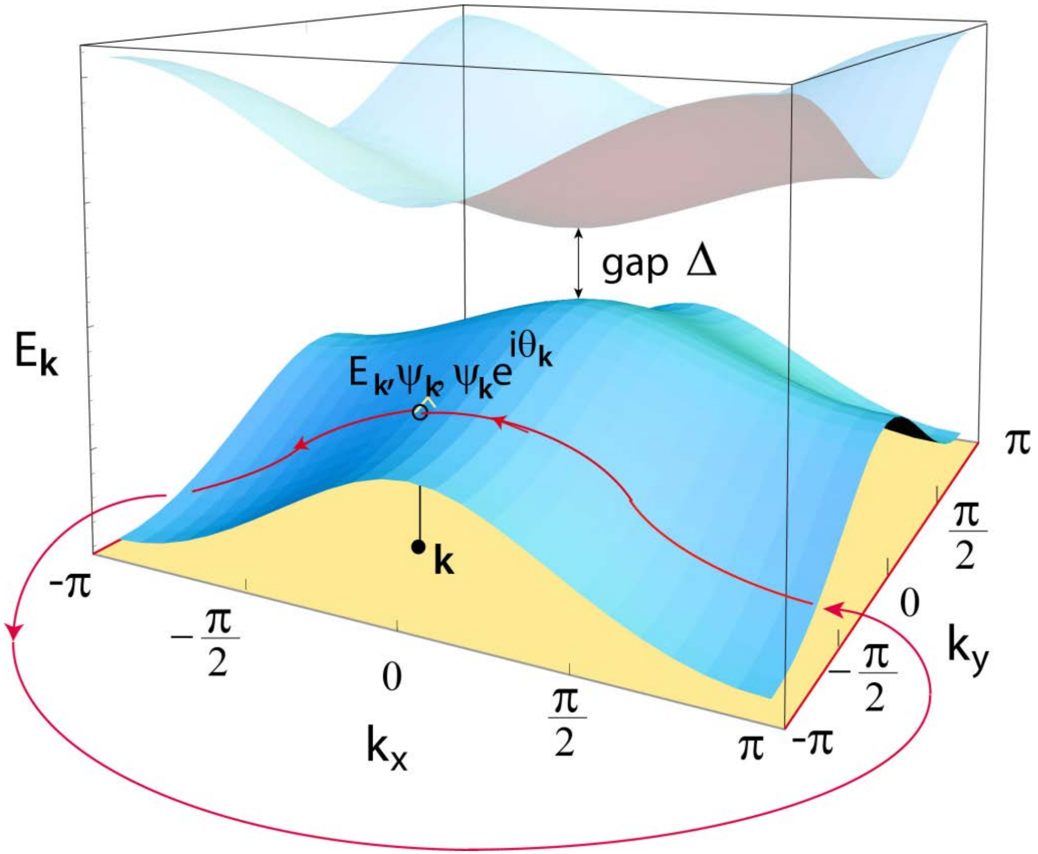
$$\Delta P=\int_{0}^{1}\frac{\partial P}{\partial\lambda}d\lambda=$$

$$\frac{2e}{2\pi}\left(\varphi(\lambda=1)-\varphi(\lambda=0)\right)=\frac{e}{\pi}\oint_{C}d\varphi=e\frac{\gamma}{\pi}$$

$$\gamma=i\oint_{C}\left\langle \psi_{k}^{\lambda}\left|\nabla_{\xi}\right|\psi_{k}^{\lambda}\right\rangle d\xi$$

$$\boxed{\Delta P=e\frac{\gamma}{\pi}+\Delta P_{ion}}$$

Reconnection des fonctions d'ondes



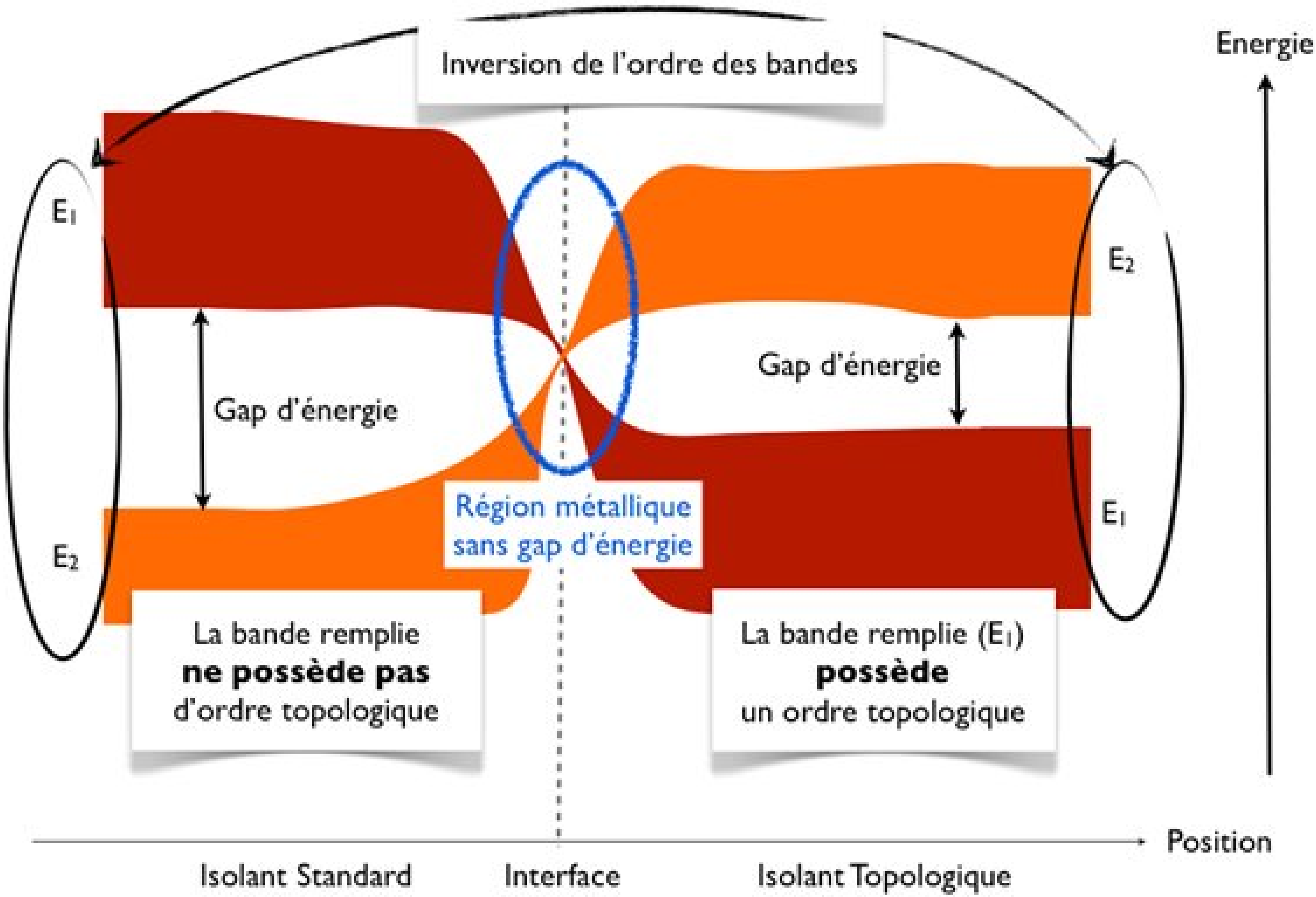
Pour une bande remplie: la phase θ de sa fonction d'onde est ±1. C'est l'indice de Chern de la bande

Cas 2D $C = \sum_{remplie} C_n$ entier Cas 3D $C = \pm 1 = (-1)^p$ $\boxed{Z_2}$

$\boxed{Z}$

p: nombre de bandes P remplies sous ε_F

Etats d'interface des isolants topologiques



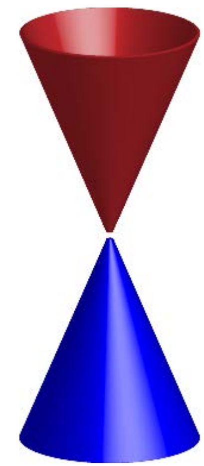
Modèle minimal pour les états de surface fermion hélicoïdaux de Dirac

$$H = \hbar c\left\{\left(k_x + \frac{e}{\hbar}A_x\right)\sigma_y - \left(k_y + \frac{e}{\hbar}A_y\right)\sigma_x\right\} + U(\vec{r})$$

Π_x Π_y

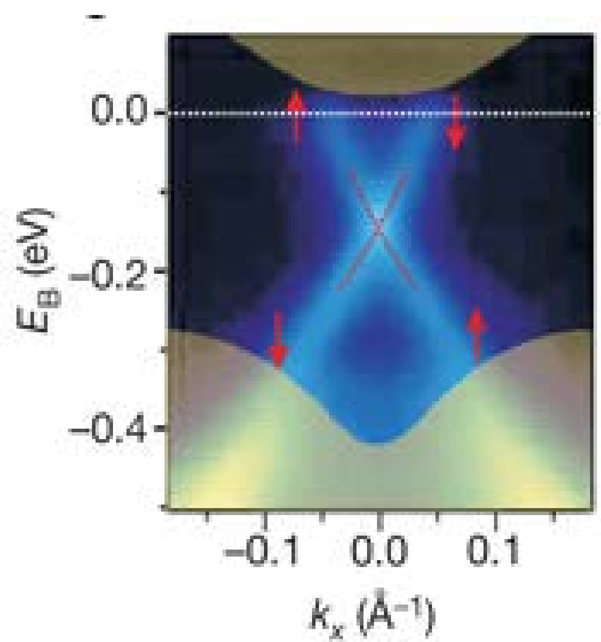
$$\varepsilon = \hbar c\left(\langle k_x\rangle\langle\sigma_x\rangle - \langle k_y\rangle\langle\sigma_y\rangle\right)$$

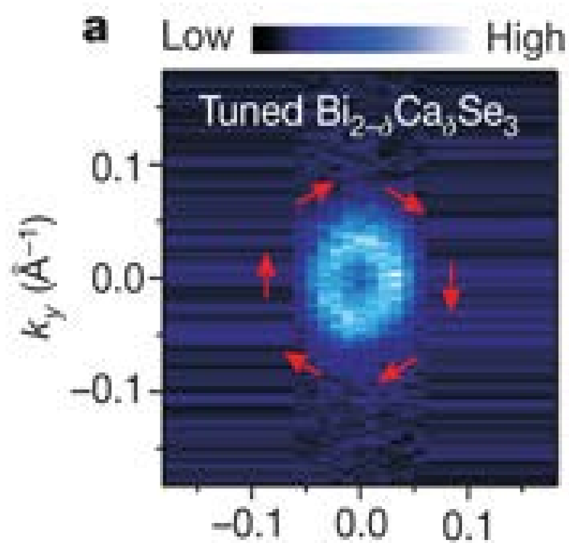
$$= \hbar c\left(|k|\cos\theta \times \cos\theta - |k|\sin\theta \times [-\sin\theta]\right) = \hbar c|k|$$



Cas « idéal »

HgTe : plusieurs « branches » (autres bandes)





Confirmation expérimentale

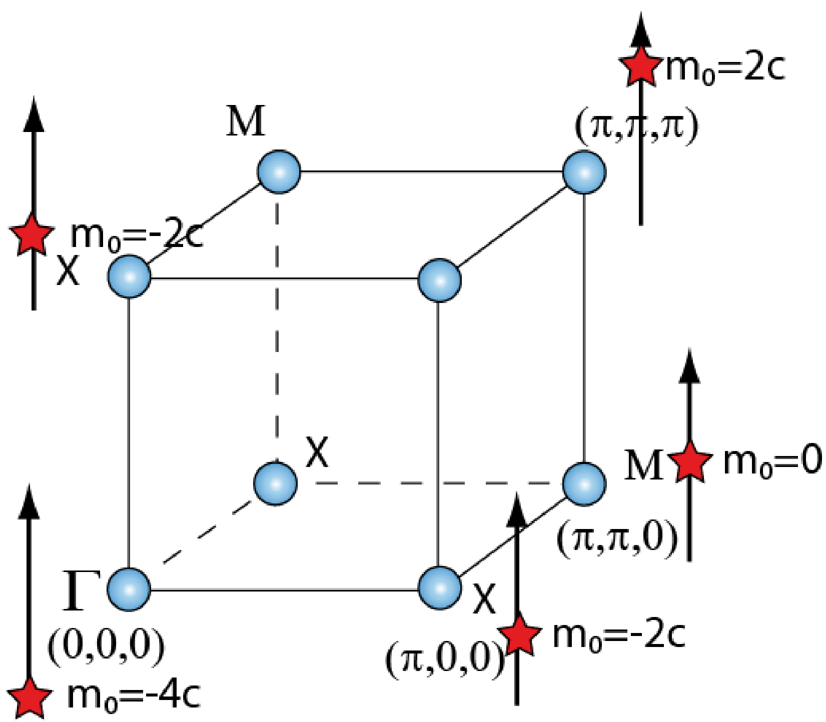
Le modèle BHZ se généralise a 3→4 D

$$H(k)=b_0(k)\Gamma_5+\sum_{i=1}^{4}b_i(k)\Gamma_i,\ \varepsilon_\pm=\pm\left|\vec{b}\left(\vec{k}\right)\right|,\ \left[\Gamma_i,\Gamma_j\right]=\varepsilon_{ijk}\Gamma_k$$

$$b_0(k)=\left(m-c\sum_{i=1}^{4}\cos k_i\right),\ b_i=\sin k_i$$

Condition to get $\varepsilon_\pm=\pm\left|\vec{b}\left(\vec{k}\right)\right|=0$

can be fulfilled only P symmetric system:
1 parameter m is enough !



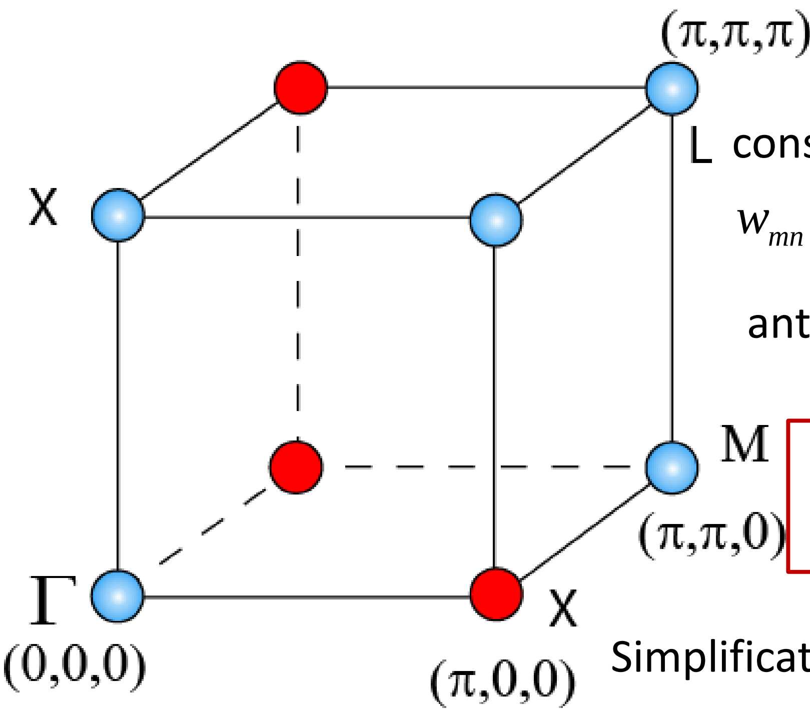
➡ 8 critical points at BZ corners (Γ_i)

Questions: topology of what ?
what's special at the Γ_i ?
How can do I find topological numbers

A 3dimensions: invariant $Z_2 \equiv$ signe ± 1

Time reversal symmetry Θ Antiunitary op $[e^{(i\pi\sigma y)} K]$ $\Theta^2 = -1$

T-symmetric Hamiltonian $[H,\Theta]=0$ spin 1/2 $H(-k)=\Theta\, H(k)\, \Theta^{-1}$



at Γ_i $H(\Gamma_i)=\Theta\, H(\Gamma_i)\, \Theta^{-1}$

$u_\alpha(\Gamma_i), \Theta u_\alpha(\Gamma_i)$
degenerate
Kramers doublets

consider matrix

$$w_{mn}(k) = \langle u_m(-k)|\Theta|u_n(k)\rangle$$

antisymmetric at Γ_i $\delta_i = \dfrac{\sqrt{\det(w[\Gamma_i])}}{\mathrm{Pf}(w[\Gamma_i])} = \pm 1$ invariant

Z_2 invariant $\nu_0 = \prod_{i=1}^{8} \delta_i$

3 more $\nu_\alpha = \prod_{i=1}^{4} \delta_i$

Simplification $[H,P]=0$ $u_\alpha(-\vec{k}) = \pm u_\alpha(\vec{k})$ degenerate Kramers doublets

Push a P band above ε_F,
topological phase transition

$\delta_i = \prod_m \xi_m$ # of odd-parity bands below Fermi level

Liang Fu, C. L. Kane, PRB 76 045302 (2007)