

Introduction à la matière topologique

Benoît Douçot

November 5, 2019



Plan de l'exposé

- La matière est-elle **topologique** ? (1847-1900).
- Aspects **topologiques** de la mécanique quantique.
- L'effet Hall **quantique** comme paradigme (1980-2000).
- La matière topologique au XXI-ème siècle : une **révolution** ?

La matière est-elle topologique ? (1847-1900)

- 1847 : Essai de Listing *Vorstudieren zur Topologie*, avec l'accent mis sur la notion d'**orientation** et sur les **noeuds**.
- 1851, 1857 : Articles de Riemann sur l'analyse complexe.
- 1858 : Papier fondamental de Helmholtz sur les **lignes de vortex** dans les fluides parfaits.
- 1861 : Listing publie son *Census der Räumlichen Complexe*.
- 1867 : Publication des fragments de Gauss sur l'électromagnétisme, avec le **nombre d'enroulement**.
Expériences de Tait sur les **anneaux de vorticité** en présence de W. Thomson, qui commence à spéculer sur un modèle d'atomes à base de **vortex noués**. Début d'une correspondance entre Maxwell, Thomson, et Tait sur la **matière topologique**.

La matière est-elle topologique ? (1847-1900)

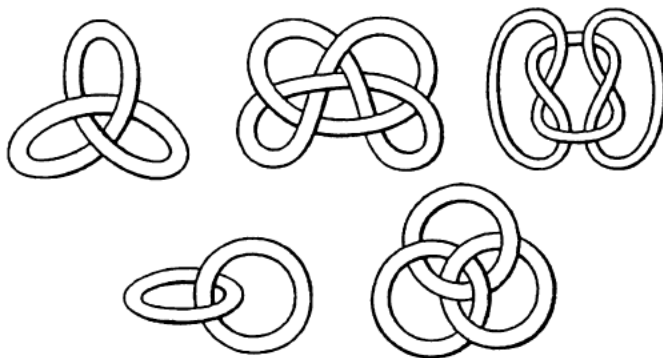


Fig. 4. Candidates for atoms? Knots and links from (Thomson 1869)

La matière est-elle topologique ? (1847-1900)

- 1868-1869 : Thomson étend les résultats de Helmholtz sur le mouvement des **lignes de vortex**, avec l'accent mis sur les **flots irrotationnels** dans les régions **multiplement connexes** (compléments de noeuds): aspect **cohomologique** de la topologie.
- 1869 : Maxwell donne une revue du livre de Listing *Census der Räumlichen Complexe* à la *London mathematical society*.
- 1873 : Le *Treatise on Electricity and Magnetism* de Maxwell incorpore les idées topologiques de Listing, les résultats de Thomson sur les **flots irrotationnels** dans les régions **multiplement connexes**, et le **nombre d'enroulement** de Gauss.
- 1870's : Thomson essaie de démontrer la **stabilité dynamique** de configurations de vortex simples et de déterminer leurs modes de vibration (ancêtre de la **théorie des cordes** ?)

La matière est-elle topologique ? (1847-1900)

- 1876 : Tait commence à **classifier les noeuds**.
- 1885 : Tait, aidé par Kirkman, publie une table de noeuds **alternés** jusqu'à 10 croisements.
- Fin des années 1880 : W. Thomson abandonne progressivement sa théorie des **atomes noués**.
- 1889 : Little tabule les noeuds **non-alternés** jusqu'à 9 croisements.
- 1890 : Little tabule les noeuds **alternés** jusqu'à 11 croisements.
- 1899 : Little tabule les noeuds **non-alternés** jusqu'à 10 croisements.

Moritz Epple, *Archive for the History of Exact Sciences*, **52**, 297-392 (1998).

La matière est-elle topologique ? (1847-1900)

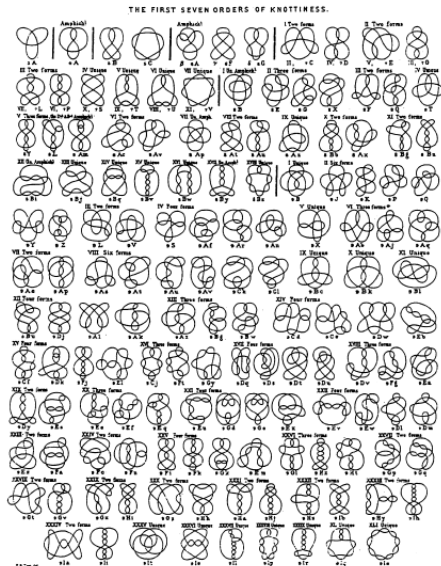


Fig. 1. One page from Tait's tables of knots (Tait 1884c)

- Défauts dans les solides (dislocations, disclinaisons) et les cristaux liquides : aspect *homotopique* de la topologie.
- Configurations topologiquement non-triviales en physique des hautes énergies : *Skyrmions* Skyrme (1962), *monopoles et instantons* dans les théories de jauge 't Hooft (1974), Polyakov (1974), Belavin, Polyakov, Schwartz, Tyupkin (1975).
- Transitions de phase *induites par condensation de vortex* : Berezinskii (1971-72), Kosterlitz et Thouless (1972), *Prix Nobel 2016* (avec D. Haldane (1981) pour des applications remarquables aux *chaînes de spins quantiques*).

Disclinaisons dans un cristal liquide nématique

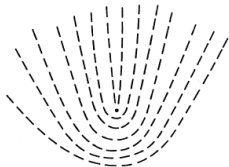


FIG. 32. The only topologically nontrivial line singularity in a nematic: the 180° disclination.

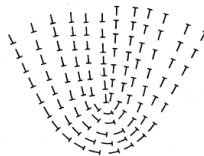
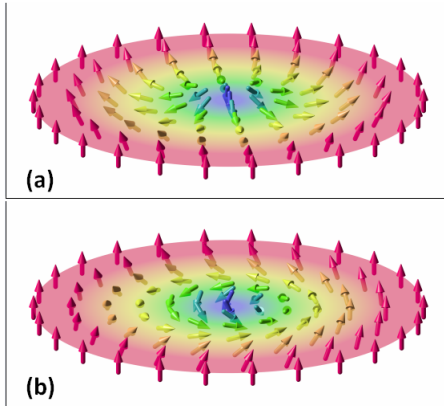


FIG. 34. The escape route of Fig. 33 fails when applied to the 180° disclination of Fig. 32, for nails on opposite sides of the line extending vertically from the singular point would have to rotate in opposite senses, and the intermediate configurations in the escape could not be everywhere continuous away from the singularity.

$$\pi_1(\mathbb{RP}(2)) = \mathbb{Z}_2$$

N. D. Mermin, RMP **51**, 591 (1978)

Skyrmions de spins



$$\pi_2(S^2) = \mathbb{Z}$$

(Image tirée de [Wikipedia](#))

Aspects topologiques de la mécanique quantique

- L'effet Aharonov-Bohm
- Le monopôle de Dirac
- La phase de Berry

L'effet Aharonov-Bohm

W. Ehrenberg et R. E. Siday (1949); Y. Aharonov et D. Bohm (1959). Observations expérimentales par R. G. Chambers (1960); A. Tonomura et al. (1986).

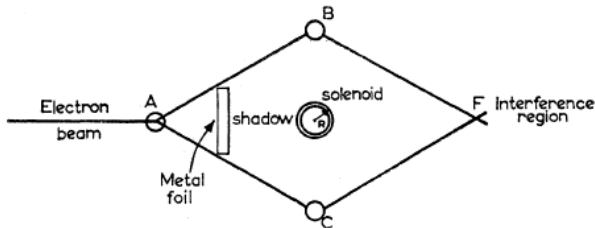


FIG. 2. Schematic experiment to demonstrate interference with time-independent vector potential.

$$\theta_{ABF} = \theta_{ABF}^{(0)} + \frac{e}{\hbar} \int_{ABF} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{l} \quad \theta_{ACF} = \theta_{ACF}^{(0)} + \frac{e}{\hbar} \int_{ACF} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{l}$$

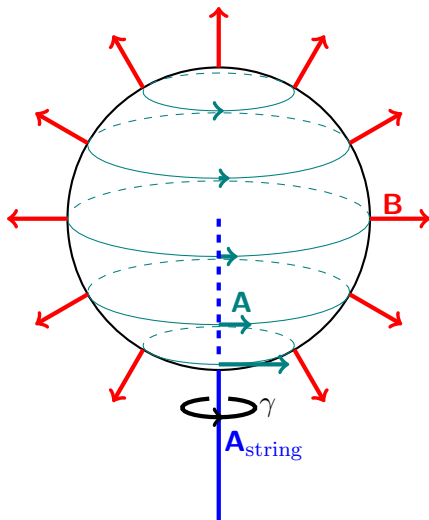
$$\theta_{ACF} - \theta_{ABF} = \text{cte} + 2\pi \frac{\Phi}{\Phi_0} \quad \Phi_0 = \frac{h}{e}$$

Le monopôle de Dirac (1931)

$$\oint_{\gamma} \mathbf{A}_{\text{string}} \cdot d\mathbf{l} = \Phi_m$$

$$\oint_{\gamma} \nabla \theta \cdot d\mathbf{l} = 2\pi n$$

$$\Phi_m = n \Phi_0$$



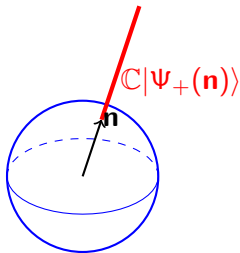
La phase de Berry sur une sphère (I)

M. Berry (1984)

$$H = \mathbf{n} \cdot \mathbf{S} \quad \mathbf{n} \cdot \mathbf{n} = 1$$

$\mathbf{n} \in S^2$ est un paramètre.

$$H|\psi_{\pm}(\mathbf{n})\rangle = \mp|\psi_{\pm}(\mathbf{n})\rangle$$



Il n'existe **pas** de détermination **non singulière** de $|\psi_{\pm}(\mathbf{n})\rangle$ sur **toute la sphère S^2** : exemple de **fibré en droites complexes** au-dessus de S^2 . La **fibres** au dessus de $\mathbf{n}$ est la droite $\mathbb{C}|\psi_{\pm}(\mathbf{n})\rangle$.

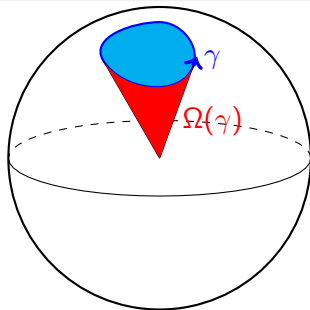
Notons que les **projecteurs** $P_{\pm} = |\psi_{\pm}(\mathbf{n})\rangle\langle\psi_{\pm}(\mathbf{n})|$ sont **lisses** sur S^2 .

La phase de Berry sur une sphère (II)

Connexion de Berry

$$\mathcal{A}_{\pm} = i \langle \Psi_{\pm}(\mathbf{n}) | \nabla \Psi_{\pm}(\mathbf{n}) \rangle$$

$$\oint_{\gamma} \mathcal{A}_{\pm} \cdot d\mathbf{n} = \pm \Omega(\gamma) S$$



Courbure de Berry

$$\oint_{\gamma} \mathcal{A}_{\pm} \cdot d\mathbf{n} = \int_{\Omega} \mathcal{B}_{\pm} \cdot \mathbf{n} \longrightarrow \mathcal{B}_{\pm} = \pm S \mathbf{n}$$

Nombre de Chern

$$\frac{1}{2\pi} \int_{S^2} \mathcal{B}_{\pm} \cdot \mathbf{n} = \mathcal{C}_{\pm} = \pm 2S \in \mathbb{Z}$$

La phase de Berry en théorie des bandes

Un **potentiel périodique** donne des **bandes d'énergie**, soit $\epsilon_n(\mathbf{k})$ où $\mathbf{k}$ appartient à la **zone de Brillouin (ZB)**, qui a la topologie d'un **tore**.

Chaque bande n donne un **fibré en droites complexes** sur la ZB. La fibre au-dessus de $\mathbf{k}$ est la droite $\mathbb{C}|\Psi_{\mathbf{k}}\rangle$, avec $|\Psi_{\mathbf{k}}\rangle$ fonction de Bloch, soit $\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$, avec **$u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ périodique**.

Connexion et courbure de Berry

$$\mathcal{A}_n = i\langle u_n(\mathbf{k}) | \nabla_{\mathbf{k}} u_n(\mathbf{k}) \rangle \quad \mathcal{B}_n = \nabla_{\mathbf{k}} \times \mathcal{A}_n$$

Equations du mouvement semi-classiques

$$\begin{aligned} \frac{d\mathbf{r}}{dt} &= \frac{1}{\hbar} \nabla_{\mathbf{k}} \epsilon(\mathbf{k}) - \frac{d\mathbf{k}}{dt} \times \mathcal{B}_n(\mathbf{k}) \\ \hbar \frac{d\mathbf{k}}{dt} &= -e\mathbf{E}(\mathbf{r}) - e \frac{d\mathbf{r}}{dt} \times \mathbf{B}(\mathbf{r}) \end{aligned}$$

Karplus & Luttinger (1954),
Chang & Niu (1995), Sundaram & Niu (1999).

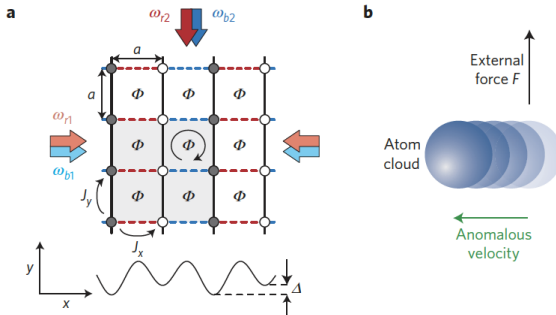
LETTERS

PUBLISHED ONLINE: 8 DECEMBER 2014 | DOI: 10.1038/NPHYS3171

nature
physics

Measuring the Chern number of Hofstadter bands with ultracold bosonic atoms

M. Aidelsburger^{1,2*}, M. Lohse^{1,2}, C. Schweizer^{1,2}, M. Atala^{1,2}, J. T. Barreiro^{1,2†}, S. Nascimbène³, N. R. Cooper⁴, I. Bloch^{1,2} and N. Goldman^{3,5}

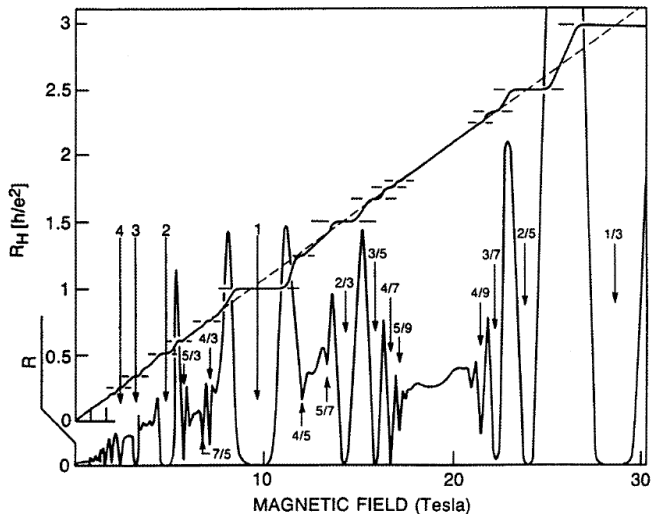


L'effet Hall quantique comme paradigme (1980-2000)

- La conductance de Hall comme nombre de Chern
- La correspondance volume-bord

Effet Hall quantique

Von Klitzing (1981) et Prix Nobel (1985).

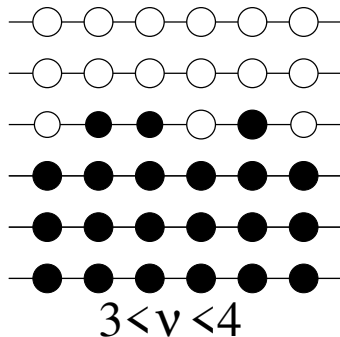
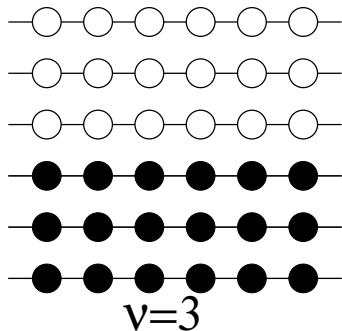


Willett et al. PRL **59**, 1776 (1987)

Niveaux de Landau

Un état quantique occupe la même aire qu'un quantum de flux Φ_0 .

Facteur de remplissage : ν = nombre de niveaux de Landau occupés.



La conductance de Hall pour un système périodique

D. J. Thouless, M. Kohmoto, M. P. Nightingale, and M. den Nijs,
Phys. Rev. Lett. **49**, 405 (1982).

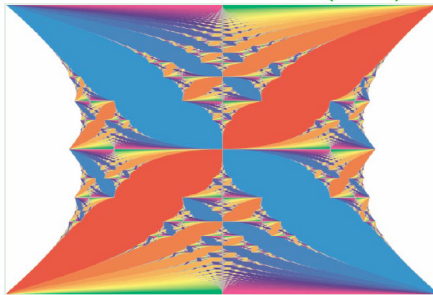


Figure 5. The Hofstadter “butterfly” is a fractal phase diagram of Douglas Hofstadter’s model of a quantum Hall system in a periodic potential. Each of the infinite number of phases is characterized by the Chern number of its Hall conductance and displayed with a different color. The horizontal axis gives the chemical potential, which determines the electron density. The left side corresponds to zero electron density. The vertical axis, indicating magnetic flux through the system, goes from zero at the bottom to one flux quantum per unit cell of the crystal lattice at the top. At higher fluxes, the phase diagram repeats periodically. Warm colors indicate positive Chern numbers; cool colors, negative numbers. Only on the extreme left and right do we see white spaces, which indicate Chern number zero. (Adapted from D. Osadchy, J. Avron, *J. Math. Phys.* **42**, 5665 [2001].)

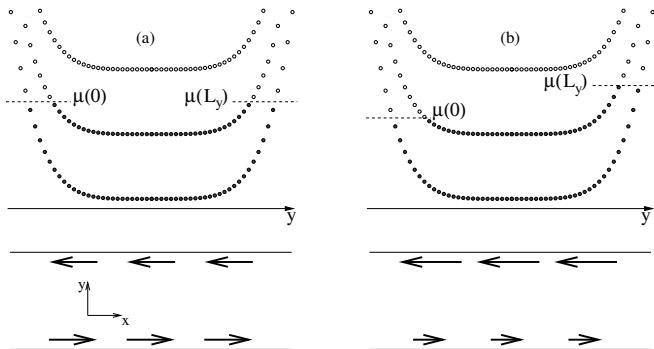
Connection with fiber bundles and Chern numbers:

J. Avron, R. Seiler, B. Simon, Phys. Rev. Lett. **51**, 51, (1983).

B. Simon, Phys. Rev. Lett. **51**, 2167, (1983).

$$\sigma_{xy,n} = \frac{e^2}{h} C_n$$

B. Halperin (1982), M. Büttiker (1987)



$$I_x = p \frac{e^2}{h} (V(L_y) - V(0))$$

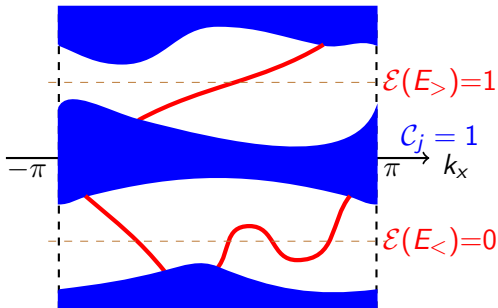
Correspondance volume-bord (I)

Définition d'un index de bord

On considère un système périodique semi-infini $y \geq 0$. Soit E une énergie située **dans un gap**.

$$\mathcal{E} = \int_{-\pi}^{\pi} dk_x \frac{d\epsilon}{dk_x} \delta(\epsilon(k_x) - E)$$

$\epsilon(k_x)$ est la relation de dispersion d'un **état de bord**. $\mathcal{E}$ ne dépend **que du gap**, et pas de l'énergie E située dans ce gap.



Correspondance volume-bord (II)

Hatsugai (1993)

Si l'énergie de Fermi E_F est située dans un gap:

$$\sigma_{xy}(E_F) = \frac{e^2}{h} \sum_{j < E_F} c_j = \frac{e^2}{h} \mathcal{E}(E_F)$$

On a en fait la relation plus précise:

$$\mathcal{E}(E_>) - \mathcal{E}(E_<) = c_j$$

où $E_>$ (resp. $E_<$) appartient au gap situé au-dessus (resp. au-dessous) de la bande j .

Des généralisations mathématiquement rigoureuses au cas désordonné ont été données par Schulz-Baldes, Kellendonck, Richter (2000) et Elbau, Graf (2002).

La matière topologique au XXI-ème siècle : une révolution?

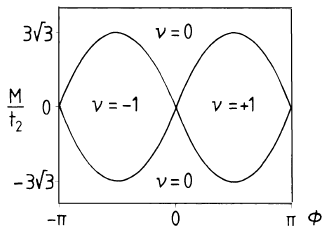
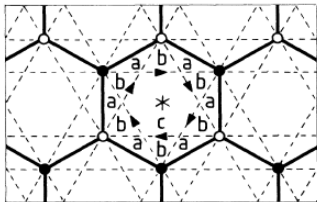
- Vers le calcul quantique topologique (Julia Meyer).
- La simulation quantique (Nathan Goldman).
- Effets topologiques dans les milieux continus classiques (Pierre Delplace).
- Les **matériaux topologiques**.

Les matériaux topologiques

- Les premiers isolants topologiques **invariants par renversement du temps**.
- La classification selon les **symétries discrètes** (*10-fold way*).
- La ***chimie quantique topologique***.

Isolants de Chern sans champ magnétique uniforme

D. Haldane, PRL **61**, 2015 (1988) : While the particular model presented here is *unlikely to be directly physically realizable*, it indicates that, at least in principle, the QHE can be placed in the wider context of *phenomena associated with broken time-reversal invariance*, and does not necessarily require external magnetic fields...

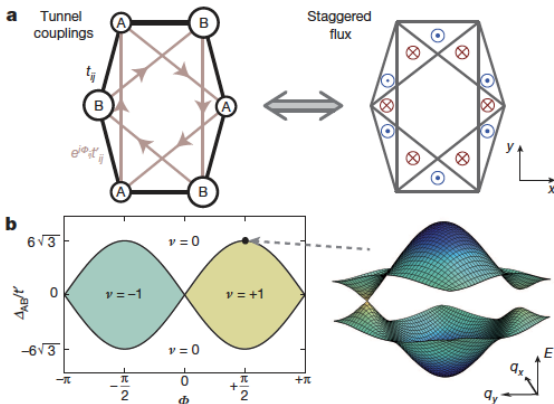


LETTER

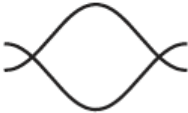
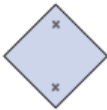
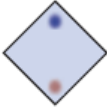
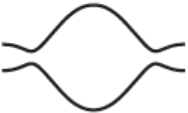
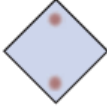
doi:10.1038/nature13915

Experimental realization of the topological Haldane model with ultracold fermions

Gregor Jotzu¹, Michael Messer¹, Rémi Desbuquois¹, Martin Lebrat¹, Thomas Uehlinger¹, Daniel Greif² & Tilman Esslinger¹

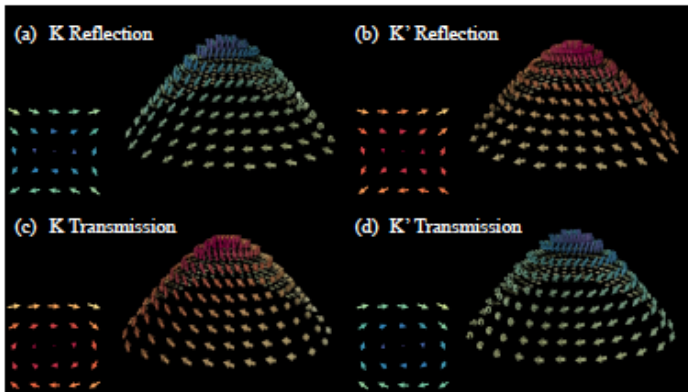


Dispersion et courbure de Berry du modèle de Haldane

e	Regime	Broken symmetry	Band structure	Berry curvature
①	$\varphi = 0^\circ; \pm 180^\circ$ $\Delta_{AB} = 0$	—		
②	$\varphi = 0^\circ; \pm 180^\circ$ $\Delta_{AB} > 0$	IS		
③	$\varphi = 0^\circ; \pm 180^\circ$ $\Delta_{AB} < 0$	IS		
④	$-180^\circ < \varphi < 0^\circ$ $\Delta_{AB} = 0$	TRS		

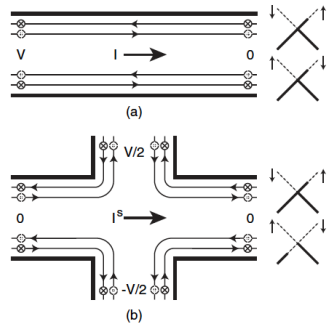
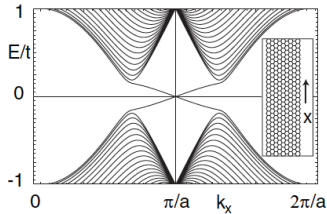
Meron spin textures in momentum space

Cheng Guo et al. [arXiv:1904.11516](https://arxiv.org/abs/1904.11516). Numerical study of a photonic crystal slab with a honeycomb lattice of circular air holes: *The **spin texture** of the photonic modes manifests directly in the **polarization** of the leakage radiation.*



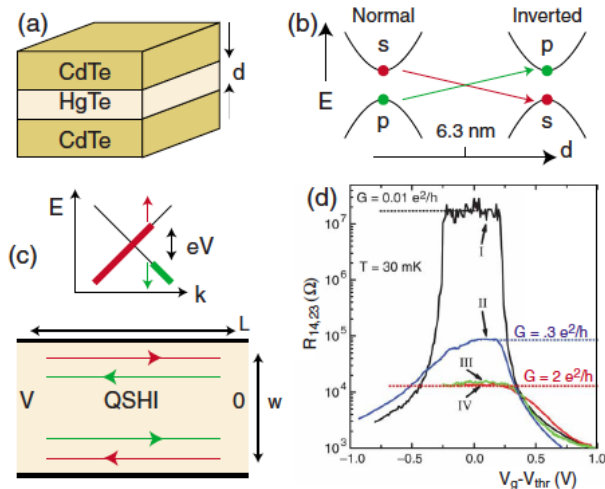
Systèmes invariants par renversement du temps en 2D

C. Kane et E. Mele, PRL **95**, 226801 (2005)



Observation expérimentale de l'effet Hall de spin quantique

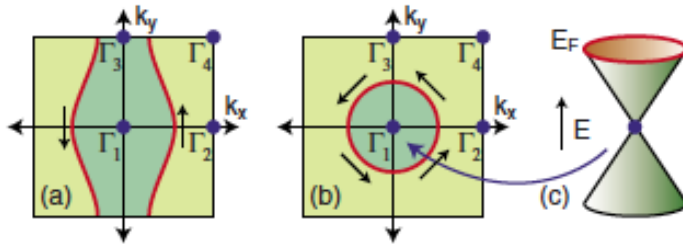
M. König et al. Science **318**, 766 (2007)



(Tiré de M. Hasan and C. Kane, RMP **82**, 3054 (2010))

Systèmes invariants par renversement du temps en 3D : prédictions théoriques

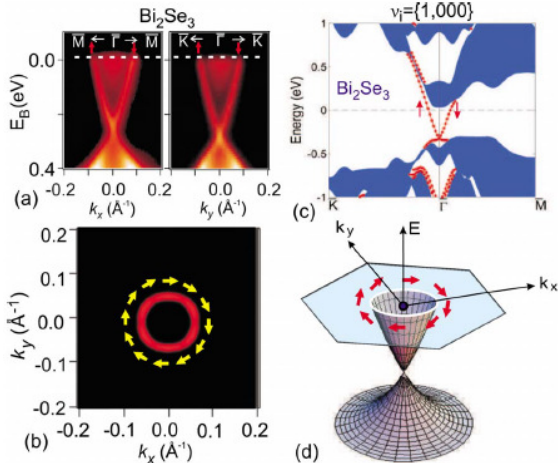
Fu, Kane, Mele (2007), Moore and Balents (2007), Roy (2009)



(Tiré de M. Hasan and C. Kane, RMP **82**, 3054 (2010))

Observations sur Bi_2Se_3

Hasan et al. (2008)



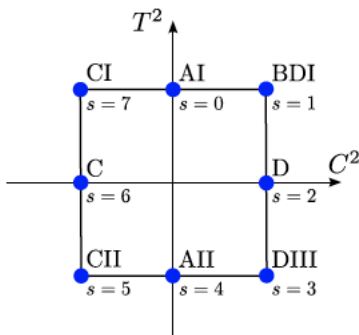
(Tiré de M. Hasan and C. Kane, RMP **82**, 3054 (2010))

Classification des isolants et supraconducteurs topologiques

A. Schnyder, S. Ryu, A. Furusaki, A. Ludwig (2008),

A. Kitaev (2009). Accent mis sur les **symétries discrètes**.

- Antilinéaire T (renv. du temps), $T^2 = \pm I$, $[T, H] = 0$.
- Antilinéaire C (conjugaison de charge), $C^2 = \pm I$, $\{T, H\} = 0$.
- Linéaire S (permutation de sous-réseaux), $S = CT$ si C et T existent **simultanément**, $\{S, H\} = 0$.



(Tiré de Chiu et al., RMP **88**, 035005 (2016))

Classification des isolants et supraconducteurs topologiques

Class	T	C	S	0	δ						
					1	2	3	4	5	6	7
A	0	0	0	$\mathbb{Z}$	0	$\mathbb{Z}$	0	$\mathbb{Z}$	0	$\mathbb{Z}$	0
AIII	0	0	1	0	$\mathbb{Z}$	0	$\mathbb{Z}$	0	$\mathbb{Z}$	0	$\mathbb{Z}$
AI	+	0	0	$\mathbb{Z}$	0	0	0	$2\mathbb{Z}$	0	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}_2$
BDI	+	+	1	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}$	0	0	0	$2\mathbb{Z}$	0	$\mathbb{Z}_2$
D	0	+	0	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}$	0	0	0	$2\mathbb{Z}$	0
DIII	-	+	1	0	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}$	0	0	0	$2\mathbb{Z}$
AII	-	0	0	$2\mathbb{Z}$	0	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}$	0	0	0
CII	-	-	1	0	$2\mathbb{Z}$	0	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}$	0	0
C	0	-	0	0	0	$2\mathbb{Z}$	0	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}$	0
CI	+	-	1	0	0	0	$2\mathbb{Z}$	0	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}_2$	$\mathbb{Z}$

Effets de symétries continues (spin)

U(1)	AII $\rightarrow$ A	CII $\rightarrow$ AIII	D $\rightarrow$ A	DIII $\rightarrow$ AIII
SU(2)	AII $\rightarrow$ AI	CII $\rightarrow$ BDI	D $\rightarrow$ C	DIII $\rightarrow$ CI

(He^3 A est en classe D, He^3 B est en classe DIII.)

ARTICLE

<https://doi.org/10.1038/s41586-019-0954-4>

A complete catalogue of high-quality topological materials

M. G. Vergniory^{1,2,3,11}, L. Elcoro^{4,11}, Claudia Felser⁵, Nicolas Regnault⁶, B. Andrei Bernevig^{7,8,9*} & Zhijun Wang^{7,10*}

Using a recently developed formalism called topological quantum chemistry, we perform a high-throughput search of 'high-quality' materials (for which the atomic positions and structure have been measured very accurately) in the Inorganic Crystal Structure Database in order to identify new topological phases. We develop codes to compute all characters of all symmetries of 26,938 stoichiometric materials, and find 3,307 topological insulators, 4,078 topological semimetals and no fragile phases. For these 7,385 materials we provide the electronic band structure, including some electronic properties (bandgap and number of electrons), symmetry indicators, and other topological information. Our results show that more than 27 per cent of all materials in nature are topological. We provide an open-source code that checks the topology of any material and allows other researchers to reproduce our results.

Bradlyn et al. Nature **547**, 298 (2017)

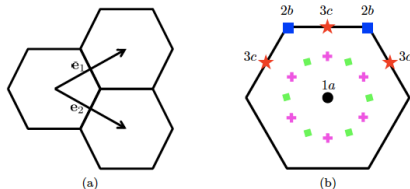


FIG. S2. Lattice basis vectors (a) and Wyckoff positions (b) of the hexagonal lattice. The (maximal) $1a$, $2b$ and $3c$ Wyckoff positions are indicated by a black dot, blue squares, and red stars, respectively. The non-maximal $6d$ and $6e$ positions are indicated by purple crosses and green diamonds, respectively. The multiplicity is determined by the index of the stabilizer group with respect to the point group C_{6v} ($6mm$).

On part d'une représentation irréductible ρ (orbitales atomiques) du stabilisateur G_q d'un point q . Par exemple, $q = q_1^b$, $G_q = C_{3v}$, et ρ est la représentation de dimension 2 engendrée par $|p_z \uparrow\rangle$ et $|p_z \downarrow\rangle$. Par induction (Zak 1980), on construit une représentation $\rho \uparrow G$ du groupe crystallographique complet G . Ici, $\rho \uparrow G$ comprend 4 bandes, et est élémentaire, au sens de Zak et Michel (1999-2001).

Contrairement à ce que pensaient Zak et Michel, Bernevig et al. ont découvert qu'une représentation élémentaire n'est pas toujours **connexe**. Les **composantes connexes propres** sont alors associées à des **bandes topologiques**.

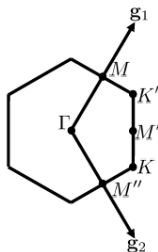
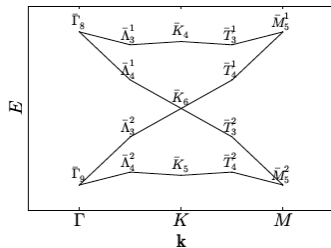


FIG. S3. Reciprocal lattice basis vectors and high symmetry points of the hexagonal lattice.

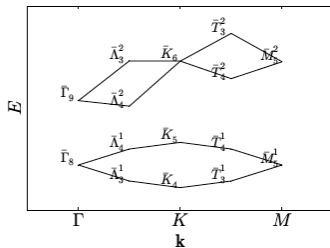
BR	Γ	K	M
$\rho \uparrow G$	$\bar{\Gamma}_8 \oplus \bar{\Gamma}_9$	$\bar{K}_4 \oplus \bar{K}_5 \oplus \bar{K}_6$	$\bar{M}_5 \oplus \bar{M}_5$

TABLE S4. Little group representations for the energy bands induced from p_z orbitals in graphene.

La chimie quantique topologique



(a)



(b)

La **transition** entre les deux structures peut être induite en **variant** les différents couplages spin-orbite possibles.

Conclusion : Un âge d'or pour la matière topologique

Comparaison avec la période “écossaise” (1865-1890)

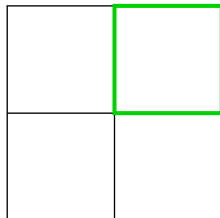
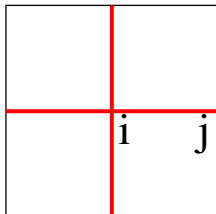
- Un point commun : le rôle essentiel joué par les **classifications**.
- Deux différences majeures :
 - Des liens intenses avec la réalité expérimentale : calcul quantique, simulations quantiques et classiques, chimie quantique.
 - Des liens aussi avec les mathématiques : K-théorie topologique (Atiyah-Singer) et algébrique (Connes, Bellissard), théories des champs topologiques (Jones, Witten),...

Le modèle du code torique de Kitaev

A. Kitaev, Ann. Phys. **303**, 2, (2003)

Charge Z_2 $U_i = \prod_j^{(i)} \sigma_{ij}^x$

Flux Z_2 $B_\square = \prod_{ij \in \square} \sigma_{ij}^z$



$$H_{\text{Kitaev}} = -\frac{\Delta_c}{2} \sum_i U_i - \frac{\Delta_f}{2} \sum_{\square} B_{\square}$$

Excitations **localisées** avec un **gap en énergie**.

La **dégénérescence** de l'état fondamental dépend de la **topologie globale** du réseau.

Dégénérescence 2 des fondamentaux sur un cylindre

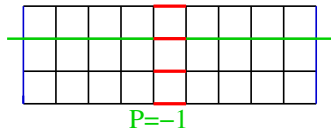
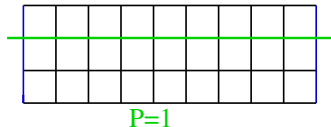
Symétries non locales:

Opérateurs de **lignes** :

$$P_i = \prod_j \sigma_{ij}^z$$

Opérateurs de **colonnes** :

$$Q_j = \prod_i \sigma_{ij}^x$$

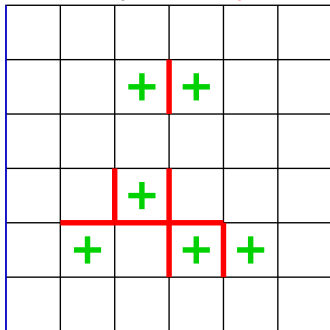


$$\{P_i, Q_j\} = 0$$

Robustesse sous l'effet d'erreurs locales

Bruit électrique:

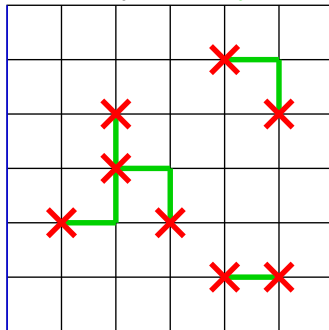
$$\prod_{ij \in \text{cluster}} \sigma_{ij}^x$$



Crée des flux Z_2 localisés.

Bruit magnétique :

$$\prod_{ij \in \text{cluster}} \sigma_{ij}^z$$



Crée des charges Z_2 localisées.

Ces erreurs produisent des états virtuels au-dessus du gap.

