

Chapitre 6

Topologie dans un réseau : l'exemple des points de Dirac

Sommaire

1	Points de Dirac dans une zone de Brillouin	2
1-1	Relation de dispersion linéaire	2
1-2	Chiralité des points de Dirac	2
2	Le réseau en « mur de briques »	3
2-1	Hamiltonien de Hubbard	3
2-2	Paires de points de Dirac	4
3	Le réseau du graphène	5
3-1	Maille élémentaire et réseau réciproque	5
3-2	Points de Dirac pour le graphène	6
3-3	Remarques complémentaires	7
4	Le graphène en version "atomes froids"	8
4-1	Réalisation du réseau en « mur de briques »	8
4-2	Oscillations de Bloch et points de Dirac	9
4-3	Perspectives	10
5	Références	11

Les points de Dirac jouent un rôle central dans de nombreux phénomènes de la matière condensée. On les rencontre notamment dans le graphène, pour lequel ils confèrent aux électrons de conduction un mouvement ultra-relativiste. Ils apparaissent également dans les isolants topologiques, où ils sont l'origine des états de bord conducteurs.

Un point de Dirac est caractérisé par un contact entre deux bandes avec une relation de dispersion linéaire, ce qui permet d'illustrer plusieurs caractéristiques bien connues de l'équation de Dirac pour des particules de masse nulle, comme le paradoxe de Klein ou le *Zitterbewegung*. Cette relation de dispersion très différente d'un bas de bande habituel (où $E \propto q^2$) se manifeste également en présence d'un champ magnétique, en donnant naissance à un effet Hall quantique entier « anormal ».

L'existence des points de Dirac est une conséquence de la géométrie, ou plutôt de la topologie (au sens défini plus loin) de la structure des bandes. La flexibilité des réseaux optiques a conduit plusieurs auteurs à imaginer des structures de faisceaux lumineux permettant d'obtenir de tels points dans la structure de bande (Zhu et al. 2007; Wunsch et al. 2008; Lee et al. 2009). Nous allons dans ce chapitre dégager d'abord les caractéristiques d'un réseau périodique permettant de faire apparaître des points de Dirac. Nous décrirons ensuite la première mise en évidence de ces points de Dirac avec des atomes froids, faite dans le groupe de T. Esslinger à Zurich (Tarruell et al. 2012).

1 Points de Dirac dans une zone de Brillouin

1-1 Relation de dispersion linéaire

De manière générale, on définit un point de Dirac comme un point \mathbf{q}_D dans la zone de Brillouin où deux bandes se touchent de manière linéaire (figure 6.1). Dans le cas particulier où les deux bandes se touchent de manière isotrope, la relation de dispersion au voisinage de \mathbf{q}_D s'écrit

$$E(\mathbf{q}) = \pm \hbar c |\mathbf{q} - \mathbf{q}_D| + \epsilon_0, \quad (6.1)$$

où c a la dimension d'une vitesse et ϵ_0 est l'énergie au point de contact.

Dans le graphène, le potentiel chimique est égal à ϵ_0 de sorte que le comportement des électrons de conduction permet de simuler l'électrodynamique quantique de fermions de masse nulle. La vitesse de groupe c aux points de Dirac y est environ $1/300^{\text{ème}}$ de la vitesse de la lumière.

La relation de dispersion (6.1) peut se rencontrer dès la dimension 1. Toutefois, l'aspect bi-dimensionnel du graphène ajoute une deuxième caractéristique essentielle, la chiralité de ces points de Dirac, que nous allons maintenant décrire.

1-2 Chiralité des points de Dirac

Pour donner une intuition de l'origine de cette chiralité, considérons un réseau dans un modèle de liaisons fortes, tel que la maille du réseau

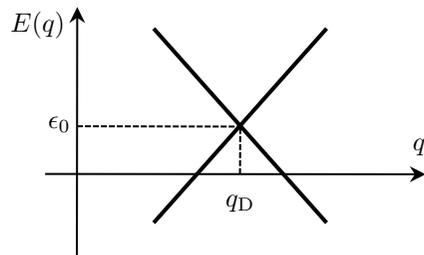


FIGURE 6.1. Point de Dirac

comporte deux sites A et B . Supposons de plus qu'une particule sur un site A (resp. B) ne peut sauter que sur un site de type B (resp. A), ce site appartenant ou bien à la même cellule, ou bien à une cellule adjacente (voir figures 6.2 et 6.4).

Si l'énergie sur site est la même pour A et B ($E_A = E_B \equiv \epsilon_0$), on sait (cf. cours 3) que l'hamiltonien de Hubbard dans l'espace réciproque $\hat{H}(\mathbf{q})$ est une matrice 2×2 du type :

$$\hat{H}(\mathbf{q}) = \begin{pmatrix} \epsilon_0 & f^*(\mathbf{q}) \\ f(\mathbf{q}) & \epsilon_0 \end{pmatrix}, \quad (6.2)$$

dont les énergies propres sont

$$E_{\pm}(\mathbf{q}) = \epsilon_0 \pm |f(\mathbf{q})|. \quad (6.3)$$

Nous déterminerons un peu plus loin la valeur explicite de la fonction $f(\mathbf{q})$ pour deux types de réseaux, le réseau carré en forme de « mur de briques » et le réseau hexagonal du graphène.

Plaçons-nous à deux dimensions, de sorte que \mathbf{q} est un vecteur (q_x, q_y) . Un point de Dirac \mathbf{q}_D est un point de la zone de Brillouin pour lequel

$$f(\mathbf{q}_D) = 0, \quad (6.4)$$

de sorte que les deux énergies propres (6.3) sont dégénérées. Posons au voisinage de \mathbf{q}_D

$$\delta \mathbf{q} = \mathbf{q} - \mathbf{q}_D = \delta q (\cos \varphi \mathbf{u}_x + \sin \varphi \mathbf{u}_y) \quad (6.5)$$

et supposons que sur ce voisinage, on a le développement

$$f(\mathbf{q}) = \hbar c (\delta q_x \pm i \delta q_y) = \hbar c \delta q e^{\pm i \varphi}, \quad (6.6)$$

Nous verrons un peu plus loin que ce développement au voisinage d'un zéro est, moyennant une généralisation très simple, naturel pour la fonction complexe $f(q_x, q_y)$. Au voisinage de \mathbf{q}_D , l'hamiltonien (6.2) s'écrit donc

$$f(\mathbf{q}) = \hbar c (\delta q_x + i \delta q_y) : \quad \hat{H}(\mathbf{q}) = \epsilon_0 \hat{1} + \hbar c \hat{\sigma} \cdot \delta \mathbf{q}, \quad (6.7)$$

$$f(\mathbf{q}) = \hbar c (\delta q_x - i \delta q_y) : \quad \hat{H}(\mathbf{q}) = \epsilon_0 \hat{1} + \hbar c \hat{\sigma} \cdot \delta \mathbf{q}^*, \quad (6.8)$$

où les $\hat{\sigma}_j$ ($j = x, y$) sont les matrices de Pauli

$$\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}. \quad (6.9)$$

L'hamiltonien (6.7–6.8) est formellement identique à celui d'une particule de spin 1/2 au voisinage d'un zéro du champ magnétique. Dans la base $|+\rangle_z, |-\rangle_z$ de $\hat{\sigma}_z$, c'est-à-dire la base des fonctions de Wannier $|w_A\rangle, |w_B\rangle$ centrées sur les sites A et B , les états propres $|\chi_{\pm}\rangle$ de (6.7–6.8) associés aux énergies $E_{\pm}(\mathbf{q})$ données en (6.3) sont du type :

$$f(\mathbf{q}) = \hbar c(\delta q_x + i\delta q_y) : \quad |\chi_{\pm}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \pm e^{i\varphi} \end{pmatrix} \quad (6.10)$$

$$f(\mathbf{q}) = \hbar c(\delta q_x - i\delta q_y) : \quad |\chi_{\pm}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \pm e^{-i\varphi} \end{pmatrix} \quad (6.11)$$

La chiralité due au terme $e^{\pm i\varphi}$ apparaît clairement sur ces expressions. Plus précisément, si on considère un cercle centré sur le point de Dirac et qu'on suit adiabatiquement un des deux états propres $|\chi_{\pm}\rangle$ sur ce cercle, la phase géométrique accumulée vaut $\pm\pi$, correspondant au changement de signe bien connu d'un spin 1/2 quand il effectue une rotation de 2π .

2 Le réseau en « mur de briques »

Avant de présenter le cas du graphène, avec son réseau hexagonal régulier, considérons le réseau en mur de briques représenté sur la figure 6.2b, qui est légèrement plus simple à traiter mathématiquement et qui correspond à ce qui a été réalisé par le groupe de Zurich. Ce réseau est obtenu en partant d'un réseau carré de maille a (fig. 6.2a) et en supprimant un lien horizontal sur deux, les liens verticaux étant tous conservés¹. Notons qu'on peut passer de ce mur de briques au graphène par une déformation continue en prenant des liaisons articulées aux nœuds des réseaux.

1. Un maçon nous dirait que pour un vrai mur de briques, il faudrait intervertir lignes horizontales et verticales, mais nous prenons ici la convention utilisée par Tarruell et al. (2012).

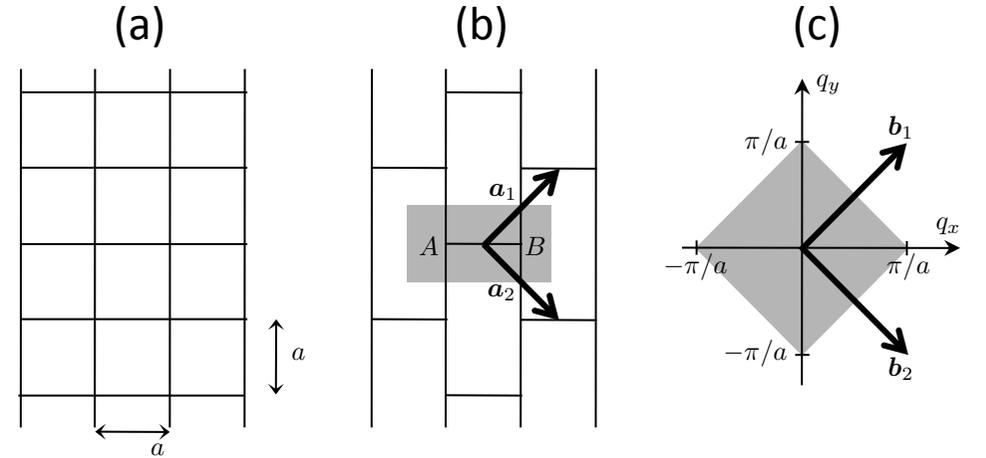


FIGURE 6.2. Réseau « mur de briques ». (a) Réseau carré de côté a . (b) On obtient le réseau « mur de briques » en supprimant un lien sur deux selon la direction horizontale. (c) Espace réciproque et zone de Brillouin.

2-1 Hamiltonien de Hubbard

La maille élémentaire de ce réseau, représentée en grisé sur la figure 6.2b comporte deux sites, notés A et B . On génère le réseau en copiant la cellule unité selon le réseau de Bravais carré

$$\mathcal{B} \equiv \{r_j = j_1 \mathbf{a}_1 + j_2 \mathbf{a}_2, j_1, j_2 \in \mathbb{Z}\} \quad (6.12)$$

avec les deux vecteurs dans la base cartésienne $\mathbf{u}_x, \mathbf{u}_y$:

$$\mathbf{a}_1 = a \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{a}_2 = a \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}. \quad (6.13)$$

Le réseau de Bravais de l'espace réciproque est également carré, engendré par les deux vecteurs

$$\mathbf{b}_1 = \frac{\pi}{a} \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{b}_2 = \frac{\pi}{a} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}. \quad (6.14)$$

Les vecteurs $\mathbf{b}_1, \mathbf{b}_2$ vérifient bien la relation générale

$$\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{b}_j = 2\pi \delta_{i,j}. \quad (6.15)$$

La zone de Brillouin correspondante est représentée en grisé sur la figure 6.2c.

Plaçons-nous dans le régime des liaisons fortes et notons $-J_x, -J_y$ les éléments de matrice tunnel le long des directions horizontale et verticale de la figure 6.2b. Rappelons les règles d'écriture de l'hamiltonien de Hubbard, déjà vues en cours 4. On sait en toute généralité que les fonctions propres de l'hamiltonien sont les fonctions de Bloch $\psi_{\mathbf{q}}(\mathbf{r}) = e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} u_{\mathbf{q}}(\mathbf{r})$. Le vecteur \mathbf{q} peut être choisi dans la zone de Brillouin et $u_{\mathbf{q}}(\mathbf{r})$ est une fonction périodique sur le réseau. Dans la limite des liaisons fortes et en se limitant à la bande fondamentale, l'ensemble des fonctions périodiques sur le réseau est un espace vectoriel de dimension 2, chaque fonction étant caractérisée par deux coefficients (α, β) :

$$|u_{\mathbf{q}}\rangle = \alpha_{\mathbf{q}} \left(\sum_j |w_{A,j}\rangle \right) + \beta_{\mathbf{q}} \left(\sum_j |w_{B,j}\rangle \right), \quad (6.16)$$

où $|w_{A/B,j}\rangle$ sont les fonctions de Wannier centrées sur les nœuds A/B de la cellule j . La fonction de Bloch correspondante s'écrit quant à elle

$$|\psi_{\mathbf{q}}\rangle = \sum_j e^{i\mathbf{r}_j\cdot\mathbf{q}} (\alpha_{\mathbf{q}} |w_{A,j}\rangle + \beta_{\mathbf{q}} |w_{B,j}\rangle), \quad (6.17)$$

notre but étant de trouver les valeurs $(\alpha_{\mathbf{q}}, \beta_{\mathbf{q}})$ pour que $|\psi_{\mathbf{q}}\rangle$ soit état propre de l'hamiltonien de Hubbard.

Écrivons explicitement cet hamiltonien. Les énergies de la particule sur un site A ou sur un site B sont égales, et notées E_0 . L'hamiltonien de Hubbard contient par hypothèse uniquement les termes de saut entre proches voisins. Quand un électron est sur un atome de type B , il peut uniquement sauter vers un site A , qui peut être celui de sa propre cellule (j , saut horizontal) ou celui des deux cellules adjacentes ($j + \mathbf{a}_1$ ou $j + \mathbf{a}_2$, sauts verticaux). Il en va de même pour un électron sur le site A de la cellule j , qui peut sauter vers (B, j) , $(B, j - \mathbf{a}_1)$ et $(B, j - \mathbf{a}_2)$.

Posons que $|\psi_{\mathbf{q}}\rangle$ défini par (6.17) est état propre de cet hamiltonien de Hubbard avec la valeur propre $E(\mathbf{q})$, et projetons cette équation aux valeurs propres sur une cellule donnée j . On arrive au système 2×2 pour les

coefficients $(\alpha_{\mathbf{q}}, \beta_{\mathbf{q}})$:

$$\hat{\mathcal{H}}(\mathbf{q}) \begin{pmatrix} \alpha_{\mathbf{q}} \\ \beta_{\mathbf{q}} \end{pmatrix} = E(\mathbf{q}) \begin{pmatrix} \alpha_{\mathbf{q}} \\ \beta_{\mathbf{q}} \end{pmatrix}, \quad (6.18)$$

où l'hamiltonien de Hubbard dans l'espace réciproque a la structure proposée en (6.2). En particulier le coefficient $f(\mathbf{q})$ correspond au couplage d'un site B donné (j_x, j_y) avec ses trois voisins de type A : l'un de ses voisins appartient à la même cellule unité (lien horizontal J_x), le deuxième à la cellule $(j_x + 1, j_y)$ et le troisième à la cellule $(j_x, j_y + 1)$ (liens verticaux J_y). On a donc

$$f(\mathbf{q}) = -J_x - J_y (e^{ia_1\cdot\mathbf{q}} + e^{ia_2\cdot\mathbf{q}}) = -J_x - 2J_y e^{iaq_x} \cos(aq_y). \quad (6.19)$$

Les points de Dirac, s'ils existent, correspondent aux zéros de cette fonction et sont donc obtenus par

$$\sin(aq_x) = 0 \quad \Rightarrow \quad q_x = 0 \quad \text{mod. } \pi/a \quad (6.20)$$

$$\cos(aq_x) \cos(aq_y) = -\frac{J_x}{2J_y}. \quad (6.21)$$

2-2 Paires de points de Dirac

L'existence de solutions possibles au système d'équations (6.20-6.21) dépend de la valeur du rapport $J_x/(2J_y)$:

- Si $J_x > 2J_y$, ce système n'a pas de solution. La fonction $f(\mathbf{q})$ ne s'annule en aucun point de la zone de Brillouin et il n'y a pas de points de Dirac. Les deux sous-bandes $E_0 \pm |f(\mathbf{q})|$ sont séparées par un gap non nul.
- Si $J_x = 2J_y$, la fonction $f(\mathbf{q})$ s'annule aux quatre coins de la zone de Brillouin. Il s'agit d'un zéro d'ordre deux selon la direction y , donc pas d'un point de Dirac au sens strict du terme.
- Si $J_x < 2J_y$, la fonction $f(\mathbf{q})$ s'annule sur deux points de Dirac situés symétriquement sur l'axe vertical $q_x = 0$, aux points tels que $\cos(aq_y) = -J_x/(2J_y)$ (figure 6.3). Quand J_x devient très petit devant J_y , ces points se rapprochent de $q_y = \pm\pi/(2a)$.

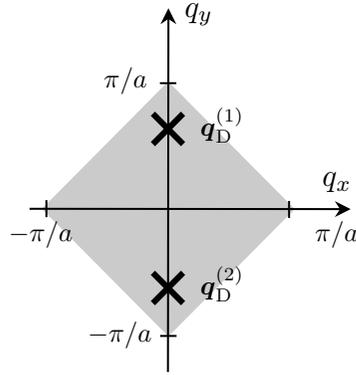


FIGURE 6.3. Positions des deux points de Dirac pour le réseau en « mur de briques », dans le cas $J_x < 2J_y$.

Plaçons-nous dans le cas $J_x < 2J_y$ et développons la fonction $f(\mathbf{q})$ au voisinage d'un point de Dirac \mathbf{q}_D . On trouve :

$$f(\mathbf{q}) \approx iaJ_x [\delta q_x + i \delta q_y \tan(aq_{D,y})], \quad (6.22)$$

ce qui est voisin de la forme particulière supposée en (6.6). Plus précisément, puisque $\tan(aq_{D,y})$ n'a pas le même signe pour les deux points de Dirac (il est négatif pour le point situé dans la partie supérieure de la zone de Brillouin, positif pour l'autre), les deux points de Dirac ont des chiralités opposées. On note que la fonction $f(\mathbf{q})$ n'est généralement pas isotrope autour des points de Dirac, sauf si $\tan(aq_{D,y}) = 1$, ce qui est obtenu pour $J_x = \sqrt{2} J_y$.

Le fait que les points de Dirac apparaissent par paires est une conséquence directe de l'invariance par renversement du temps du problème considéré. Nous avons vu au cours 2 que cette invariance entraîne que si $\psi_{\mathbf{q}}$ est état propre pour la valeur propre $E(\mathbf{q})$, alors $\psi_{-\mathbf{q}} \propto \psi_{\mathbf{q}}^*$ est état propre pour la même valeur propre. On en déduit que si $\mathbf{q}_D^{(1)}$ est un point de Dirac associé à une certaine chiralité, $\mathbf{q}_D^{(2)} = -\mathbf{q}_D^{(1)}$ est également un point de Dirac, avec une chiralité opposée du fait de la conjugaison complexe intervenant dans $\psi_{-\mathbf{q}} \propto \psi_{\mathbf{q}}^*$.

Quand on diminue continûment le paramètre J_x/J_y et qu'on passe sur la valeur 2, les points de Dirac apparaissent superposés l'un sur l'autre en un coin de la zone de Brillouin, ce qui est encore compatible avec $\mathbf{q}_D^{(2)} = -\mathbf{q}_D^{(1)}$, puisque $\mathbf{q}_D^{(2)}$ et $\mathbf{q}_D^{(1)}$ diffèrent alors d'un vecteur du réseau réciproque (Montambaux et al. 2009).

3 Le réseau du graphène

L'étude des points de Dirac du graphène se fait d'une manière très voisine de ce que nous venons de faire pour le réseau en « mur de briques », et nous nous contenterons donc de présenter les grandes lignes de la démarche à suivre pour les trouver.

3-1 Maille élémentaire et réseau réciproque

Le graphène est obtenu en plaçant un atome de carbone par site d'une structure hexagonale de côté a . La cellule unité de cette structure comporte deux sites, notés A et B sur la figure 6.4. On génère le réseau hexagonal en copiant cette cellule unité (représentée en grisé sur la figure) sur tous les nœuds du réseau de Bravais triangulaire

$$\mathcal{B} \equiv \{\mathbf{r}_j = j_1 \mathbf{a}_1 + j_2 \mathbf{a}_2, j_1, j_2 \in \mathbb{Z}\} \quad (6.23)$$

où les vecteurs $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2$ sont définis par (voir aussi la figure 6.4) :

$$\mathbf{a}_1 = \frac{\sqrt{3}a}{2} \begin{pmatrix} \sqrt{3} \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{a}_2 = \frac{\sqrt{3}a}{2} \begin{pmatrix} \sqrt{3} \\ -1 \end{pmatrix}. \quad (6.24)$$

Le réseau réciproque $\mathcal{B}' \equiv \{\mathbf{Q}_j = j_1 \mathbf{b}_1 + j_2 \mathbf{b}_2, j_1, j_2 \in \mathbb{Z}\}$ est engendré par les vecteurs

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{3a} \begin{pmatrix} 1 \\ \sqrt{3} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{3a} \begin{pmatrix} 1 \\ -\sqrt{3} \end{pmatrix}. \quad (6.25)$$

Le réseau réciproque est donc également triangulaire.

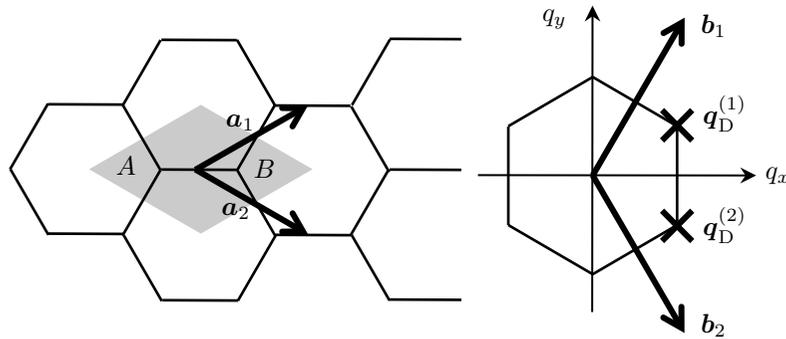


FIGURE 6.4. Gauche : structure hexagonale du graphène. Cette structure se compose d'une cellule unité à deux sites A et B , qu'on répète en la disposant sur les nœuds d'un réseau triangulaire $j_1 \mathbf{a}_1 + j_2 \mathbf{a}_2$, $j_1, j_2 \in \mathbb{Z}$. Une cellule unité est représentée en grisé. Droite : réseau réciproque pour le graphène, $j_1 \mathbf{b}_1 + j_2 \mathbf{b}_2$, $j_1, j_2 \in \mathbb{Z}$. La zone de Brillouin est hexagonale et les points de Dirac sont les sommets de cet hexagone.

Zone de Brillouin. Rappelons que les fonctions de Bloch $|\psi_{\mathbf{q}}\rangle$ sont déterminées en leur imposant d'être états propres simultanément de l'hamiltonien et des opérateurs de translation $\hat{T}_{\mathbf{a}_1}$ et $\hat{T}_{\mathbf{a}_2}$ laissant le réseau invariant. Les valeurs propres associées à ces deux opérations de translation sont notées $e^{i\theta_1} = e^{i\mathbf{a}_1 \cdot \mathbf{q}}$ et $e^{i\theta_2} = e^{i\mathbf{a}_2 \cdot \mathbf{q}}$. La zone de Brillouin est un domaine² centré en $\mathbf{q} = 0$, pour lequel un et seul vecteur \mathbf{q} correspond à un couple (θ_1, θ_2) . C'est un hexagone de côté $4\pi/(3\sqrt{3}a)$, dont l'orientation est pivotée de 30° par rapport aux hexagones du réseau dans l'espace réel (figure 6.4).

3-2 Points de Dirac pour le graphène

Par un raisonnement identique à celui mené pour le réseau « mur de briques », on trouve que l'hamiltonien de Hubbard dans l'espace réci-

² Plus précisément, on la définit comme la maille de Wigner-Seitz centrée en $\mathbf{q} = 0$ du réseau réciproque.

proque a la forme annoncée en (6.2) (Wallace 1947)

$$\hat{H}(\mathbf{q}) = \begin{pmatrix} E_0 & f^*(\mathbf{q}) \\ f(\mathbf{q}) & E_0 \end{pmatrix}, \quad (6.26)$$

avec la fonction $f(\mathbf{q})$ définie par

$$f(\mathbf{q}) = -J(1 + e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{a}_1} + e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{a}_2}). \quad (6.27)$$

Cherchons les zéros de $f(\mathbf{k})$, en annulant à la fois la partie réelle f_r et la partie imaginaire f_i :

$$\text{Annulation de } f_r(\mathbf{q}) \quad : \quad 1 + \cos(\mathbf{q} \cdot \mathbf{a}_1) + \cos(\mathbf{q} \cdot \mathbf{a}_2) = 0,$$

$$\text{Annulation de } f_i(\mathbf{q}) \quad : \quad \sin(\mathbf{q} \cdot \mathbf{a}_1) + \sin(\mathbf{q} \cdot \mathbf{a}_2) = 0. \quad (6.28)$$

Deux types de zéros apparaissent. Le premier correspond à

$$\begin{aligned} \cos(\mathbf{q} \cdot \mathbf{a}_1) &= \cos(\mathbf{q} \cdot \mathbf{a}_2) = -\frac{1}{2}, \\ \sin(\mathbf{q} \cdot \mathbf{a}_1) &= -\sin(\mathbf{q} \cdot \mathbf{a}_2) = -\frac{\sqrt{3}}{2} \end{aligned} \quad (6.29)$$

c'est-à-dire

$$\mathbf{q} \cdot \mathbf{a}_1 = \frac{4\pi}{3} \text{ mod } 2\pi, \quad \mathbf{q} \cdot \mathbf{a}_2 = \frac{2\pi}{3} \text{ mod } 2\pi. \quad (6.30)$$

Le deuxième type de zéro est donné par

$$\mathbf{q} \cdot \mathbf{a}_1 = \frac{2\pi}{3} \text{ mod } 2\pi, \quad \mathbf{q} \cdot \mathbf{a}_2 = \frac{4\pi}{3} \text{ mod } 2\pi. \quad (6.31)$$

En écrivant le vecteur \mathbf{q} solution sous la forme $\mathbf{q} = \alpha_1 \mathbf{b}_1 + \alpha_2 \mathbf{b}_2$, on en déduit immédiatement les coordonnées (α_1, α_2) de ces points de Dirac dans l'espace réciproque. Il y a deux points de Dirac (un de chaque chiralité) dans la zone de Brillouin, et ces points sont localisés en

$$\mathbf{q}_D^{(1)} = \frac{1}{3}(2\mathbf{b}_1 + \mathbf{b}_2) = \frac{2\pi}{3\sqrt{3}a}(\sqrt{3}\mathbf{u}_x + \mathbf{u}_y), \quad (6.32)$$

$$\mathbf{q}_D^{(2)} = \frac{1}{3}(\mathbf{b}_1 + 2\mathbf{b}_2) = \frac{2\pi}{3\sqrt{3}a}(\sqrt{3}\mathbf{u}_x - \mathbf{u}_y). \quad (6.33)$$

Ces points sont situés en bord de zone de Brillouin, aux sommets de l'hexagone limitant cette zone (figure 6.4). Notons que chacun des six sommets

de l'hexagone limitant la zone de Brillouin est un point de Dirac. Toutefois, il faut faire attention au double comptage. Un vecteur \mathbf{q} et un vecteur \mathbf{q}' différant d'un vecteur du réseau réciproque correspondent à un seul état de Bloch. C'est le cas pour les quatre autres sommets de l'hexagone correspondant à la zone de Brillouin : ils se déduisent de ceux marqués sur la figure 6.4 par soustraction de \mathbf{b}_1 , \mathbf{b}_2 et $\mathbf{b}_1 + \mathbf{b}_2$. Par ailleurs, on peut vérifier que la fonction $f(\mathbf{q})$ est au premier ordre isotrope autour de ces deux zéros, avec

$$f(\mathbf{q}) \approx i \frac{3Ja}{2} (\delta q_x \pm i \delta q_y), \quad (6.34)$$

ce qui correspond (au facteur global i près) à la forme annoncée en (6.6). La vitesse c est donnée ici par $c = 3Ja/2$ et elle est de l'ordre de 10^6 m/s pour le graphène (Castro Neto et al. 2009).

3-3 Remarques complémentaires

La chiralité des zéros de $f(\mathbf{q})$. Nous avons vu dans les exemples qui précèdent que la recherche des points de Dirac se ramène à celle des zéros d'une fonction $f(\mathbf{q})$ à deux variables réelles, q_x et q_y , à valeurs dans le plan complexe. Les zéros d'une telle fonction ont généralement une structure de vortex, avec un enroulement de phase positif ou négatif. C'est cet enroulement de phase qui vient donner sa chiralité à un point de Dirac.

Précisons l'origine de cet enroulement de manière très qualitative. Selon la valeur de \mathbf{q} , la partie réelle $f_r(\mathbf{q})$ de $f(\mathbf{q})$ peut être positive ou négative. Les domaines du plan (q_x, q_y) correspondant à une valeur positive de f_r et ceux correspondant à une valeur négative de f_r sont séparés par des lignes (ouvertes ou fermées) le long desquelles f_r s'annule. Il en va de même pour la partie imaginaire f_i , qui s'annule le long d'autres lignes du plan (q_x, q_y) . Un zéro \mathbf{q}_D de la fonction complexe $f(\mathbf{q})$ correspond à un point où deux lignes de zéros, l'une pour f_r , l'autre pour f_i , se croisent. Ce croisement définit généralement³ quatre quadrants, correspondant aux 4 choix possibles pour les signes du couple $(f_r, f_i) : (+, +), (+, -), (-, -), (-, +)$. Selon qu'on trouve cet ordre en tournant autour du zéro dans le sens direct ou dans le sens rétrograde, on a une chiralité ou son opposé pour le point de Dirac.

3. On peut imaginer des solutions plus rares, où le zéro de f_r ou f_i est double, mais nous décrivons ici uniquement la situation « standard ».

Effet Hall quantique anormal. La chiralité des points de Dirac a d'importantes conséquences. Citons-en simplement une ici. Quand on place un tel matériau dans un champ magnétique, les niveaux d'énergie (niveaux de Landau) sont repérés par un entier n et varient en $E_n \propto \sqrt{n}$. En particulier, il y a un niveau d'énergie nul, ce qui est très différent du cas ordinaire où on trouve $E_n \propto (n + 1/2)$. L'apparition de cet état d'énergie nulle peut s'interpréter semi-classiquement en évaluant l'action sur une trajectoire cyclotron dans l'espace réciproque encerclant le point de Dirac. À l'action habituelle vient s'ajouter la phase de Berry associée à la chiralité du point de Dirac, qui remplace $n + 1/2$ par $n + 1/2 \pm 1/2$ (Mikitik & Sharlai 1999); ceci permet en particulier l'apparition d'un état d'énergie nulle, qui joue un rôle important dans l'effet Hall quantique anormal observé sur le graphène (Zhang et al. 2005; Novoselov et al. 2005).

Robustesse des points de Dirac. Supposons que les paramètres du réseau soient choisis tels que la fonction $f(\mathbf{q})$ ait effectivement 2 (ou 4, 6, ...) zéros dans la zone de Brillouin. Quand les paramètres du réseau sont modifiés en maintenant une même énergie pour les deux sites, seule la fonction $f(\mathbf{q})$ change. Mais les zéros de $f(\mathbf{q})$ sont protégés topologiquement par leur chiralité : en d'autres termes, les deux courbes définissant $f_r(\mathbf{q}) = 0$ et $f_i(\mathbf{q}) = 0$ vont continuer à se croiser (en un autre point) si on modifie légèrement ces courbes. La seule manière de faire disparaître les croisements dans ce contexte est de faire fusionner deux zéros, l'un de chiralité positive et l'autre de chiralité négative, en réalisant une situation où les deux courbes $f_r(\mathbf{q}) = 0$ et $f_i(\mathbf{q}) = 0$ deviennent tangentes l'une à l'autre. Pour un remplissage des états de type graphène, ce cas particulier de fusion de points de Dirac correspond à une transition topologique entre une phase semi-métallique et un isolant de bande, et il est étudié en détail par Montambaux et al. (2009).

Énergies sur site. Si les points de Dirac résistent à une modification (légère) de la fonction $f(\mathbf{k})$, il n'en va pas de même vis à vis d'une dissymétrie entre les deux nœuds A et B . Si on modifie l'hamiltonien de Hubbard en donnant une énergie $E_0 + \Delta$ (resp. $E_0 - \Delta$) aux sites A (resp. B), alors les

valeurs propres de

$$\hat{H}(\mathbf{q}) = \begin{pmatrix} E_0 + \Delta & f^*(\mathbf{q}) \\ f(\mathbf{q}) & E_0 - \Delta \end{pmatrix}, \quad (6.35)$$

deviennent

$$E_{\pm}(\mathbf{q}) = E_0 \pm [|f(\mathbf{q})|^2 + \Delta^2]^{1/2} \quad (6.36)$$

et on retrouve deux sous-bandes « ordinaires », séparées par un gap 2Δ et sans propriété topologique remarquable. Si une telle dissymétrie est difficile à créer sur du graphène réel (voir par exemple Montambaux et al. (2009) et refs. in), elle apparaît en revanche aisément dans des réseaux optiques, comme nous allons le voir ci-dessous.

4 Le graphène en version "atomes froids"

Le groupe de Tilman Esslinger à Zurich a récemment réalisé un réseau optique de type « mur de briques », dans lequel il a pu mettre en évidence des points de Dirac et montrer que leurs positions étaient contrôlables grâce au paramètre J_x/J_y . L'existence de ces points de Dirac a été montrée grâce aux oscillations de Bloch, les particules étant transférées avec une forte probabilité de la bande inférieure vers la bande supérieure quand elles passent au voisinage de ces points de contact.

4-1 Réalisation du réseau en « mur de briques »

Le potentiel lumineux utilisé résulte de la superposition de plusieurs ondes lumineuses stationnaires. L'onde la plus intense est une onde stationnaire selon la direction x créant le potentiel

$$V_1(\mathbf{r}) = -V_{\bar{X}} \cos^2(kx + \theta/2) \quad (6.37)$$

où θ est un paramètre que l'on peut ajuster en variant légèrement la fréquence de cette onde. On superpose un réseau optique dans le plan xy formé par deux ondes lumineuses stationnaires selon les directions x et y ,

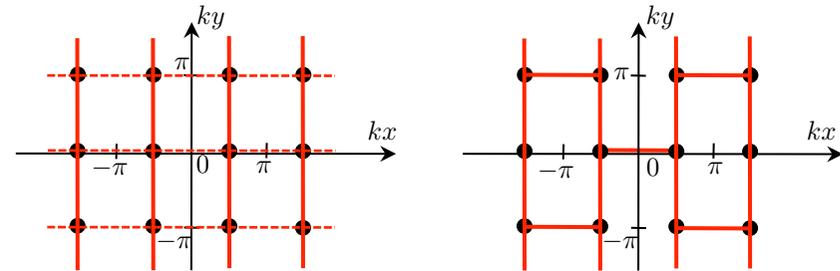


FIGURE 6.5. Construction d'un réseau en « mur de briques » (Tarruell et al. 2012). en Gauche : réseau carré obtenu en superposant $V_1(\mathbf{r}) = -V_{\bar{X}} \sin^2(kx)$ et $V_2^{(a)} = -V_Y \cos^2(ky)$. Droite : augmentation ou diminution des coefficients tunnels horizontaux par le terme $V_2^{(b)}(\mathbf{r}) = -2\sqrt{V_{\bar{X}}V_Y} \cos(kx) \cos(ky)$. Des valeurs typiques sont (en unité de E_r) : $V_{\bar{X}} = 4.0$, $V_Y = 2.0$, $V_X = 0.3$.

verrouillées en phase l'une par rapport à l'autre⁴

$$V_2(\mathbf{r}) = -V_Y \cos^2(ky) - 2\sqrt{V_{\bar{X}}V_Y} \cos(kx) \cos(ky) - V_X \cos^2(kx) \quad (6.38)$$

Les intensités de ces ondes sont choisies telles que

$$V_X \ll \sqrt{V_{\bar{X}}V_Y} \ll V_Y < V_{\bar{X}}. \quad (6.39)$$

En pratique, seuls les trois termes les plus importants sont pertinents pour la formation du réseau recherché et nous négligerons le quatrième terme, $-V_X \cos^2(kx)$, dans notre discussion.

Prenons pour commencer $\theta = \pi$, soit $V_1(\mathbf{r}) = -V_{\bar{X}} \sin^2(kx)$; ce paramètre sera varié ultérieurement, notamment pour obtenir les résultats de la figure 6.8. Avec seulement les termes en V_1 et en $V_2^{(a)} = -V_Y \cos^2(ky)$, on fabrique un réseau carré dont les sites sont les points

$$kx = \pi/2 \text{ [modulo } \pi], \quad ky = 0 \text{ [modulo } \pi]. \quad (6.40)$$

4. Dans l'article de Tarruell et al. (2012), le terme en $\sqrt{V_{\bar{X}}V_Y}$ est réduit par un facteur multiplicatif $\alpha \approx 0.9$ qui caractérise la visibilité de l'interférence entre l'onde stationnaire selon y et celle selon x . Nous omettons ici ce coefficient qui ne joue pas de rôle au niveau de notre description semi-quantitative.

Notons que l'effet tunnel est plus faible selon x que selon y puisque $V_{\bar{X}} > V_{\bar{Y}}$. Le terme en $V_2^{(b)}(\mathbf{r}) = -2\sqrt{V_{\bar{X}}V_{\bar{Y}}}\cos(kx)\cos(ky)$ va venir moduler certains coefficients tunnels (figure 6.5) :

- Les liens verticaux sont centrés sur des points tels que $kx = \pi/2$ modulo π et $ky = \pi/2$ modulo π . Les éléments de matrice tunnels de ces liens sont peu affectés par $V_2^{(b)}$ puisque $V_2^{(b)}(\mathbf{r}) \propto \cos(kx)$ est nul le long de ces liens.
- Les liens horizontaux sont centrés sur des points tels que $kx = 0$ modulo π et $ky = 0$ modulo π . Au centre de ces liens, on a donc $\cos(kx) = \pm 1$ et $\cos(ky) = \pm 1$. Le potentiel $V_2^{(b)}$ y prend une valeur significative et modifie les éléments de matrice tunnel. Deux cas sont possibles :
 - Un lien horizontal centré sur un point tel que $\cos(kx)$ et $\cos(ky)$ sont de même signe (et égaux à ± 1) correspond à une valeur négative de $V_2^{(b)}$ qui vient abaisser la barrière tunnel entre les deux sites concernés par ce lien : l'effet tunnel entre ces deux sites est augmenté.
 - Un lien horizontal centré sur un point tel que $\cos(kx)$ et $\cos(ky)$ sont de signe opposés correspond à une valeur positive de $V_2^{(b)}$ et l'effet tunnel correspondant (déjà faible en absence de $V_2^{(b)}$) est encore diminué.

Au final, on réalise effectivement le réseau en « mur de briques » recherché.

4-2 Oscillations de Bloch et points de Dirac

Pour sonder la position des points de Dirac, la méthode utilisée à Zurich a été d'observer le résultat d'oscillations de Bloch. Ces oscillations se produisent selon la direction x sous l'effet d'une force constante causée par un gradient de champ magnétique. Quand la trajectoire dans l'espace des \mathbf{q} passe au voisinage d'un point de Dirac, l'atome peut avec une forte probabilité être transféré vers la bande supérieure (pour une étude détaillée de cette transition, voir Lim et al. (2012)). Le passage vers la bande excitée peut ensuite être détecté par la technique du *band mapping* présentée au chapitre 2 de ce cours : on éteint adiabatiquement le réseau (durée 0.5 ms)

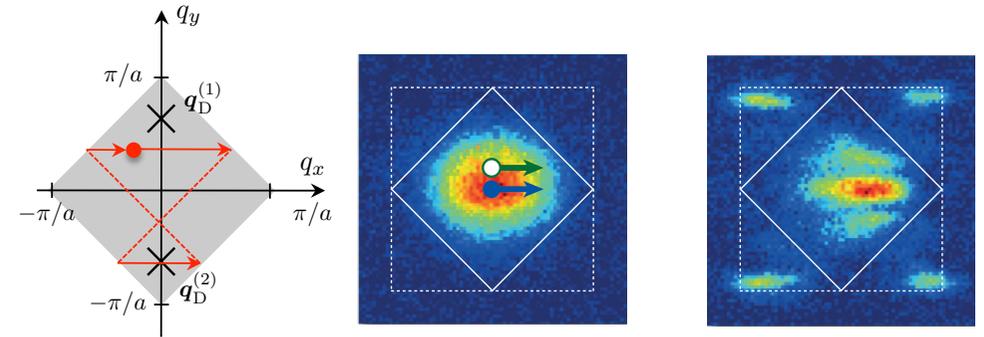


FIGURE 6.6. Gauche : oscillations de Bloch induites par une force le long de l'axe x . Milieu : distribution initiale dans l'espace des \mathbf{q} . Droite : distribution dans l'espace des \mathbf{q} après une oscillation de Bloch (période τ_B). On distingue nettement les atomes qui sont passés au voisinage d'un point de Dirac au cours de l'oscillation et qui ont alors été transférés vers la bande supérieure [figure extraite de Tarruell et al. (2012)].

de sorte qu'un atome reste dans la bande qu'il occupait au début de l'extinction, et on effectue un temps de vol qui révèle ainsi la population de chaque bande.

Le gaz atomique utilisé est un ensemble de fermions polarisé et sans interactions (^{40}K). Les atomes occupent initialement plutôt le centre de la zone de Brillouin et ne rencontrent donc pas dans un premier temps les points de Dirac qui sont situés plutôt en bord de bande (figure 6.3). En revanche, la seconde partie de l'oscillation de Bloch (après réflexion de Bragg sur une paroi de la zone de Brillouin) peut les amener au voisinage des points de Dirac et la transition peut alors se produire (figure 6.6).

La position des pics ayant été transférés dans la bande supérieure renseigne directement sur la position des points de Dirac. Cette position est, rappelons-le, fonction du rapport J_x/J_y , les points disparaissant quand ce rapport devient trop élevé. Le groupe de Zurich a étudié la position des points de Dirac en variant le potentiel $V_{\bar{X}}$. Le résultat, montré sur la figure 6.7, est en bon accord avec les prédictions. Notons que le modèle de liaisons fortes n'est pas quantitativement valable dans ce domaine de paramètres

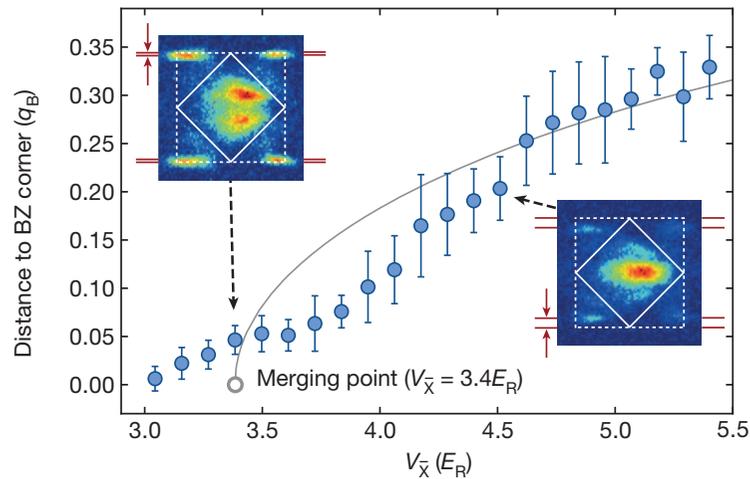


FIGURE 6.7. Variation de la position des points de Dirac sur l'axe $q_x = 0$ en fonction de la profondeur de potentiel $V_{\bar{x}}$. Pour cette figure, $V_Y = 1.8$ et $V_X = 0.28$. On s'attend à ce que les deux points de Dirac fusionnent dans le coin de la zone de Brillouin pour $V_{\bar{x}} = 3.4$, ce qui correspond bien aux observations [figure extraite de Tarruell et al. (2012)].

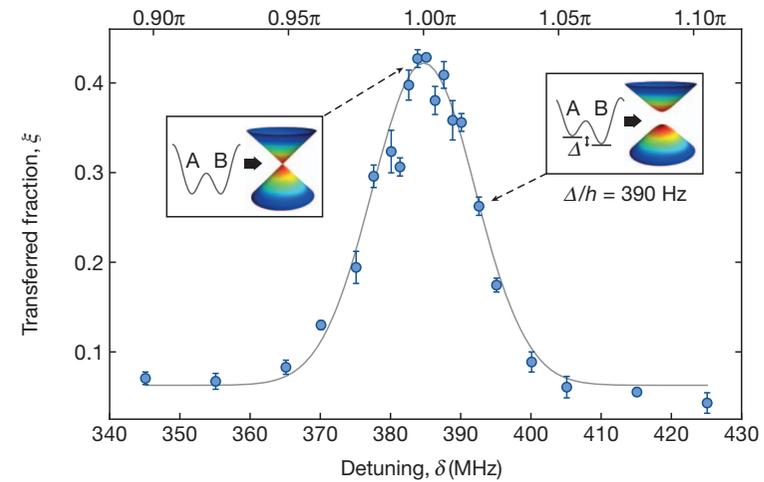


FIGURE 6.8. Disparition des points de Dirac quand on dissymétrise les sites A et B : probabilité de passage vers la bande supérieure en fonction de l'angle θ entrant dans la définition de $V_1(\mathbf{r})$ (6.37). Cet angle θ , indiqué sur l'échelle horizontale supérieure, est contrôlé par le désaccord du faisceau créant cette onde stationnaire, donné sur l'échelle horizontale inférieure [figure extraite de Tarruell et al. (2012)].

et qu'il faut utiliser une diagonalisation numérique de l'hamiltonien du réseau pour déterminer précisément la position des points de Dirac dans ce cas.

Il est également possible de dissymétriser les deux sites A et B du réseau dans cette expérience. Il suffit pour cela de prendre une valeur de θ dans (6.37) différente de π . On a vu en (6.36) que ceci revient à ouvrir un gap entre les deux sous-bandes ; l'oscillation de Bloch ne doit alors plus causer de transition entre ces deux sous-bandes, au moins si la force qui la crée n'est pas trop grande. C'est effectivement ce qui est observé expérimentalement (figure 6.8).

4-3 Perspectives

L'expérience de Zurich a donc permis de mettre en évidence l'existence de points de Dirac dans un réseau optique. La flexibilité offerte par ces réseaux est illustrée sur la figure 6.7, où l'on contrôle la position de ces points, on les fait fusionner, puis disparaître. Cette expérience n'est probablement qu'un point de départ dans cette simulation du graphène par des atomes froids. De nombreux aspects de la physique ultra-relativiste que l'on rencontre au voisinage de points de Dirac devraient pouvoir être abordés avec ces systèmes. Le paradoxe de Klein, c'est-à-dire la transmission quasi-totale d'un paquet d'ondes à travers une barrière de très grande hauteur, devrait ainsi pouvoir être étudié (Katsnelson et al. 2006). Rappelons que ce paradoxe joue un rôle important dans le graphène réel car il empêche la rétro-diffusion des électrons de conduction ; les électrons de Dirac sont insensibles aux effets de localisation observés pour des élec-

trons « ordinaires » (Castro Neto et al. 2009) et se propagent donc ballistiquement sur de longues distances (micromètres). Par ailleurs, la mise en place de champs magnétiques artificiels sur ce réseau devraient permettre d'aborder l'étude de l'effet Hall quantique anormal avec des atomes froids.

Zhu, Shi-Liang, Baigeng Wang & L.-M. Duan (2007), « Simulation and Detection of Dirac Fermions with Cold Atoms in an Optical Lattice », in *Phys. Rev. Lett.* 98 (26), p. 260402.

5 Références

- 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), pp. 109–162.
- Katsnelson, M. I., K. S. Novoselov & A. K. Geim (2006), « Chiral tunnelling and the Klein paradox in graphene », in *Nature Physics* 2, pp. 620–625.
- Lee, Kean Loon, Benoit Grémaud, Rui Han, Berthold-Georg Englert & Christian Miniatura (2009), « Ultracold fermions in a graphene-type optical lattice », in *Phys. Rev. A* 80 (4), p. 043411.
- Lim, Lih-King, Jean-Noël Fuchs & Gilles Montambaux (2012), « Bloch-Zener Oscillations across a Merging Transition of Dirac Points », in *Phys. Rev. Lett.* 108 (17), p. 175303.
- Mikitik, G. P. & Yu. V. Sharlai (1999), « Manifestation of Berry's Phase in Metal Physics », in *Phys. Rev. Lett.* 82 (10), pp. 2147–2150.
- 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.
- Novoselov, KS, AK Geim, SV Morozov, D Jiang, MI Katsnelson, IV Grigorieva, SV Dubonos & AA Firsov (2005), « Two-dimensional gas of massless Dirac fermions in graphene », in *NATURE* 438.7065, 197–200.
- 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* 483.7389, 302–U91.
- Wallace, P. R. (1947), « The Band Theory of Graphite », in *Phys. Rev.* 71 (9), pp. 622–634.
- Wunsch, B, F Guinea & F Sols (2008), « Dirac-point engineering and topological phase transitions in honeycomb optical lattices », in *New Journal of Physics* 10.10, p. 103027.
- Zhang, YB, YW Tan, HL Stormer & P Kim (2005), « Experimental observation of the quantum Hall effect and Berry's phase in graphene », in *NATURE* 438.7065, 201–204.