

Introduction

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

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

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



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

comme nous en verrons plusieurs exemples dans les cours qui vont suivre.

Cette émergence de la topologie en physique est relativement récente. George Gamow, dans son ouvrage de vulgarisation célèbre paru en 1961, *The Great Physicists, from Galileo to Einstein*, citait la topologie comme la seule branche des mathématiques (avec la théorie des nombres) qui n'avait pas trouvé d'application en physique¹. La situation a radicalement changé au tournant des années 1980, notamment avec les travaux précurseurs de THOULESS, KOHMOTO et al. (1982) et HALDANE (1983). Les notions to-

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

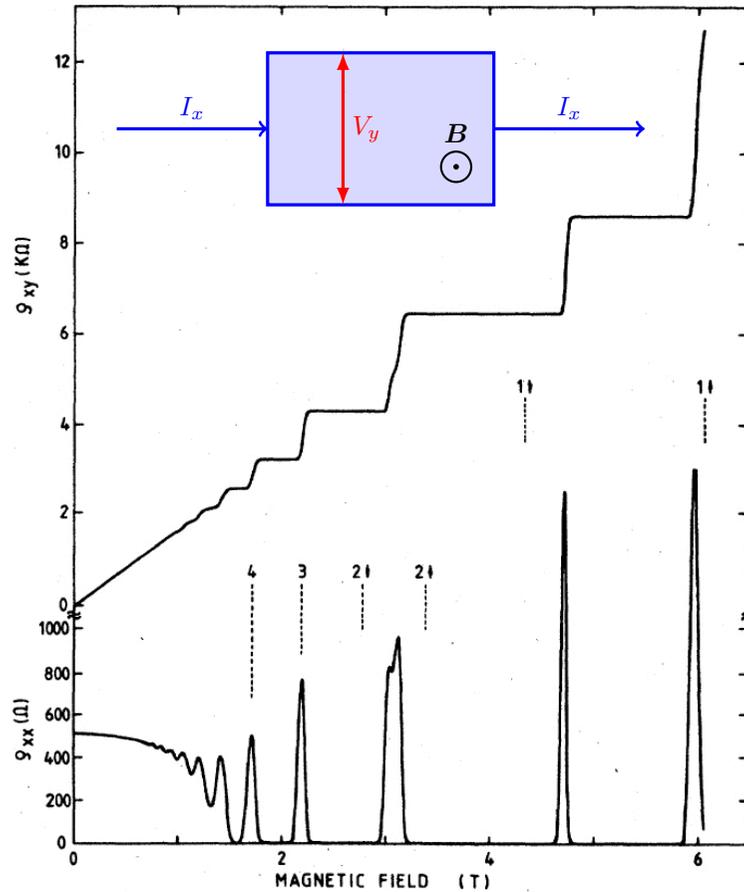


FIGURE 2. Exemple de manifestation d'un ordre topologique dans un gaz 2D d'électrons plongé dans un grand champ magnétique : la résistivité de Hall ρ_{xy} mesurée dans une expérience d'effet Hall quantique présente des plateaux quantifiés quand on varie le champ magnétique ; dans cette mesure, un courant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

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

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

Comme nous l'avons écrit plus haut, le sujet des phases topologiques de la matière est devenu extrêmement vaste et il n'est pas question de tenter de le couvrir de manière exhaustive². Nous allons restreindre notre domaine d'étude en nous intéressant aux systèmes formés par des gaz d'atomes ou des systèmes photoniques. Nous nous intéresserons tout particulièrement aux systèmes périodiques d'espace ; les atomes évolueront ainsi dans un réseau optique généré par des ondes lumineuses stationnaires, et les photons se propageront dans des réseaux périodiques de guides d'onde. On peut également utiliser les concepts de topologie dans des systèmes non périodiques comme les quasi-cristaux (voir par exemple

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



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

KRAUS & ZILBERBERG (2016) et DAREAU, LEVY et al. (2017)), mais leur description est beaucoup plus délicate sur le plan mathématique. Une autre restriction porte sur la dimension d'espace que nous serons amenés à considérer : pour simplifier la discussion, nous nous intéresserons à des systèmes uni- ou bi-dimensionnels, même si les concepts de topologie peuvent être étendus à trois dimensions, voire plus (voir par exemple ZHANG & HU (2001)). Signalons enfin que la plupart des situations que nous serons amenés à considérer concernent des assemblées de particules sans interaction, pour lesquelles les propriétés de topologie se manifestent le plus simplement.

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

Le plan du cours sera le suivant :

- Le premier chapitre va être consacré à la présentation des notions de base qui reviendront ensuite de manière récurrente, la notion de *phase géométrique* (BERRY 1984) d'une part, et la notion de bande d'énergie pour une particule évoluant dans un potentiel spatialement périodique.

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

Références

ASOREY, Manuel (2016), « Space, matter and topology », in *Nature Physics* **12**, p. 616.

- BANDRES, Miguel A., Steffen WITTEK, Gal HARARI, Midya PARTO, Jinhan REN, Mordechai SEGEV, Demetrios N. CHRISTODOULIDES & Mercedeh KHAJAVIKHAN (2018), « Topological insulator laser : Experiments », in *Science* **359**, p. 4005.
- BEENAKKER, Carlo & Leo KOUWENHOVEN (2016), « A road to reality with topological superconductors », in *Nature Physics* **12**, p. 618.
- BERNEVIG, B Andrei & Taylor L HUGHES (2013), *Topological insulators and topological superconductors*, Princeton University Press.
- BERRY, M. V. (1984), « Quantal phase factors accompanying adiabatic changes », in *Proc. Roy. Soc. London A* **392**, p. 45–57.
- COOPER, NR, J DALIBARD & IB SPIELMAN (2018), « Topological Bands for Ultracold Atoms », in *arXiv :1803.00249*.
- DAREAU, A., E. LEVY, M. Bosch AGUILERA, R. BOUGANNE, E. AKKERMANS, F. GERBIER & J. BEUGNON (2017), « Revealing the Topology of Quasicrystals with a Diffraction Experiment », in *Phys. Rev. Lett.* **119** (21), p. 215304.
- GOLDMAN, N, JC BUDICH & P ZOLLER (2016), « Topological quantum matter with ultracold gases in optical lattices », in *Nature Physics* **12**, p. 639–645.
- HALDANE, F. D. M. (1988), « Model for a Quantum Hall Effect without Landau Levels : Condensed-Matter Realization of the "Parity Anomaly" », in *Phys. Rev. Lett.* **61**, p. 2015–2018.
- HALDANE, F Duncan M (1983), « Nonlinear field theory of large-spin Heisenberg antiferromagnets : semiclassically quantized solitons of the one-dimensional easy-axis Néel state », in *Physical Review Letters* **50**, p. 1153.
- HASAN, M. Z. & C. L. KANE (2010), « *Colloquium* : Topological insulators », in *Rev. Mod. Phys.* **82** (4), p. 3045–3067.
- HUBER, Sebastian D (2016), « Topological mechanics », in *Nature Physics* **12**, p. 621.
- KITAEV, A. Y. (2001), « Unpaired Majorana fermions in quantum wires », in *Physics Uspekhi* **44**, p. 131.
- KRAUS, Yaacov E & Oded ZILBERBERG (2016), « Quasiperiodicity and topology transcend dimensions », in *Nature Physics* **12**, p. 624.
- LU, Ling, John D JOANNOPOULOS & Marin SOLJAČIĆ (2016), « Topological states in photonic systems », in *Nature Physics* **12**, p. 626.
- OZAWA, Tomoki, Hannah M PRICE, Alberto AMO, Nathan GOLDMAN, Mohammad HAFEZI, Ling LU, Mikael RECHTSMAN, David SCHUSTER, Jonathan SIMON, Oded ZILBERBERG et al. (2018), « Topological Photonics », in *arXiv :1802.04173*.
- QI, Xiao-Liang & Shou-Cheng ZHANG (2011), « Topological insulators and superconductors », in *Rev. Mod. Phys.* **83** (4), p. 1057–1110.
- RICE, MJ & EJ MELE (1982), « Elementary excitations of a linearly conjugated diatomic polymer », in *Physical Review Letters* **49**, p. 1455.
- ST-JEAN, P, V GOBLOT, E GALOPIN, A LEMAITRE, T OZAWA, L LE GRATIET, I SAGNES, J BLOCH & A AMO (2017), « Lasing in topological edge states of a one-dimensional lattice », in *Nature Photonics* **11**, p. 651.
- SU, W. P., J. R. SCHRIEFFER & A. J. HEEGER (1979), « Solitons in Polyacetylene », in *Phys. Rev. Lett.* **42**, p. 1698–1701.
- THOULESS, D. J. (1983), « Quantization of particle transport », in *Phys. Rev. B* **27**, p. 6083–6087.
- THOULESS, D. J., M. KOHMOTO, M. P. NIGHTINGALE & M. den NIJS (1982), « Quantized Hall Conductance in a Two-Dimensional Periodic Potential », in *Phys. Rev. Lett.* **49**, p. 405–408.
- VON KLITZING, Klaus (1986), « The quantized Hall effect », in *Reviews of Modern Physics* **58**, p. 519.
- ZHANG, Shou-Cheng & Jiangping HU (2001), « A four-dimensional generalization of the quantum Hall effect », in *Science* **294**, p. 823–828.

Chapitre 1

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

Sommaire

1	La phase géométrique en physique quantique	2
1-1	L'approximation adiabatique à l'ordre zéro	2
1-2	Connexion de Berry et phase géométrique	4
1-3	Contour fermé et courbure de Berry	4
1-4	Ordre suivant de l'approximation adiabatique	6
2	L'exemple d'un spin 1/2	6
2-1	Hamiltonien d'un système à deux niveaux	7
2-2	La sphère de Bloch	7
2-3	Courbure de Berry et phase géométrique (spin 1/2)	8
3	Potentiel périodique en physique quantique	9
3-1	Le théorème de Bloch	9
3-2	L'hamiltonien \hat{H}_q	9
3-3	La zone de Brillouin	10
3-4	La phase de Zak	11
4	Le modèle SSH (Su–Schrieffer–Heeger)	12
4-1	Le modèle de Hubbard	12
4-2	Le modèle SSH et son hamiltonien	13
4-3	États propres et topologie	16
4-4	Quelle réalité physique pour cette topologie?	17

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

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

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

1 La phase géométrique en physique quantique

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

$$\lambda(T) = \lambda(0). \quad (1)$$

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

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

Le facteur de phase Φ comporte deux termes :

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

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

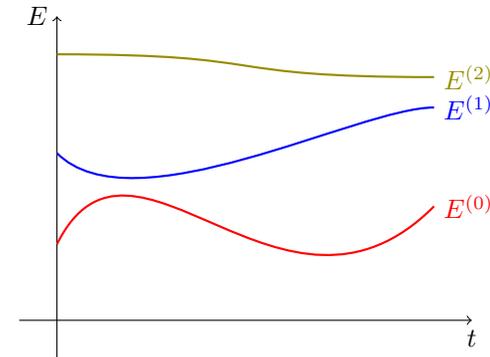


FIGURE 1. Variation dans le temps des énergies propres d'un système quantique piloté par un paramètre extérieur λ . On suppose ici que les niveaux considérés ne sont dégénérés à aucun instant t .

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

et reportons cette expression dans l'équation de Schrödinger

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

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

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

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

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

une quantité que nous noterons

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

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

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

où nous avons introduit la notation

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

1-2 Connexion de Berry et phase géométrique

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

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

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

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

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

avec

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

Elle s'intègre sous la forme

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

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

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

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

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

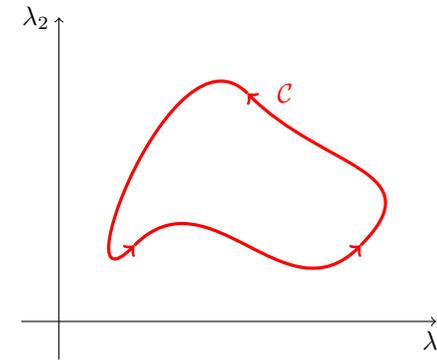


FIGURE 2. Contour fermé \mathcal{C} pour le paramètre λ , supposé évoluer ici dans un espace à deux dimensions.

ou encore :

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

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

1-3 Contour fermé et courbure de Berry

Dans la suite de ce cours, nous serons fréquemment amenés à considérer des situations où le chemin \mathcal{C} parcouru par le paramètre $\lambda(t)$ est fermé (figure 2). Nous avons alors $\lambda(t_f) = \lambda(t_i)$, où t_i et t_f désignent respectivement l'instant initial et l'instant final (nous avons pris $t_i = 0$ dans tout ce qui précède). La phase géométrique s'exprime alors comme une intégrale sur un contour fermé dans l'espace des λ :

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

La courbure de Berry est donc invariante dans le changement de jauge (30); il en va de même pour la phase géométrique accumulée sur un contour fermé puisque celle-ci s'écrit comme l'intégrale de Ω_{λ} sur la surface Σ s'appuyant sur le contour [eq. (28)].

Il peut également arriver que la fonction $\chi_{\lambda}^{(n)}$ soit régulière le long du contour \mathcal{C} , mais pas sur l'ensemble de la surface Σ . On ne peut alors pas utiliser (28) car la connexion de Berry \mathcal{A}_{λ} peut elle aussi être singulière en certains points de Σ . En revanche, le résultat (25) reste correct et on en déduit :

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

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

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

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

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

1-4 Ordre suivant de l'approximation adiabatique

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

2 L'exemple d'un spin 1/2

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

2-1 Hamiltonien d'un système à deux niveaux

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

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

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

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

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

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

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

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

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

2-2 La sphère de Bloch

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

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

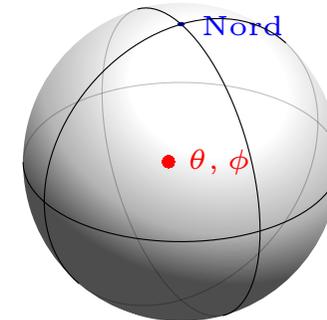


FIGURE 3. Sphère de Bloch. Sur cette sphère de rayon unitaire, un point est repéré par ses angles en coordonnées sphériques (θ, ϕ) . À tout point de la surface de la sphère, on peut associer un et un seul état du spin 1/2, qui est état propre de l'hamiltonien (47) avec l'énergie la plus basse $E^{(-)}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

L'hamiltonien s'écrit avec cette paramétrisation

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

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

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

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

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

Nous serons souvent amenés à représenter l'un de ces états propres, $|\psi^{(-)}\rangle$ par exemple, de manière géométrique. Puisque cet état ne dépend que des angles θ et ϕ avec le domaine de variation donné en (46), il est naturel de lui associer de manière biunivoque un point de la surface de la sphère de rayon unitaire appelée dans ce contexte *sphère de Bloch* (figure 3). Les coordonnées de ce point sont égales à celles du vecteur unitaire \mathbf{n} introduit en (46).

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

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

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

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

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

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

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

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

On obtient dans ce cas :

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

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

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

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

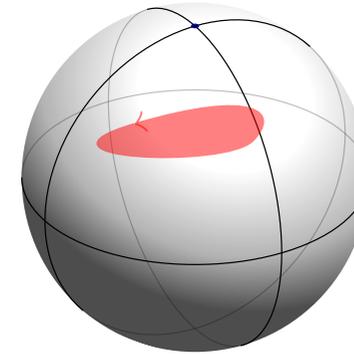


FIGURE 4. Angle solide α sous-tendu par le vecteur unitaire $\mathbf{n} = \mathbf{h}/|\mathbf{h}|$ quand le paramètre λ parcourt le contour fermé \mathcal{C} . La phase géométrique pour un spin 1/2 est égale $\alpha/2$.

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

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

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

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

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

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

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

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

3 Potentiel périodique en physique quantique

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

3-1 Le théorème de Bloch

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

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

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

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

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

$$V(x + a) = V(x). \quad (60)$$

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

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

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

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

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

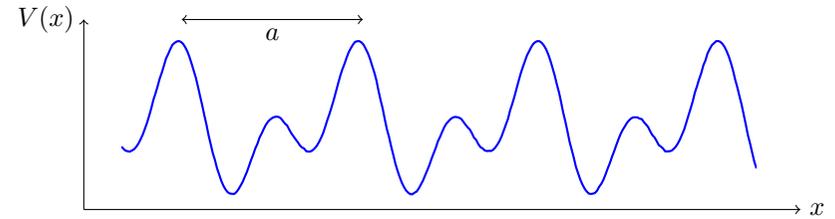


FIGURE 5. Potentiel périodique uni-dimensionnel de période a .

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

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

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

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

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

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

Intéressons-nous à un état propre commun à l'hamiltonien \hat{H} et à l'opérateur translation $\hat{\mathcal{T}}_a$. Cet état propre est donc de la forme de Bloch (64), et

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

nous noterons son énergie E_q . L'équation aux valeurs propres portant sur ψ_q peut se réécrire pour la fonction périodique $u_q(x)$:

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

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

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

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

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

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

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

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

On a donc par définition :

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

et

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

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

3-3 La zone de Brillouin

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

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

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

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

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

puisque ψ_{q_2} peut se réécrire :

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

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

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

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

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

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

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

$$\alpha \equiv (q, n). \quad (76)$$

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

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

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

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

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

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

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

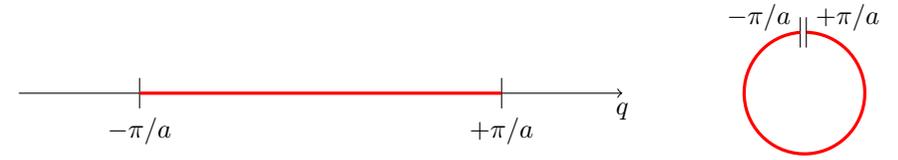


FIGURE 6. Restriction du quasi-moment q à la première zone de Brillouin, puis représentation de cette zone de Brillouin comme un cercle fermé (ou un tore en dimension supérieure à 1).

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

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

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

3-4 La phase de Zak

Nous avons vu en § 1 que la notion de phase géométrique apparaît pour un contour fermé dans l'espace des paramètres décrits sous le terme générique λ . Comme nous l'avons déjà signalé, on pourrait naïvement penser qu'en dimension 1 les contours fermés sont composés d'un ou plusieurs allers-retours à partir d'un point donné ; la notion de phase de Berry perdrait alors tout intérêt puisque les deux parties (aller, puis retour) de l'intégrale de la connexion de Berry sur ce contour s'annulent.

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

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

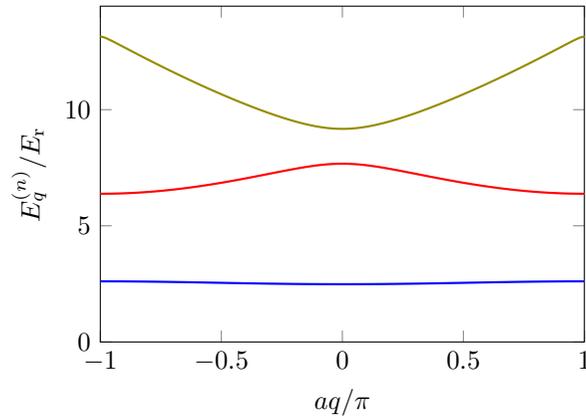


FIGURE 7. Les trois premières bandes d'énergie ($n = 0, 1, 2$) pour le potentiel sinusoïdal $V(x) = V_0 \sin^2(\pi x/a)$, tracées ici pour $V_0 = 8E_r$, avec l'énergie de recul E_r définie par $E_r = \pi^2 \hbar^2 / (2ma^2)$.

les situations physiques décrites par les deux hamiltoniens \hat{H}_{q_i} et \hat{H}_{q_f} sont identiques⁴. On est donc en présence d'un chemin fermé, avec en particulier une même base d'états propres $\{|u_q^{(n)}\}$ (à une phase près) au début et à la fin du chemin. Bien que la situation soit unidimensionnelle, il n'y a alors pas de raison pour que la phase géométrique acquise par une particule⁵

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

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

On comprend donc que les potentiels périodiques, même à une dimension, soient propices à l'apparition de ces phases géométriques. Dans ce qui suit, nous allons même pouvoir aller un cran plus loin et montrer que cette phase peut être *topologique* si le problème physique possède certaines symétries. Plus précisément, nous allons montrer dans le cadre du modèle SSH que cette phase géométrique, appelée *phase de Zak* dans ce contexte,

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

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

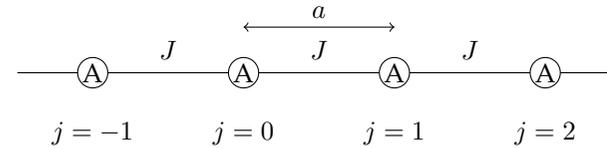


FIGURE 8. Modèle de Hubbard 1D, dans lequel tous les sites sont équivalents, avec la même amplitude tunnel d'un site au site voisin.

est quantifiée en multiples de π et qu'elle n'est donc en général pas modifiée par une petite déformation du réseau, pourvu que cette déformation respecte la symétrie en question.

4 Le modèle SSH (Su–Schrieffer–Heeger)

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

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

4-1 Le modèle de Hubbard

Considérons la chaîne infinie représentée sur la figure 8, composée de sites identiques espacés de a . Nous supposons qu'une particule est placée

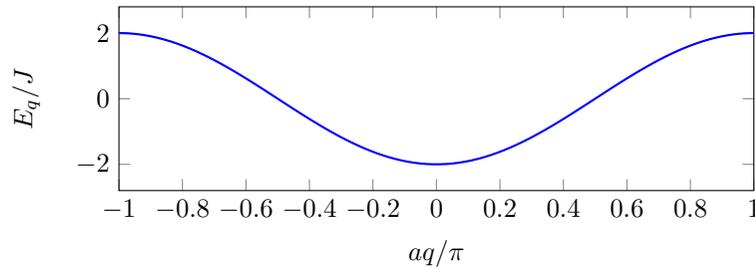


FIGURE 9. Bande d'énergie E_q pour le modèle de Hubbard.

sur ce réseau et nous notons $|j\rangle$ l'état correspondant à la particule localisée sur le site j ($j \in \mathbb{Z}$). Tous les sites ont la même énergie, que nous prendrons nulle par convention. L'amplitude de saut tunnel d'un site à l'autre est notée $-J$, où le coefficient J est choisi positif. L'hamiltonien s'écrit donc

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

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

$$|u\rangle = \sum_j |j\rangle \quad (84)$$

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

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

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

$$E_q = -2J \cos(qa). \quad (86)$$

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

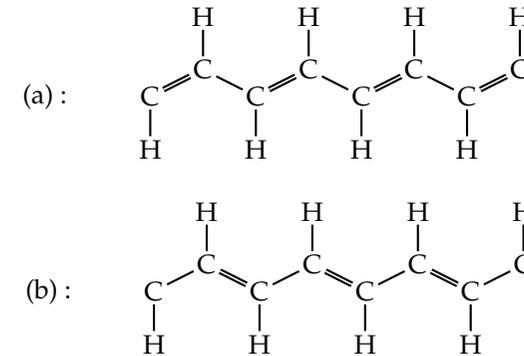


FIGURE 10. Molécule de polyacétylène, pouvant exister sous les deux formes dimérisées (a) et (b).

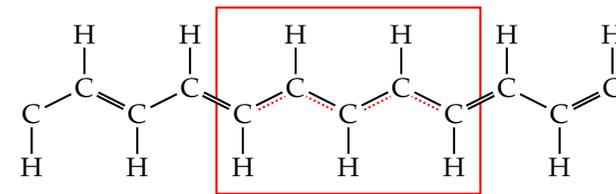


FIGURE 11. Jonction entre les deux phases (a) et (b) de la figure 10.

4-2 Le modèle SSH et son hamiltonien

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

La modélisation la plus simple de cette chaîne est fondée sur un modèle

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

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

$$|u_q\rangle = \alpha_q \left(\sum_j |A_j\rangle \right) + \beta_q \left(\sum_j |B_j\rangle \right), \quad (87)$$

où l'on choisira par convention

$$|\alpha_q|^2 + |\beta_q|^2 = 1. \quad (88)$$

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

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

Les fonctions de Bloch associées sont

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

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

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

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

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

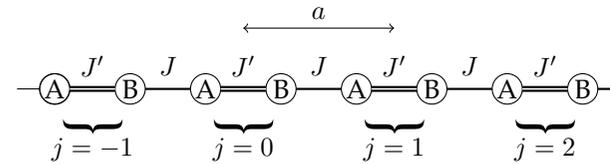


FIGURE 12. Représentation simplifiée du modèle SSH.

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

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

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

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

Le vecteur h vaut

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

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

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

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

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

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

Ces bandes d'énergie, représentées en figure 13, sont disjointes sauf si $J = J'$, auquel cas on retrouve le modèle de Hubbard du paragraphe précédent⁶. Les niveaux d'énergie pour les deux cas $J' > J$ et $J' < J$ ont

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

des tracés similaires et rien ne permet à ce stade d'assigner une topologie différente à ces deux situations. Mais toute la physique n'est pas contenue dans la position des niveaux d'énergie : la variation avec q des états propres contient une information supplémentaire, que nous allons maintenant examiner.

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

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

Ce choix permet de simplifier l'analyse, même s'il subsiste un arbitraire dans la définition de la cellule unité que nous examinerons en §4-4. Nous aurions également pu "encoder" la position relative du site B par rapport au site A de la même cellule. Si on note b la distance AB , ce choix conduit à prendre des fonctions de Bloch du type :

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

et mène à

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

qui n'est généralement plus une fonction périodique de q . Les énergies ne sont évidemment pas affectées par ce changement de définition des états de Bloch, mais les vecteurs propres le sont. En pratique, cet encodage conduit à des expressions plus compliquées du point de vue de l'étude de la topologie des bandes et nous ne l'utiliserons pas. Il peut néanmoins être pertinent quand une force uniforme est appliquée aux particules en plus du potentiel périodique. Cette force dérive en effet du potentiel $-Fx$, et il est alors commode d'encoder la position exacte de chaque site, $x = ja$ ou $x = ja + b$, dans l'expression des fonctions de Bloch.

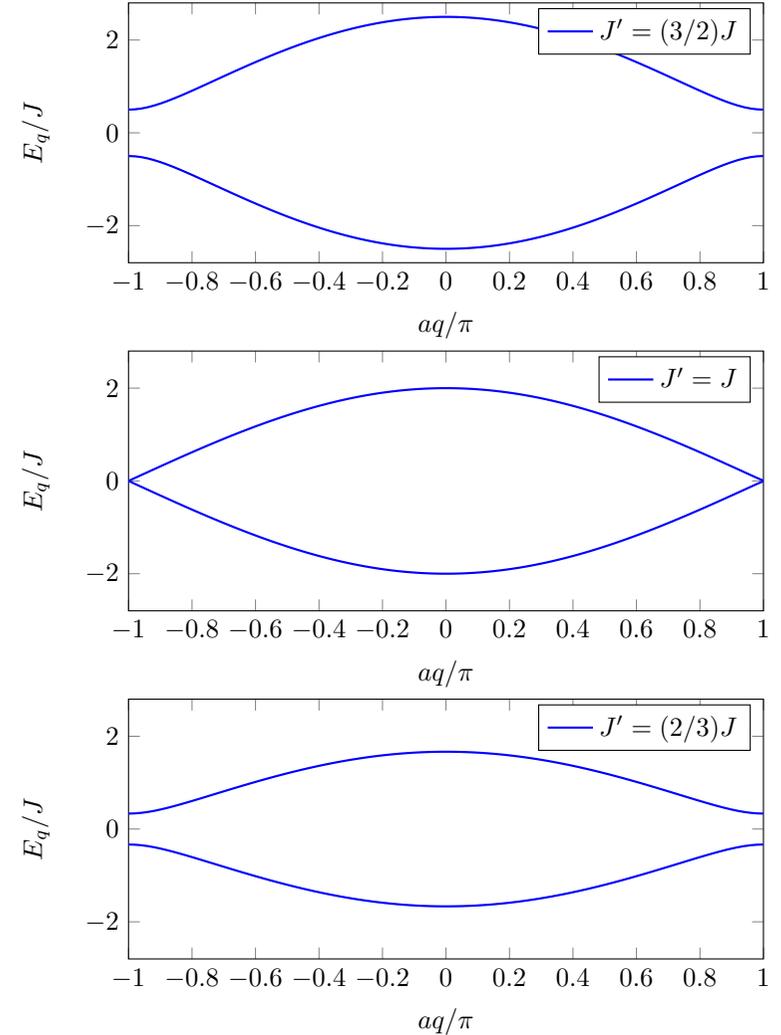


FIGURE 13. Bandes d'énergies (96) du modèle SSH pour $J' = (3/2)J$ (haut), $J' = J$ (milieu) et $J' = (2/3)J$ (bas).

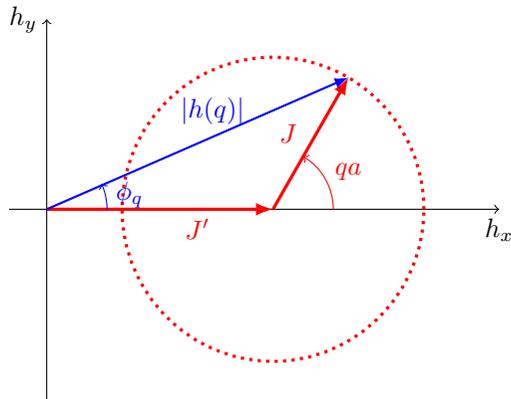


FIGURE 14. Tracé dans le plan complexe de $h(q) \equiv J' + J e^{iqa} = |h(q)| e^{i\phi_q}$ pour le cas $J' > J$. Le contour décrit par $h(q)$ n'entoure pas l'origine et la phase ϕ_q commence et termine à la même valeur $\phi_q = 0$ quand q décrit la zone de Brillouin $[-\pi/a, \pi/a]$.

4-3 États propres et topologie

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

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

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

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

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

Il est alors simple de calculer la connexion de Berry

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

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

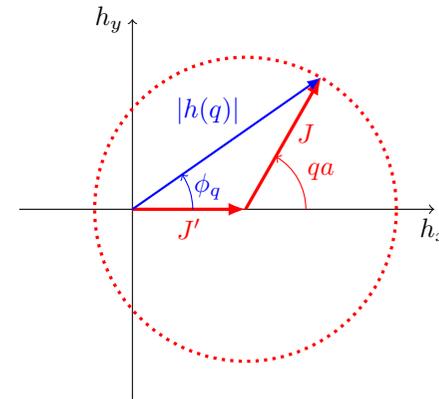


FIGURE 15. Tracé dans le plan complexe de $h(q) \equiv J' + J e^{iqa} = |h(q)| e^{i\phi_q}$ pour le cas $J' < J$. Le contour décrit par $h(q)$ entoure l'origine et la phase ϕ_q varie continument de $\phi_q = -\pi$ à $\phi_q = \pi$ quand q décrit la zone de Brillouin $[-\pi/a, \pi/a]$.

zone de Brillouin :

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

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

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

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

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

- Si $J' > J$ (figure 14), le cercle est entièrement situé dans la zone du plan de partie réelle positive. Ce cercle n'entoure donc pas l'origine :

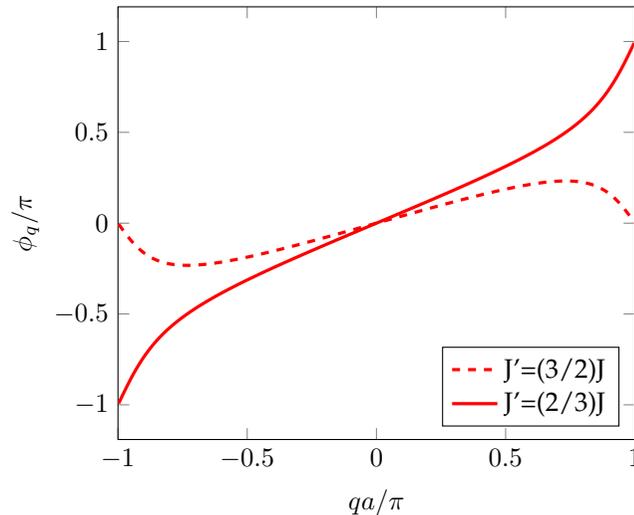


FIGURE 16. Variation de la phase ϕ_q quand q parcourt la zone de Brillouin $[-\pi/a, \pi/a]$, pour les deux cas $J' > J$ (pas d'enroulement) et $J' < J$ (nombre d'enroulement $N = 1$).

$N = 0$ et $\Phi_{\text{Zak}} = 0$ pour chacune des deux sous-bandes (figure 16). On dira dans ce cas que les bandes sont *topologiquement triviales*.

— Si $J' < J$ (figure 15), le cercle est parcouru dans le sens direct (trigonométrique) et entoure une fois l'origine. On a alors : $N = 1$ et $\Phi_{\text{Zak}} = -\pi$ pour chacune des deux sous-bandes (figure 16). On dira dans ce cas que les deux bandes sont *topologiquement non triviales*.

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

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

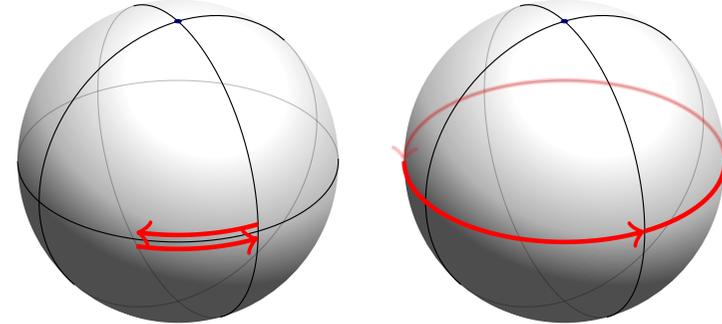


FIGURE 17. Trajectoires sur la sphère de Bloch de l'état $|u_q^{(-)}\rangle$ quand q parcourt l'ensemble de la zone de Brillouin. Gauche : cas topologiquement trivial, $N = 0$; Droit : cas topologiquement non trivial, $N = 1$.

4-4 Quelle réalité physique pour cette topologie ?

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

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

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

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

Cette transformation n'est pas une transformation de jauge comme celle envisagée en (30) car elle ne correspond pas à une multiplication globale de la fonction $|u_q\rangle$ par un coefficient e^{ix_q} . Il n'est donc pas évident de prévoir ses conséquences sur la phase de Zak.

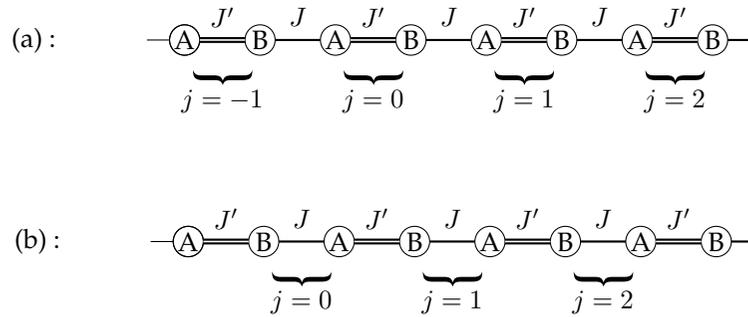


FIGURE 18. Deux paramétrisations possibles pour le modèle SSH.

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

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

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

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

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

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

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

Pour révéler cette différence, nous verrons au prochain chapitre que l'on peut échanger physiquement au cours d'une séquence expérimentale les

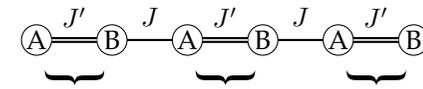


FIGURE 19. Chaîne SSH finie, avec trois cellules unités. Les deux configurations $J' > J$ et $J' < J$ se comportent différemment vis à vis de l'existence d'états de bord.

valeurs de J et J' , comme cela a été fait par ATALA, AIDELSBURGER et al. (2013). On peut également s'intéresser à une chaîne de taille finie, avec un nombre donné de cellules, par exemple trois cellules sur la figure 19. Il n'est alors pas équivalent d'avoir un grand ou un petit élément de matrice tunnel aux extrémités de la chaîne. On peut enfin connecter les deux phases $[J' > J]$ et $[J' < J]$, comme indiqué sur la figure 11, et étudier les états localisés susceptibles d'apparaître au voisinage du point de jonction. Nous verrons au chapitre suivant comment ces états de bord émergent pour le modèle SSH pour une chaîne finie ou semi-infinie, ainsi que leurs applications possibles en photonique.

Remarque : retour sur l'encodage de la position. Nous avons donné en (100) l'expression de l'hamiltonien \hat{H}'_q quand on encode la distance b entre les sites A et B dans l'expression des fonctions de Bloch. On pourra remarquer que cet hamiltonien \hat{H}'_q permet de passer continument de \hat{H}_q à \hat{H}'_q en variant b de 0 à a . Si on reprend le formalisme précédent avec cet hamiltonien, on trouve que la phase ϕ_q est remplacée par $\phi_q - qb$, de sorte que Φ_{Zak} devient $\Phi_{\text{Zak}} + \pi b/a$. La phase de Zak n'est alors plus un multiple de π . En effet l'hamiltonien \hat{H}'_q n'est pas périodique en q et le nombre $h'(q)$ qui lui est associé ne décrit pas une trajectoire fermée dans le plan complexe quand q parcourt la zone de Brillouin. Toutefois, la relation (109) donnant une différence de phase égale à π entre les deux situations $J' < J$ et $J' > J$ reste valable.

Références

- AHARONOV, Y. & D. BOHM (1959), « Significance of electromagnetic potentials in quantum theory », in *Phys. Rev.* **115**, p. 485.
- ASHCROFT, N. W. & N. D. MERMIN (1976), *Solid State Physics*, New York : Holt, Rinehardt et Winston.
- ATALA, Marcos, Monika AIDELSBURGER, Julio T. BARREIRO, Dmitry ABANIN, Takuya KITAGAWA, Eugene DEMLER & Immanuel BLOCH (2013), « Direct measurement of the Zak phase in topological Bloch bands », in *Nat Phys* **9**, p. 795–800.
- BERRY, M. V. (1984), « Quantal phase factors accompanying adiabatic changes », in *Proc. Roy. Soc. London A* **392**, p. 45–57.
- (1989), « The Quantum Phase, Five Years After », in *Geometric Phases in Physics*, sous la dir. d'A. SHAPER & F. WILCZEK, Singapore : World Scientific, , p. 7–28.
- EHRENBERG, W. & R. E. SIDAY (1949), « The Refractive Index in Electron Optics and the Principles of Dynamics », in *Proceedings of the Physical Society, Series B* **62**, p. 8–21.
- MEAD, C. Alden & Donald G. TRUHLAR (1979), « On the determination of Born–Oppenheimer nuclear motion wave functions including complications due to conical intersections and identical nuclei », in *J. Chem. Phys.* **70**, p. 2284–2296.
- MESSIAH, A. (1961), *Quantum Mechanics, Chapter XVII*, § 13, t. II, Amsterdam : North-Holland Publishing Company.
- PANCHARATNAM, S. (1956), « Generalized Theory of Interference, and Its Applications. Part I. Coherent Pencils », in *Proc. Indian Acad. Sci. A* **44**, p. 247–262.
- SU, W. P., J. R. SCHRIEFFER & A. J. HEEGER (1979), « Solitons in Polyacetylene », in *Phys. Rev. Lett.* **42**, p. 1698–1701.
- ZAK, J. (1989), « Berry's phase for energy bands in solids », in *Phys. Rev. Lett.* **62** (23), p. 2747–2750.