

Chapitre 2

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

Sommaire

1	Etats de bord dans le modèle SSH	2
1-1	Retour sur l'hamiltonien SSH	2
1-2	Le cas d'une chaîne finie	4
1-3	La symétrie de sous-réseau	7
1-4	La chaîne semi-infinie	8
1-5	Etats de bord entre deux chaînes (cas continu)	9
2	Le modèle SSH en photonique	10
2-1	Effets topologiques en photonique	10
2-2	La cellule élémentaire et la chaîne SSH	10
2-3	Observation des états de bord et laser topologique	11
3	Le modèle de Kitaev	12
3-1	L'hamiltonien de Kitaev	13
3-2	Le formalisme de Bogoliubov-de Gennes	13
3-3	La symétrie particule-trou	14
3-4	La chaîne de Kitaev infinie	15
4	Les modes de Majorana	17
4-1	La chaîne de Kitaev ouverte	18
4-2	L'état fondamental pour $\mu = 0$	19
4-3	Les opérateurs de Majorana	20

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

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

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

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

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

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

1 Etats de bord dans le modèle SSH

1-1 Retour sur l'hamiltonien SSH

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

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

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

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

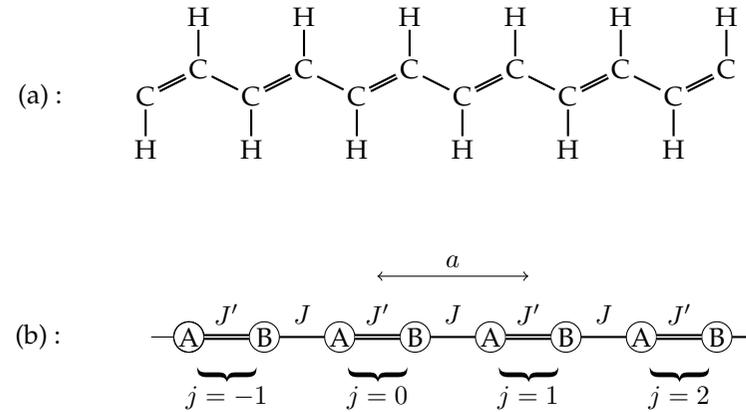


FIGURE 1. (a) Molécule de polyacétylène. (b) Modélisation dans le cadre d'un modèle de liaisons fortes.

propres de l'hamiltonien sous la forme

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

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

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

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

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

Ses valeurs propres sont

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

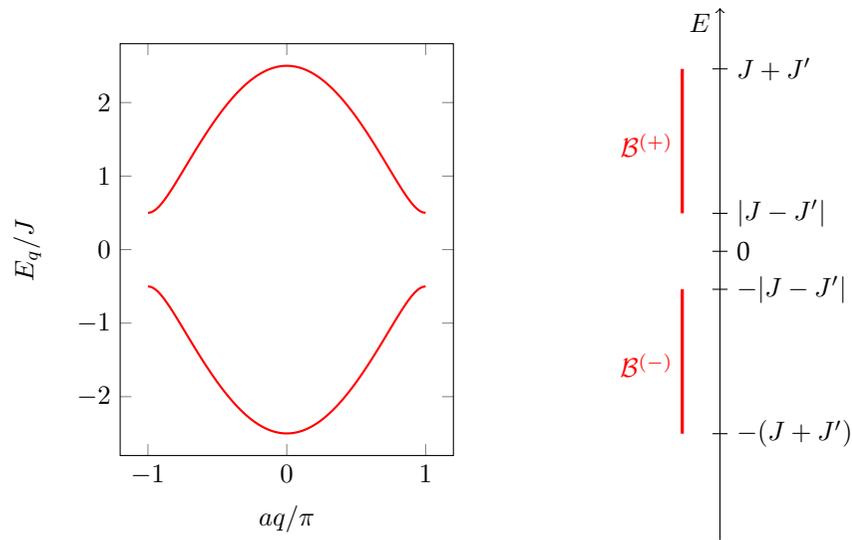


FIGURE 2. Bandes d'énergie pour une chaîne infinie du modèle SSH dans le cas $J' = (3/2)J$.

ce qui conduit aux deux bandes d'énergie :

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

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

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

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

nous pouvons écrire toute matrice hermitienne sous la forme

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

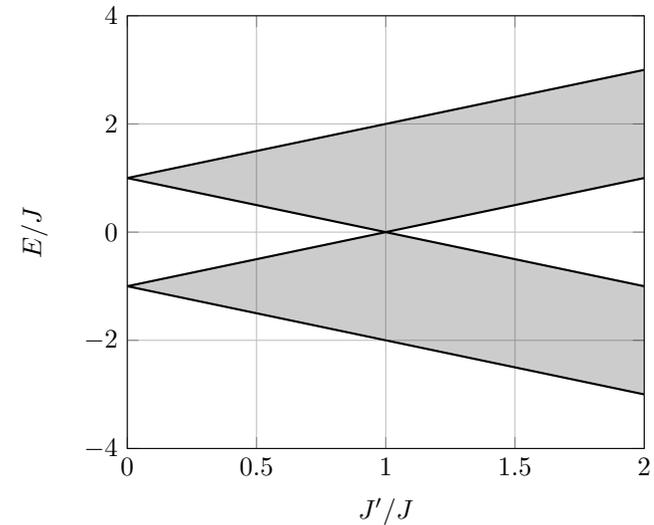


FIGURE 3. Bandes d'énergie pour une chaîne infinie du modèle SSH en fonction du rapport J'/J . On obtient deux bandes disjointes sauf pour $J' = J$.

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

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

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

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

où l'on a introduit le nombre de module 1

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

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

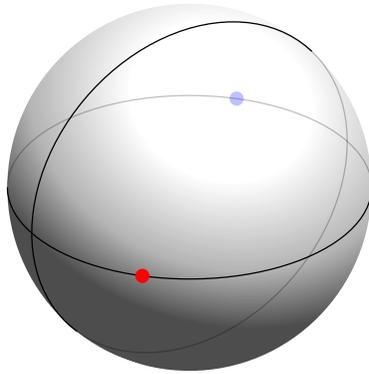


FIGURE 4. Représentation des deux états propres $|u_q^{(\pm)}\rangle$ sur la sphère de Bloch de rayon 1. Pour le modèle SSH, ces deux états propres sont toujours localisés sur l'équateur.

Dans ce qui va suivre, nous utiliserons la représentation de l'état quantique $|u\rangle$ d'un système à deux niveaux sur la sphère de Bloch, également introduite au chapitre 1. Cette représentation tire parti du fait que cet état peut s'écrire de manière unique (à une phase globale près) :

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

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

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

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

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

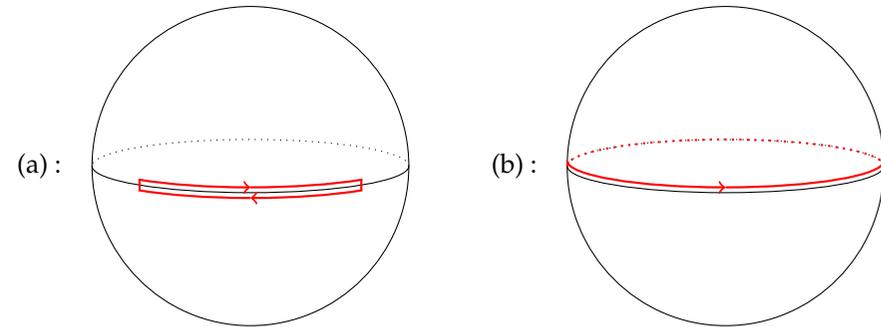


FIGURE 5. Trajectoire suivie par $|u_q^{(-)}\rangle$ dans le modèle SSH quand le quasi-moment q parcourt la zone de Brillouin $]-\pi/a, \pi/a]$. Les cas (a) et (b) correspondent respectivement à $J' > J$ (non topologique) et $J' < J$ (topologique).

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

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

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

1-2 Le cas d'une chaîne finie

Commençons notre analyse des états de bord en considérant une chaîne finie, comportant un nombre donné de paires AB (figure 6). Puisque le système n'est plus invariant par translation, le théorème de Bloch ne s'applique plus et il n'est pas possible de procéder à un traitement analytique. Nous donnons en figure 7 le résultat d'une diagonalisation numérique de

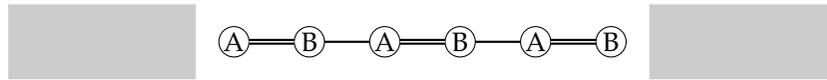


FIGURE 6. Chaîne SSH de taille finie (avec ici 6 sites, donc 3 paires AB).

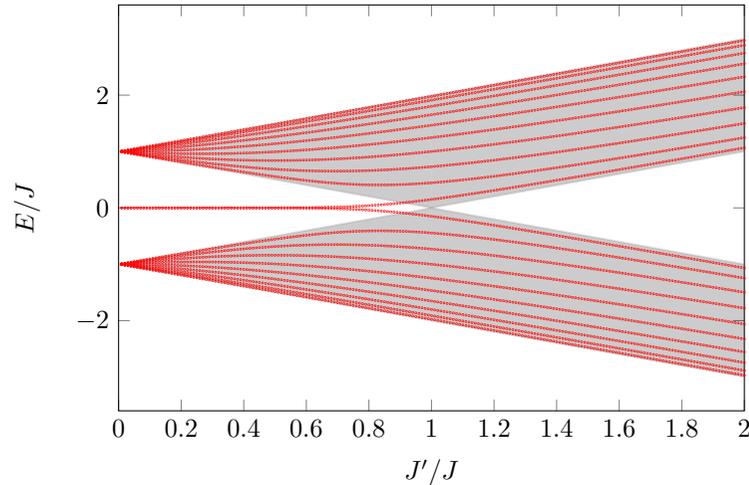


FIGURE 7. Énergies propres d'une chaîne SSH à 20 sites, donc 10 paires AB. Pour $J' < J$, deux états de bords d'énergie quasi-nulle sont présents. Ces états disparaissent graduellement quand on passe dans la région $J' > J$. La zone grisée correspond aux bandes d'énergies de la chaîne infinie, déjà tracées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

l'hamiltonien pour une chaîne de 10 paires.

Plusieurs points remarquables apparaissent sur cette figure :

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

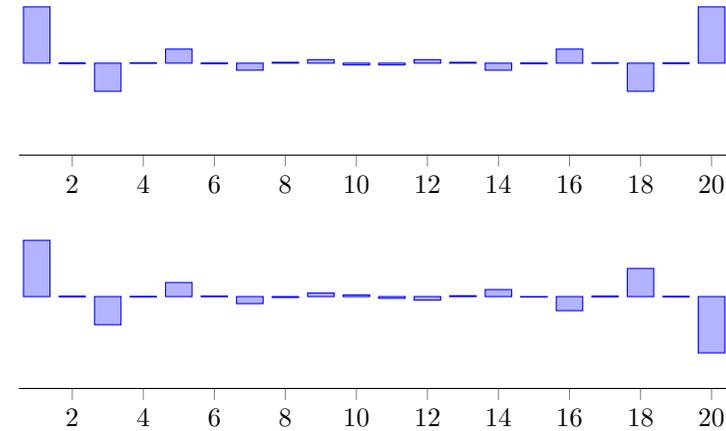


FIGURE 8. Chaîne SSH finie à 20 sites, donc 10 cellules unité, pour $J' = J/2$. On a représenté les amplitudes de probabilité $a_1, b_1, a_2, b_2, \dots$ pour les deux états situés à l'intérieur du gap. Les distributions de probabilité pour ces deux états sont symétriques, du fait de la symétrie de la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

Ces états situés à l'intérieur du gap interdit sont les états de bord que nous souhaitons discuter. Nous avons représenté sur la figure 8 les amplitudes de probabilité (a_j, b_j) pour ces deux états dans le cas particulier $J' = J/2$. On trouve que ces deux états sont effectivement localisés aux extrémités de la chaîne, avec une probabilité supérieure à 3/4 de trouver la particule sur l'un des sites extrêmes, A_1 ou B_{10} . La chaîne étant symétrique, les distributions de probabilité associées à ces deux états sont elles aussi symétriques. Toutefois, cette symétrie spatiale est facilement brisée. Il suffit de modifier l'énergie sur site d'une des extrémités (A_1 par exemple) d'une faible quantité pour qu'un des états de bord se localise presque entièrement sur A_1 et l'autre sur B_{10} . Pour illustrer ce point, on a représenté sur la figure 9 le résultat obtenu quand l'énergie du site A_1 passe de 0 à $-J/100$. Cette sensibilité est à contraster avec celle des modes de Majorana que nous rencontrerons un peu plus loin.

DELPLACE, ULLMO et al. (2011) ont proposé une méthode simple et efficace pour établir de manière quantitative la correspondance cœur-bord (bulk-edge) pour la chaîne SSH, c'est-à-dire le lien direct entre l'enroule-

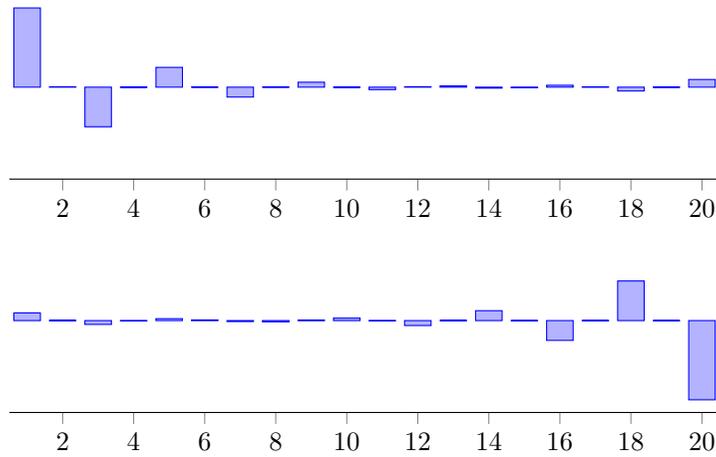


FIGURE 9. Chaîne SSH finie à 20 sites, donc 10 cellules unité, pour $J' = J/2$ avec un léger décalage de $-J/100$ du site A_1 . On a représenté les amplitudes de probabilité $a_1, b_1, a_2, b_2, \dots$ pour les deux états situés à l'intérieur du gap. Le décalage en énergie du site A_1 entraîne une localisation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

ment de la phase ϕ_q et l'existence d'états d'énergie en dehors du gap pour une chaîne finie. L'idée est de compter le nombre d'états que l'on peut former à partir des fonctions de Bloch de cœur, et voir si on en obtient $2N$, comme attendu d'après la taille de l'espace de Hilbert. Si ce n'est pas le cas, cela signifie que des états supplémentaires sont nécessaires pour obtenir une base : ce sont précisément les états de bord que nous avons trouvés numériquement.

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

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

Nous avons choisi ici $q \geq 0$ par convention et nous nous sommes limités pour l'instant à la bande inférieure. Le fait que l'on ait une chaîne finie impose de prendre en compte des conditions aux limites "ouvertes". Si la

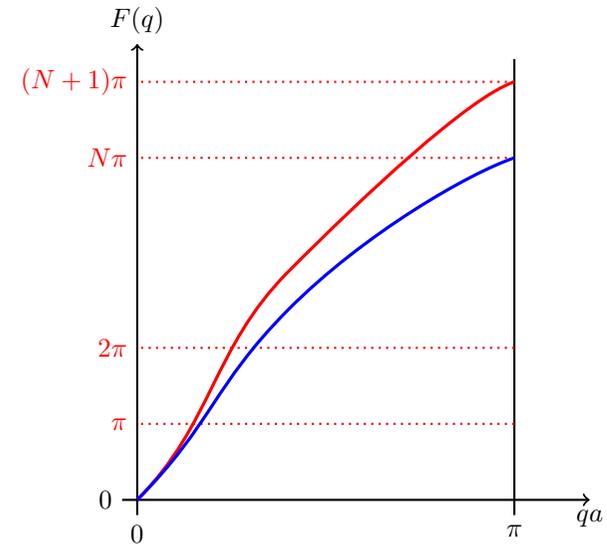


FIGURE 10. Solution graphique de l'équation (16) permettant de déterminer les états propres de la chaîne SSH ouverte, fabriqués à partir d'états de Bloch de cœur. Dans le cas normal, en rouge, on trouve N solutions physiquement acceptables pour chacune de deux bandes d'énergie : ceci permet de former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

chaîne est constituée des sites $1, 2, \dots, N$, nous devons imposer une amplitude nulle sur les sites "fictifs" $|B_0\rangle$ et $|A_{N+1}\rangle$, ce qui conduit à

$$\cos(\alpha + \phi_q) = 0, \quad \cos[\alpha + (N + 1)qa] = 0, \quad (15)$$

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

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

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

Pour un nombre de sites N assez grand, la fonction $F(q)$ est strictement croissante entre $q = 0$ et $q = \pi/a$ [rappelons que q est supposé positif pour

éviter le double comptage des ondes stationnaires (14)]. Elle vaut toujours 0 en $q = 0$ et sa valeur en $q = \pi/a$ dépend de la topologie de la bande :

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

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

1-3 La symétrie de sous-réseau

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

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

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

anti-commute avec l'hamiltonien SSH :

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

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

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

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

et de même pour \hat{P}_B :

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

C'est exactement la contrainte de ne pas avoir de coefficient diagonaux pour la matrice \hat{H}_q ($\forall q$), ce qui garantit que le vecteur $\mathbf{h}/|\mathbf{h}|$ reste confiné sur l'équateur de la sphère unité. On peut également montrer la réciproque de cette propriété : si l'on impose les deux contraintes $\hat{P}_A\hat{H}\hat{P}_A = 0$ et $\hat{P}_B\hat{H}\hat{P}_B = 0$, on trouve¹ la relation d'anti-commutation (18).

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

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

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

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

- Si cet état de bord est unique, comme celui qui apparaît pour une chaîne semi-infinie (cf. la diagonalisation exacte effectuée en § 1-4), alors son énergie est nulle.

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

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

et

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

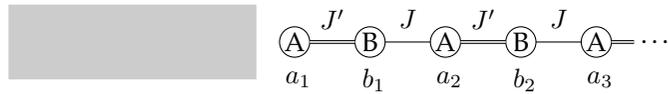


FIGURE 11. chaîne SSH semi-infinie.

— Toujours dans l’hypothèse de l’unicité de cet état de bord $|\psi_0\rangle$, $\hat{S}|\psi_0\rangle$ qui est également état propre d’énergie nulle doit être colinéaire avec $|\psi_0\rangle$, ce qui veut dire que $|\psi_0\rangle$ est état propre de \hat{S} . Comme on a

$$\hat{S}^2 = 1 \tag{24}$$

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

$$\hat{S}|\psi_0\rangle = |\psi_0\rangle \Rightarrow \hat{P}_B|\psi_0\rangle = 0 \tag{25}$$

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

1-4 La chaîne semi-infinie

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

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

Quand on reporte ce développement dans l’équation aux valeurs

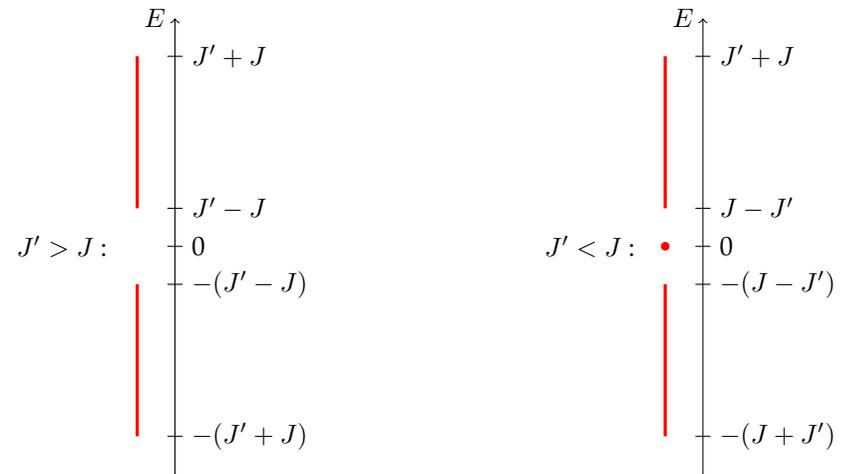


FIGURE 12. Spectre en énergie d’une chaîne semi-infinie. En plus des deux bandes d’énergie trouvées pour le cas de la chaîne infinie, un état de bord d’énergie nulle apparaît dans le cas “topologique” $J' < J$.

propres $\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$, on obtient un système infini d’équations :

$$-J'b_1 = E a_1 \tag{27}$$

$$-J'a_1 - Ja_2 = E b_1 \tag{28}$$

et pour $j \geq 2$:

$$-J'b_j - Jb_{j-1} = E a_j \tag{29}$$

$$-J'a_j - Ja_{j+1} = E b_j. \tag{30}$$

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

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

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

on trouve toujours une solution avec des coefficients a_j et b_j de module (à peu près) constant quand $j \rightarrow \infty$. Cette solution représente

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

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

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

Cet état est donc localisé uniquement sur les sites A , comme attendu du fait de la symétrie de sous-réseau (§1-3), et sa probabilité de présence $P_j = |a_j|^2$ décroît exponentiellement vite quand on s'éloigne du bord A_1 , la distance caractéristique de décroissance étant

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

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

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

Jonctions entre chaînes SSH. Comme nous l'avons déjà mentionné, l'existence des états de bord pour la chaîne finie ou semi-infinie dans le cas $J' < J$, et leur non-existence pour $J' > J$, est une illustration très simple de la correspondance *cœur-bord* (*bulk-edge*). Cette correspondance indique ce qui se produit à l'interface entre deux zones de topologies différentes ou identiques. Notre demi-chaîne peut être obtenue en partant d'une chaîne infinie, puis posant $J = 0$ dans la partie gauche ($j \leq 0$) de la chaîne. C'est ce qui est représenté par la zone grisée de la figure 13. Cette partie grisée

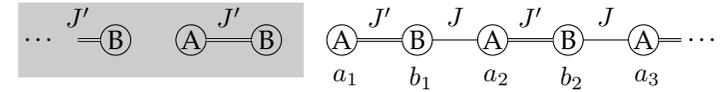


FIGURE 13. La chaîne SSH semi-infinie peut être vue comme une chaîne infinie, mais avec un coefficient J dépendant de l'espace ; plus précisément, la zone grisée représente une chaîne avec un coefficient $J = 0$, qui se trouve donc dans la classe topologique $J' > J$ alors que la chaîne "réelle" peut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

est donc dans la classe topologique $[J' > J]$. Si on choisit pour la chaîne réelle des coefficients tunnels également tels que $J' > J$, les deux parties de la chaîne seront dans la même classe topologique et il n'y aura pas d'état de bord, c'est-à-dire pas d'état localisé à la frontière entre les deux zones. En revanche, si on choisit pour la chaîne réelle $J' < J$, les deux zones grisées et non grisées seront dans deux classes topologiques différentes : un état de bord apparaîtra alors à l'interface entre les deux zones.

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

Le caractère général de l'existence d'un état de bord entre deux régions de topologies différentes peut être montré simplement sur le modèle SSH. Considérons une chaîne de sites $A - B$ le long de laquelle les coefficients J et J' varient la région centrale située autour du site 0. Nous supposons que loin de cette région, le rapport J'/J tend vers une constante, mais que cette constante correspond à des topologies différentes à droite ($j \rightarrow +\infty$) et à gauche ($j \rightarrow -\infty$). Posons par exemple que

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

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

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

avec

$$\sum_j |a_j|^2 + |b_j|^2 = 1, \quad (35)$$

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

2 Le modèle SSH en photonique

2-1 Effets topologiques en photonique

L'idée d'étendre les concepts topologiques de l'effet Hall quantique aux ondes électromagnétiques a été suggérée par HALDANE & RAGHU (2008). Leur suggestion était fondée sur la propriété de non-réciprocité que l'on observe par exemple dans l'effet Faraday, un champ magnétique extérieur brisant l'invariance par renversement du temps d'un système optique. Depuis cette date, cette idée a été mise en œuvre dans toute une série d'expériences, à commencer par le travail de WANG, CHONG et al. (2009) mené avec un cristal photonique dans le domaine des micro-ondes. Faute de place, nous ne pourrions pas présenter toutes ces expériences dans ce cours et nous nous limiterons à la description de quelques unes, soit à une dimension dans ce chapitre, soit à deux dimensions dans des chapitres ultérieurs. Nous renvoyons le lecteur souhaitant disposer d'une liste exhaustive de ces travaux en photonique vers les articles de revues de LU, JOANNOPOULOS et al. (2014), LODAHL, MAHMOODIAN et al. (2017), KHANIKAEV & SHVETS (2017), OZAWA, PRICE et al. (2018).

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

2-2 La cellule élémentaire et la chaîne SSH

Dans l'expérience de ST-JEAN, GOBLOT et al. (2017), la cellule élémentaire est constituée par un puits quantique circulaire de GaAs, placé entre deux miroirs (figure 14, gauche). L'amplitude du champ dans cette cavité résonnante en forme de pilier joue le rôle des coefficients complexes notés a_j ou b_j dans ce qui précède [cf. eq. (26)]. On éclaire ce puits quantique par une lumière non-résonnante et on observe la lumière de photoluminescence qui révèle l'amplitude du champ électromagnétique dans la cavité.

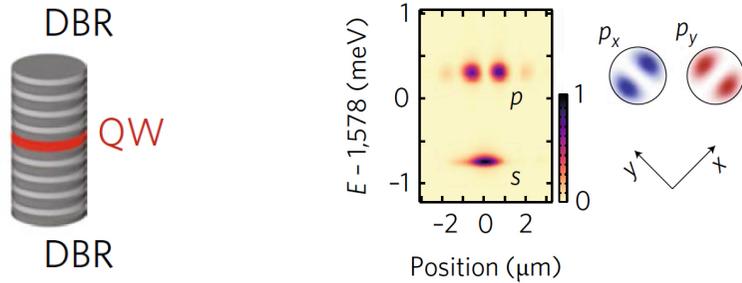


FIGURE 14. Gauche : cellule élémentaire composée d'un puits quantique de GaAs placée entre deux miroirs de Bragg composés de plusieurs dizaines de couches de GaAlAs. Figure extraite de ST-JEAN, GOBLOT et al. (2017).

On peut effectuer une mesure "dans l'espace réel" en imageant le (ou les) puits quantique sur la caméra, ou bien une mesure "dans l'espace de Fourier", pour mesurer ce qui est émis dans une direction donnée, indépendamment de la position précise du (ou des) puits quantique. Toutes ces expériences sont menées dans un environnement cryogénique à 4 K.

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

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

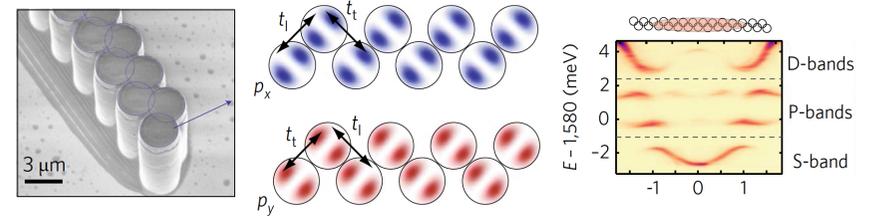


FIGURE 15. Gauche : Chaîne de micropiliers disposés en zig-zag (distance entre piliers : $3.4 \mu\text{m}$). Milieu : Le couplage entre orbitales p_x (resp. p_y) se fait avec une alternance de coefficients J, J' (resp. J', J) notés ici t_l et t_t . Le rapport t_t/t_l est de l'ordre de 0.15. Droite :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

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

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

2-3 Observation des états de bord et laser topologique

La figure 16 (gauche) montre le résultat de la mesure de photoluminescence quand une extrémité de la chaîne est éclairée. On voit alors appa-

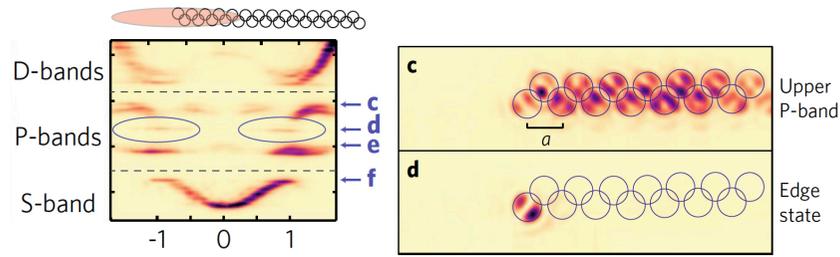


FIGURE 16. Observation des états de bord pour l'onde p_y , correspondant à la bande topologiquement non triviale $J > J'$, c'est-à-dire $t_l > t_t$ pour les notations de la figure 15. Figure extraite de ST-JEAN, GOBLOT *et al.* (2017).

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

Un des intérêts pratiques de cette implémentation des concepts de topologie en photonique est de fabriquer des lasers "robustes", donc peu sensibles aux défauts ou aux imperfections qui peuvent survenir dans leur réalisation. Ce point est illustré en figure 17, où l'on montre l'effet laser qui se produit quand on augmente la puissance de la lumière qui pompe l'échantillon. Au dessus du seuil, la puissance émise dans le mode de bord dépasse très largement celle émise par l'ensemble des modes de cœur (*bulk*). La largeur spectrale du pic diminue, indiquant une augmentation de la cohérence temporelle de ce laser. Le fait que ce mode de bord soit privilégié par rapport aux modes de cœur s'explique par le fait que les polaritons occupant les modes de cœur ont une forte mobilité et s'éloignent rapidement de la zone de pompage.

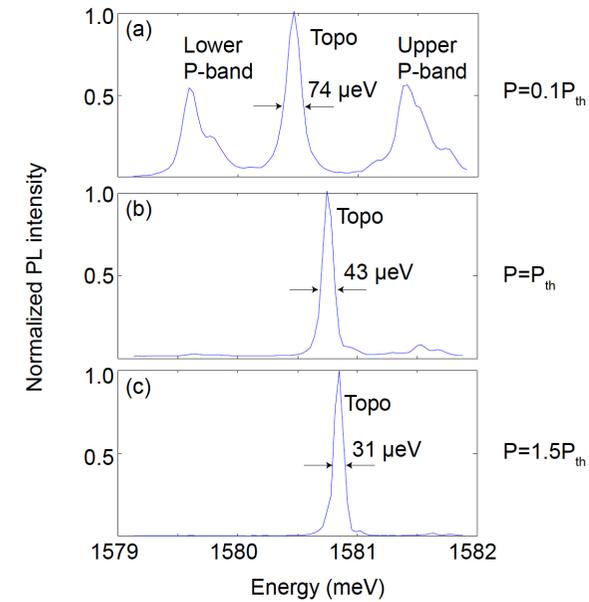


FIGURE 17. Spectre d'émission mesuré quand on augmente la puissance de la lumière de pompe au dessus du seuil de l'effet laser pour le mode topologique. Figure extraite de ST-JEAN, GOBLOT *et al.* (2017), supplementary information.

3 Le modèle de Kitaev

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

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

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

3-1 L'hamiltonien de Kitaev

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

- Nous considérons des particules obéissant à la statistique de Fermi, mais sans degré de liberté de spin. Ces particules évoluent sur une chaîne 1D traitée dans le modèle des liaisons fortes, avec le coefficient tunnel J entre sites adjacents. Le premier terme de l'hamiltonien, qui décrit le couplage tunnel entre deux sites, s'écrit dans le formalisme de la seconde quantification² :

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

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

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

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

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

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

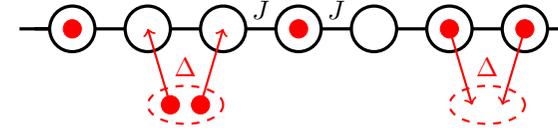


FIGURE 18. La chaîne de Kitaev, caractérisée par le couplage tunnel J et le gap superfluide Δ . Un troisième paramètre, le potentiel chimique μ , permet d'ajuster le nombre moyen de particules sur la chaîne.

réservoir et il s'écrit :

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

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

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

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

On arrive alors à l'hamiltonien total :

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

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

3-2 Le formalisme de Bogoliubov-de Gennes

Supposons que la chaîne considérée comporte N sites, avec des conditions aux limites à préciser, qui peuvent être par exemple périodiques ou ouvertes. L'espace des états est de dimension 2^N , puisque chaque site peut

être vide ou occupé par une particule. Cette croissance exponentielle de la dimension de l'espace des états avec le nombre de sites rend très difficile le traitement général d'un hamiltonien à N corps. Fort heureusement, pour un hamiltonien quadratique en les $\hat{a}_i, \hat{a}_i^\dagger$ du type de (43), on peut utiliser une méthode qui ne fait intervenir qu'une matrice beaucoup plus petite, de taille $2N \times 2N$.

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

$$\hat{A}^\dagger = \left(\hat{a}_1^\dagger \quad \dots \quad \hat{a}_N^\dagger \quad \hat{a}_1 \quad \dots \quad \hat{a}_N \right) \quad \hat{A} = \begin{pmatrix} \hat{a}_1 \\ \vdots \\ \hat{a}_N \\ \hat{a}_1^\dagger \\ \vdots \\ \hat{a}_N^\dagger \end{pmatrix} \quad (44)$$

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

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

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

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

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

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

et

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

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

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

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

3-3 La symétrie particule-trou

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

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

de (45). Sur le plan mathématique, ce doublement des termes se traduit par une propriété de symétrie de l'hamiltonien de Bogoliubov–de Gennes :

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

En utilisant

$$(-E) \hat{b}_{-E}^\dagger \hat{b}_{-E} = (-E) \hat{b}_E \hat{b}_E^\dagger = E (\hat{b}_E^\dagger \hat{b}_E - 1), \quad (57)$$

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

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

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

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

3-4 La chaîne de Kitaev infinie

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

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

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

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

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

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

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

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

ce qui donne

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

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

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

Comme expliqué en § 3-2, la connaissance des états propres de \hat{H}_q et des énergies associées $\pm E_q$ avec

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

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

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

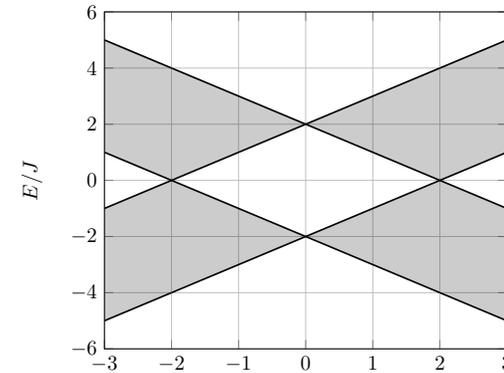


FIGURE 19. Spectre des quasi-particules pour la chaîne de Kitaev infinie dans le cas particulier pour $\Delta = J$.

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

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

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

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

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

Structure topologique de ce modèle. Nous constatons que ce problème physique, bien que différent du modèle SSH, donne un hamiltonien \hat{H}_q

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

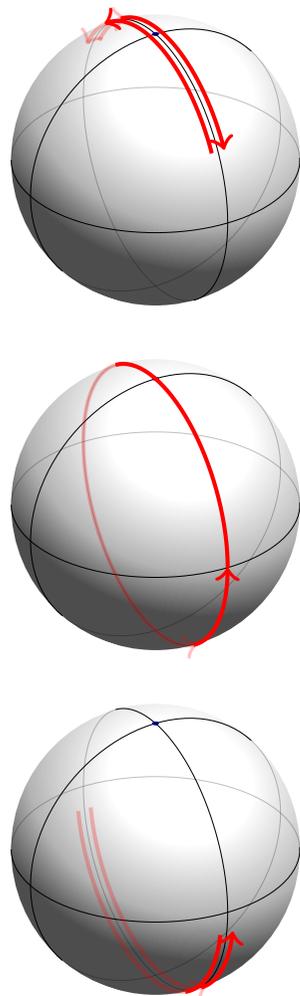


FIGURE 20. Trajectoire du vecteur $\mathbf{n}(q) = \mathbf{h}(q)/|\mathbf{h}(q)|$ sur la sphère unité quand q parcourt la zone de Brillouin. Quand $\mu > 2J$ (haut) ou $\mu < -2J$ (bas), le nombre d'enroulement est nul et on s'attend à une phase normale. En revanche pour $|\mu| < 2J$ (milieu), le vecteur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

dans l'espace des moments q qui a une structure similaire, en $-\mathbf{h}(q) \cdot \hat{\sigma}$. En particulier, la recherche des phases topologiques peut se faire en analysant la trajectoire du vecteur $\mathbf{h}(q)$ quand q parcourt la zone de Brillouin. Plus précisément, on voit sur (63) que le vecteur \mathbf{h} se trouve toujours dans un plan (ici yz), de sorte que la discussion est formellement identique à celle du modèle SSH. Puisque le spectre des excitations est donné par les E_q [eq. (64)], il présente toujours un gap sauf pour $|\mu| = 2J$ (en ce point, l'excitation pour $qa = 0$ ou π est d'énergie nulle). On peut donc s'attendre à observer deux phases topologiquement différentes (figure 20) :

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

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

4 Les modes de Majorana

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

Pour simplifier notre analyse, nous allons nous concentrer dans toute

cette partie sur le cas particulier

$$\Delta = J, \tag{68}$$

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

4-1 La chaîne de Kitaev ouverte

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

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

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

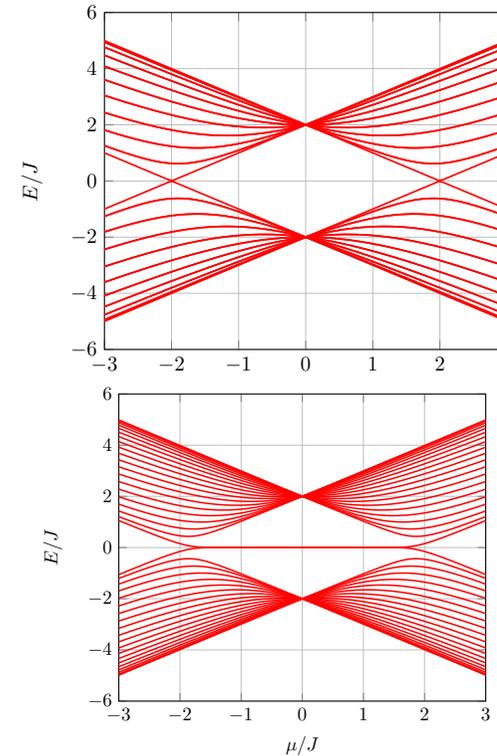


FIGURE 21. Spectre des quasi-particules pour la chaîne de Kitaev pour $\Delta = J$ et pour une chaîne de $N = 20$ sites avec des conditions aux limites périodiques (haut) et ouvertes (bas). Dans le dernier cas, un mode $(E, -E)$ d'énergie quasi-nulle (Majorana) apparaît entre $\mu = -2J$ et $\mu = 2J$.

4-2 L'état fondamental pour $\mu = 0$

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Le passage

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

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

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

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

avec

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

$$E_N = 0. \quad (77)$$

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

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

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

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

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

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

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

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

a donc la même énergie que $|\psi_0\rangle$, ce qui signifie que le niveau fondamental est doublement dégénéré, une base possible étant $\{|\psi_0\rangle, |\psi_1\rangle\}$. On remarquera que les états $|\psi_0\rangle$ et $|\psi_1\rangle$ correspondent à des parités différentes du

nombre total de fermions sur la chaîne. Par exemple, pour la chaîne à 4 sites mentionnée plus haut, on a

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

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

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

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

4-3 Les opérateurs de Majorana

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

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

est délocalisé entre les deux extrémités de la chaîne :

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

Cette délocalisation, associée à la symétrie particule-trou, entraîne une grande robustesse du niveau fondamental vis à vis de perturbations extérieures, à contraster avec la fragilité trouvée pour la chaîne SSH. Pour lever

la dégénérescence de ce niveau fondamental, il faut en effet transformer le mode d'énergie nulle de $\hat{\mathcal{H}}_{\text{BdG}}$ en une paire de modes $(E, -E)$ avec $E > 0$. Cela ne peut se faire qu'en agissant simultanément et de manière cohérente aux deux extrémités de la chaîne.

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

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

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

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

Par ailleurs, on trouve pour le carré de ces opérateurs

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

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

L'utilisation des opérateurs $\hat{\gamma}_{j,\pm}$ plutôt que des opérateurs $\hat{a}_j^\dagger, \hat{a}_j$ n'est bien souvent qu'un simple jeu d'écriture. Ainsi l'opérateur donnant l'éner-

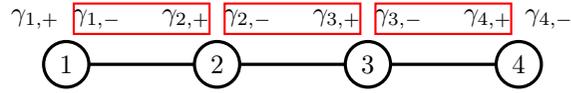


FIGURE 22. Couplages entre modes de Majorana voisins correspondant à l'hamiltonien (88) pour une chaîne de $N = 4$ sites. Les deux modes extrêmes $\hat{\gamma}_{1,+}$ et $\hat{\gamma}_{N,-}$ ne sont pas couplés.

gie $\pm\epsilon_j/2$ sur un site j selon qu'il est vide ou occupé s'écrit dans les deux points de vue :

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

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

Revenons maintenant à la chaîne de Kitaev. Son hamiltonien (70) s'écrit en fonction des opérateurs de Majorana

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

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

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

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

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

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

Il faut donc agir de manière cohérente aux deux extrémités de la chaîne pour lever la dégénérescence entre $|\psi_0\rangle$ et $|\psi_1\rangle$. Une perturbation locale

n'aura pas d'influence sur ce niveau fondamental, ce qui est à l'origine de sa robustesse.

Insistons sur le fait que ces deux modes de Majorana localisés chacun à une extrémité de la chaîne décrivent une seule excitation fermionique, avec le mode \hat{b}_N qui peut être vide ou occupé; on parle ainsi de quasi-particule fractionnaire à propos de ces modes. Cette situation est à contraster avec celle trouvée plus haut dans le modèle SSH, pour lequel on avait un mode (bosonique ou fermionique) localisé à chaque extrémité de la chaîne, chacun de ces deux modes pouvant être vide ou occupé (soit 4 possibilités pour des fermions sans spin, toutes d'énergie quasi-nulle).

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

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

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

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

sujet, ZHANG, YAJI et al. (2018), et aux références qu'il contient.

Dans le cadre de la physique atomique, aucune réalisation expérimentale n'a encore été publiée, mais des propositions concrètes sont en cours de réalisation dans des différents laboratoires (ZHANG, TEWARI et al. 2008; NASCIMBÈNE 2015; YAN, WAN et al. 2015), y compris dans un environnement dissipatif (BARDYN, BARANOV et al. 2012). Signalons également la question importante de la transposition du modèle de Kitaev, dans lequel le nombre de particules n'est pas conservé, à un système isolé où le nombre de particules est fixé, plus proche de ce qui est réalisé dans une expérience d'atomes froids; ainsi, IEMINI, MAZZA et al. (2015) ont proposé un modèle exactement soluble de cette nature dans lequel des modes d'énergie nulle et similaires aux modes de Majorana peuvent émerger (voir aussi RUHMAN, BERG et al. (2015)).

Appendice 1 : la chaîne SSH semi-infinie

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

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

avec

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

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

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

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

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

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

- complexes de module 1 si le discriminant du polynôme caractéristique $\lambda^2 - T\lambda + 1$ est négatif ou nul, c'est-à-dire si $|T| \leq 2$. Il faut pour cela

que l'énergie soit dans une des deux bandes d'énergie de la chaîne complète, eq. (6).

- réelles et telles que $|\lambda_-| < 1$, $|\lambda_+| > 1$ si le discriminant est strictement positif.

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

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

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

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

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

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

Appendice 2 : topologie et symétries

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

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

A la base de la classification des isolants et des supraconducteurs topologiques, on trouve deux symétries discrètes (pour une description détaillée, on pourra consulter l'article de revue très complet de CHIU, TEO et al. (2016)) :

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

$$\hat{H}\hat{T} = \hat{T}\hat{H}, \quad (97)$$

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

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

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

- Pour des assemblées de fermions, la symétrie "particule-trou" consiste à échanger les rôles des opérateurs *création d'une particule au point r* et *destruction d'une particule au point r* . Nous avons vu cette symétrie apparaître dans le cadre de la méthode de Bogoliubov–de Gennes, où elle

se décrit par l'opérateur anti-unitaire \hat{C} qui anti-commute avec l'hamiltonien \hat{H}_{BdG} (cf. § 3-3) :

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

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

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

La symétrie chirale que nous avons trouvée pour le modèle SSH est associée de manière générale au produit $\hat{S} = \hat{T} \cdot \hat{C}$, qui est un opérateur unitaire (produit de deux anti-unitaires). Elle joue un rôle décisif dans un des neuf cas que nous venons de mentionner, celui où ni \hat{C} , ni \hat{T} ne sont pertinentes. Deux situations peuvent se produire selon qu'elle est elle-même pertinente ou non. On arrive alors à 10 situations possibles, le fameux *ten-fold way* (table 2.1) (CHIU, TEO et al. 2016).

Pour une dimension d'espace donnée, toutes ces possibilités ne sont pas réalisées, mais seulement cinq d'entre elles. Pour la dimension 1 qui nous a intéressés jusqu'ici, il s'agit des possibilités grisées dans la table 2.1. L'hamiltonien SSH sans spin que nous avons étudié en § 1 est réel et donc invariant par renversement du temps $\mathcal{T}^2 = +1$. Il respecte par ailleurs (trivialement) la symétrie particule-trou puisqu'il ne contient pas de termes de gap supraconducteur ($\mathcal{C}^2 = +1$) et correspond donc à la classe BDI. Notons qu'il est toujours possible de redéfinir chaque site A_j ou B_j du réseau en multipliant sa phase par $e^{i\alpha_j}$ ou $e^{i\beta_j}$. Ce changement de jauge a pour effet immédiat de rendre les coefficients tunnel complexes (VELASCO & PAREDES 2017). On passe alors à la classe AIII tout en conservant la symétrie chirale. Le modèle de Kitaev que nous avons étudié porte sur des particules sans spin, et nous avons choisi un gap Δ réel. Il vérifie donc lui aussi tel que $\mathcal{C}^2 = +1$ et $\mathcal{T}^2 = +1$. Si le gap est complexe, on perd l'invariance par renversement du temps tout en conservant la symétrie particule-trou (classe D).

Pour terminer, insistons sur le fait que les quelques indications que nous venons de donner, avec les exemples des modèles sans spin SSH et Kitaev, ne constituent qu'un éclairage très partiel de la classification des isolants et supraconducteurs topologiques. Cette dernière ne prend toute sa perti-

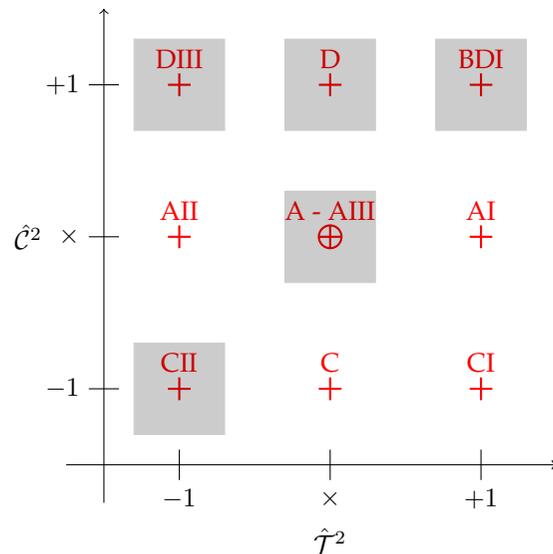


TABLE 2.1. Classification en dix possibilités pour les hamiltoniens décrivant les isolants et les supraconducteurs topologiques. Le symbole \times indique l'absence de symétrie. Cette classification utilise la nomenclature proposée par Elie Cartan en 1926 pour les espaces symétriques. Les cases surlignées sont celles qui sont réalisables pour les systèmes de dimension 1, avec la classe AIII pour la case centrale, correspondant à la présence de la symétrie chirale.

nence qu'en présence du couplage spin-orbite, qui permet de générer des classes de matériau plus riches (et plus complexes!) que celles envisagées ici.

Références

- ALICEA, Jason (2012), « New directions in the pursuit of Majorana fermions in solid state systems », in *Reports on progress in physics* **75**, p. 076501.
- ALICEA, Jason, Yuval OREG, Gil REFAEL, Felix VON OPPEN & Matthew PA FISHER (2011), « Non-Abelian statistics and topological quantum information processing in 1D wire networks », in *Nature Physics* **7**, p. 412.

- BARDYN, C-E, MA BARANOV, E RICO, A İMAMOĞLU, P ZOLLER & S DIEHL (2012), « Majorana modes in driven-dissipative atomic superfluids with a zero Chern number », in *Physical review letters* **109**, p. 130402.
- BEENAKKER, CWJ (2015), « Random-matrix theory of Majorana fermions and topological superconductors », in *Reviews of Modern Physics* **87**, p. 1037.
- CHIU, Ching-Kai, Jeffrey C. Y. TEO, Andreas P. SCHNYDER & Shinsei RYU (2016), « Classification of topological quantum matter with symmetries », in *Rev. Mod. Phys.* **88** (3), p. 035005.
- DELPLACE, P, D. ULLMO & G. MONTAMBAUX (2011), « Zak phase and the existence of edge states in graphene », in *Phys. Rev. B* **84**, p. 195452.
- HALDANE, FDM & S RAGHU (2008), « Possible realization of directional optical waveguides in photonic crystals with broken time-reversal symmetry », in *Physical Review Letters* **100**, p. 013904.
- IEMINI, Fernando, Leonardo MAZZA, Davide ROSSINI, Rosario FAZIO & Sebastian DIEHL (2015), « Localized Majorana-Like Modes in a Number-Conserving Setting : An Exactly Solvable Model », in *Phys. Rev. Lett.* **115** (15), p. 156402.
- KHANIKAEV, Alexander B & Gennady SHVETS (2017), « Two-dimensional topological photonics », in *Nature Photonics* **11**, p. 763.
- KITAEV, A. Y. (2001), « Unpaired Majorana fermions in quantum wires », in *Physics Uspekhi* **44**, p. 131.
- LODAHL, Peter, Sahand MAHMOODIAN, Søren STOBBE, Arno RAUSCHENBEUTEL, Philipp SCHNEEWEISS, Jürgen VOLZ, Hannes PICHLER & Peter ZOLLER (2017), « Chiral quantum optics », in *Nature* **541**, p. 473.
- LU, Ling, John D JOANNOPOULOS & Marin SOLJAČIĆ (2014), « Topological photonics », in *Nature Photonics* **8**, p. 821.
- MAJORANA, Ettore (1937), « Teoria simmetrica dell'elettrone e del positrone », in *Il Nuovo Cimento (1924-1942)* **14**, p. 171.
- MESSIAH, A. (2003), *Mécanique Quantique*, Dunod.
- MOURIK, Vincent, Kun ZUO, Sergey M FROLOV, SR PLISSARD, Erik PAM BAKKERS & Leo P KOUWENHOVEN (2012), « Signatures of Majorana fermions in hybrid superconductor-semiconductor nanowire devices », in *Science* **336**, p. 1003–1007.
- NADJ-PERGE, Stevan, Ilya K DROZDOV, Jian LI, Hua CHEN, Sangjun JEON, Jungpil SEO, Allan H MACDONALD, B Andrei BERNEVIG & Ali YAZDANI (2014), « Observation of Majorana fermions in ferromagnetic atomic chains on a superconductor », in *Science* **346**, p. 602–607.

- NASCIMBÈNE, Sylvain (2015), « Realizing one-dimensional topological superfluids with ultracold atomic gases », in *J. Phys. B* **78**, p. 026001.
- 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*.
- POLI, Charles, Matthieu BELLEC, Ulrich KUHL, Fabrice MORTESSAGNE & Henning SCHOMERUS (2015), « Selective enhancement of topologically induced interface states in a dielectric resonator chain », in *Nature communications* **6**, p. 6710.
- RUHMAN, Jonathan, Erez BERG & Ehud ALTMAN (2015), « Topological States in a One-Dimensional Fermi Gas with Attractive Interaction », in *Phys. Rev. Lett.* **114** (10), p. 100401.
- ST-JEAN, P, V GOBLOT, E GALOPIN, A LEMAÎTRE, T OZAWA, L LE GRATIET, I SAGNES, J BLOCH & A AMO (2017), « Lasing in topological edge states of a one-dimensional lattice », in *Nature Photonics* **11**, p. 651.
- SU, W. P., J. R. SCHRIEFFER & A. J. HEEGER (1979), « Solitons in Polyacetylene », in *Phys. Rev. Lett.* **42**, p. 1698–1701.
- VELASCO, Carlos G & Belén PAREDES (2017), « Realizing and Detecting a Topological Insulator in the AIII Symmetry Class », in *Physical Review Letters* **119**, p. 115301.
- WANG, Zheng, Yidong CHONG, John D JOANNOPOULOS & Marin SOLJAČIĆ (2009), « Observation of unidirectional backscattering-immune topological electromagnetic states », in *Nature* **461**, p. 772.
- WEIMANN, S, M KREMER, Y PLOTNIK, Y LUMER, S NOLTE, KG MAKRIS, M SEGEV, MC RECHTSMAN & A SZAMEIT (2017), « Topologically protected bound states in photonic parity–time-symmetric crystals », in *Nature materials* **16**, p. 433.
- YAN, Zhongbo, Shaolong WAN & Zhong WANG (2015), « Topological Superfluid and Majorana Zero Modes in Synthetic Dimension », in *Scientific Reports* **5**, p. 15927.
- ZHANG, Chuanwei, Sumanta TEWARI, Roman M. LUTCHYN & S. DAS SARMA (2008), « $p_x + ip_y$ Superfluid from s -Wave Interactions of Fermionic Cold Atoms », in *Phys. Rev. Lett.* **101** (16), p. 160401.
- ZHANG, Peng, Koichiro YAJI, Takahiro HASHIMOTO, Yuichi OTA, Takeshi KONDO, Kozo OKAZAKI, Zhijun WANG, Jinsheng WEN, GD GU, Hong DING et al. (2018), « Observation of topological superconductivity on the surface of an iron-based superconductor », in *Science*, p. 4596.