Jaqueline Bloch, jacqueline.bloch@c2n.upsaclay.fr ; Mark Goerbig, goerbig@lps.u-psud.fr

# Courbure de Berry d'un fermion de Dirac

## 1 Préliminaires : lien entre un hamiltonien de Bloch à deux bandes et le spin 1/2 (pour la maison)

Nous avons déjà vu que le hamiltonien de Bloch s'écrit comme une matrice hermitienne $N \times N$, où $N$ désigne le nombre de composantes (sites, orbitales,...) dans le motif à l'intérieur de la maille élémentaire. Nous considérons ici $N = 2$, et nous appellerons les deux composantes $A$ et $B$.

1. En écrivant le hamiltonien de Bloch sous la forme

$$H(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} h_{AA}(\mathbf{k}) & h_{AB}(\mathbf{k}) \\ h_{BA}(\mathbf{k}) & h_{BB}(\mathbf{k}) \end{pmatrix}, \tag{1}$$

à quelles conditions doivent satisfaire les composantes ?
*Solution:* *Afin d'avoir un hamiltonien de Bloch hermitien, il faut que $h_{AA}(\mathbf{k})$ et $h_{BB}(\mathbf{k})$ soient réelles et $h_{AB}(\mathbf{k}) = h^*_{BA}(\mathbf{k})$.*

2. Comment le hamiltonien de Bloch se décompose sur les matrices de Pauli

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \qquad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \qquad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}?$$

*Solution:* *On a $H(\mathbf{k}) = h_0(\mathbf{k})1_{2\times 2} + \vec{h}(\mathbf{k}) \cdot \vec{\sigma}$, où $1_{2\times 2}$ est la matrice unité $2 \times 2$, $\vec{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ et on a pour les composantes du vecteur $\vec{h}(\mathbf{k}) = (h_x(\mathbf{k}), h_y(\mathbf{k}), h_z(\mathbf{k}))$*

$$\begin{aligned} h_{AA}(\mathbf{k}) &= \frac{1}{2}[h_0(\mathbf{k}) + h_z(\mathbf{k})], \qquad h_{BB}(\mathbf{k}) = \frac{1}{2}[h_0(\mathbf{k}) - h_z(\mathbf{k})], \\ h_{BA}(\mathbf{k}) &= h^*_{AB}(\mathbf{k}) = h_x(\mathbf{k}) + ih_y(\mathbf{k}). \end{aligned}$$

3. Pour la diagonalisation du hamiltonien, nous pouvons omettre le terme proportionnel à la matrice unité, comme il est déjà diagonal et ne fait que déplacer le spectre par un terme $h_0(\mathbf{k})$. Montrer que le hamiltonien peut s'écrire sous la forme

$$H(\mathbf{k}) = \epsilon_{\mathbf{k}} \begin{pmatrix} \cos\theta_{\mathbf{k}} & \sin\theta_{\mathbf{k}} e^{-i\varphi_{\mathbf{k}}} \\ \sin\theta_{\mathbf{k}} e^{i\varphi_{\mathbf{k}}} & -\cos\theta_{\mathbf{k}} \end{pmatrix}, \tag{2}$$

et déterminer les paramètres $\epsilon_{\mathbf{k}}$ et les fonctions trigonométriques. Quel est le spectre du hamiltonien ?
*Solution:* *À l'aide du déterminant du hamiltonien, on trouve*

$$\epsilon^2_{\mathbf{k}} = h_x(\mathbf{k})^2 + h_y(\mathbf{k})^2 + h_z(\mathbf{k})^2$$

*et*

$$\cos\theta_{\mathbf{k}} = \frac{h_z(\mathbf{k})}{\epsilon_{\mathbf{k}}}, \qquad \sin\theta_{\mathbf{k}} = \frac{\sqrt{h_x(\mathbf{k})^2 + h_y(\mathbf{k})^2}}{\epsilon_{\mathbf{k}}}$$

*et pour* $\varphi_{\mathbf{k}}$

$$\tan(\varphi_{\mathbf{k}}) = \frac{h_y(\mathbf{k})}{h_x(\mathbf{k})}.$$

*Comme la matrice faisant intervenir les fonctions trigonométriques est de trace nulle et de déterminant* $-1$*, ses valeurs propres sont* $\lambda = \pm 1$*, et on trouve pour le spectre*

$$E_\lambda(\mathbf{k}) = \lambda\epsilon_{\mathbf{k}} = \lambda\sqrt{h_x(\mathbf{k})^2 + h_y(\mathbf{k})^2 + h_z(\mathbf{k})^2}.$$

*N.B. : Si nous avions tenu compte explicitement du terme proportionnel à la matrice unité, le spectre se serait écrit*

$$E_\lambda(\mathbf{k}) = h_0(\mathbf{k}) + \lambda\sqrt{h_x(\mathbf{k})^2 + h_y(\mathbf{k})^2 + h_z(\mathbf{k})^2}.$$

4. Calculer les états propres du hamiltonien de Bloch, en les écrivant sous la forme

$$|u_\lambda(\mathbf{k})\rangle = \begin{pmatrix} a_\lambda(\mathbf{k}) \\ b_\lambda(\mathbf{k}) \end{pmatrix}. \tag{3}$$

<u>Solution:</u> *L'équation aux valeurs propres* $H(\mathbf{k})|u_\lambda(\mathbf{k})\rangle = \lambda\epsilon_{\mathbf{k}}|u_\lambda(\mathbf{k})\rangle$ *s'écrit, en termes de composantes,*

$$\begin{aligned} (\cos\theta_{\mathbf{k}} - \lambda)\, a_\lambda(\mathbf{k}) + \sin\theta_{\mathbf{k}} e^{-i\varphi_{\mathbf{k}}} b_\lambda(\mathbf{k}) &= 0 \\ \sin\theta_{\mathbf{k}} e^{i\varphi_{\mathbf{k}}} a_\lambda(\mathbf{k}) - (\cos\theta_{\mathbf{k}} + \lambda)\, b_\lambda(\mathbf{k}) &= 0. \end{aligned}$$

*À l'aide des relations trigonométriques* $\sin\theta = 2\sin\frac{\theta}{2}\cos\frac{\theta}{2}$ *et* $\cos\theta = 1 - 2\sin^2\frac{\theta}{2} = 2\cos^2\frac{\theta}{2} - 1$*, on obtient (sans se soucier de la normalisation pour le moment)*

$$\begin{aligned} |u_+(\mathbf{k})\rangle &\sim \begin{pmatrix} -2\sin\frac{\theta_{\mathbf{k}}}{2}\cos\frac{\theta_{\mathbf{k}}}{2} \\ -2\sin^2\frac{\theta_{\mathbf{k}}}{2} e^{i\varphi_{\mathbf{k}}} \end{pmatrix} \propto \begin{pmatrix} \cos\frac{\theta_{\mathbf{k}}}{2} \\ \sin\frac{\theta_{\mathbf{k}}}{2} e^{i\varphi_{\mathbf{k}}} \end{pmatrix} \\ |u_-(\mathbf{k})\rangle &\sim \begin{pmatrix} -2\sin\frac{\theta}{2}\cos\frac{\theta_{\mathbf{k}}}{2} e^{-i\varphi_{\mathbf{k}}} \\ 2\cos^2\frac{\theta_{\mathbf{k}}}{2} \end{pmatrix} \propto \begin{pmatrix} -\sin\frac{\theta_{\mathbf{k}}}{2} e^{-i\varphi_{\mathbf{k}}} \\ \cos\frac{\theta_{\mathbf{k}}}{2} \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

*On remarque que l'expression finale est déjà normalisée pour les deux vecteurs.*

## 2 Fermions de Dirac massifs et courbure de Berry

Nous considérons maintenant un fermion de Dirac au voisinage d'un point de la première zone de Brillouin, en prenant comme exemple le graphène (ou le nitrure de bore). Il a déjà été montré (cours 2 et 3) que les fermions de Dirac arrivent par paires dans deux vallées (aux points $K$ et $K'$) désignés par l'indice $\xi = \pm$. Nous rappelons que le hamiltonien s'écrit (en vecteurs d'onde complexes dans la représentation polaire)

$$H(\mathbf{q}) = \begin{pmatrix} \Delta & \xi\hbar v q e^{-i\xi\varphi} \\ \xi\hbar v q e^{i\xi\varphi} & -\Delta \end{pmatrix}, \tag{4}$$

où $\mathbf{q}$ désigne le vecteur d'onde mesuré à partir du point $K$ ou $K'$, $q = |\mathbf{q}|$ et $\tan\varphi = q_y/q_x$.

1. Rappeler les fonctions trigonométrique et $\epsilon_{\mathbf{q}}$ intervenant dans le hamiltonien (2) en termes des paramètres $\Delta$, $v$ et $q$. Rappeler la dispersion des bandes, et les états propres asosciés.
2. Calculer la connexion de Berry $\mathcal{A}_{\lambda,\xi}(\mathbf{q}) = i\langle u_\lambda^\xi(\mathbf{q})|\nabla_{\mathbf{q}} u_\lambda^\xi(\mathbf{q})\rangle$, en prenant en compte explicitement l'indice de vallée ainsi que l'indice de bande.
3. Calculer la courbure de Berry $\mathcal{B}_{\lambda,\xi}(\mathbf{q}) = \nabla_{\mathbf{q}} \times \mathcal{A}_{\lambda,\xi}(\mathbf{q})$.

4. Quelle est la dimension physique de la courbure de Berry ? Donner l'expression de $\mathcal{B}_{\pm}(\mathbf{q} = 0)$ en termes de « masse de Dirac » $m_D = \Delta/v^2$ et montrer que la courbure de Berry (ou sa composante $z$) peut s'écrire sous la forme

$$\mathcal{B}_{\lambda,\xi}(\mathbf{q}) = -\frac{\lambda\xi \mathrm{sgn}(\Delta)}{2} \frac{\lambdabar_C^2}{(1 + \lambdabar_C^2 q^2)^{3/2}}. \tag{5}$$

   Spécifier $\lambdabar_C$ et interpréter.

5. Calculer la phase (et le flux) de Berry pour une surface circulaire de rayon $q$. Que trouve-t-on dans la limite $q \to \infty$ ? Interpréter.
6. Sous quelles conditions le nombre de Chern peut-il s'écrire comme la somme des contributions des flux de Berry de points de Dirac individuelles ? Que cela signifie-t-il pour le nombre de fermions de Dirac dans un matériau ?
7. Discuter les conditions pour avoir un isolant de Chern, i.e. un isolant de bande avec un nombre de Chern non nul.