

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

Le but de ce TD est de comprendre comment une contrainte uniaxiale appliquée au graphène modifie les cônes de Dirac pour finalement ouvrir un gap. La nature topologique de cette transition sera mise en lumière en décrivant la phase géométrique autour des cônes de Dirac.

## Graphène sous contrainte uniaxiale : fusion des cônes de Dirac et phase géométrique

Nous nous intéressons au graphène soumis à une contrainte selon une des directions cristallographiques. Dans la suite nous considérerons que la contrainte agit selon la direction (Oy). Le couplage  $t_1$  entre deux atomes A et B selon (Oy) est alors différent de celui selon les deux autres directions que l'on dénote  $t_2$ . On définit  $\beta = \frac{t_1}{t_2}$ .

$\beta < 1$  (resp.  $\beta > 1$ ) correspond à une extension (resp. une compression) du réseau cristallin. On rappelle que l'Hamiltonien du graphène non contraint peut s'écrire sous la forme :

$$\hat{H}_k = \begin{pmatrix} 0 & -t\gamma_k^* \\ -t\gamma_k & 0 \end{pmatrix}$$

avec  $\gamma_k = 1 + \exp(i\vec{k} \cdot \vec{a}_2) + \exp(i\vec{k} \cdot \vec{a}_3)$

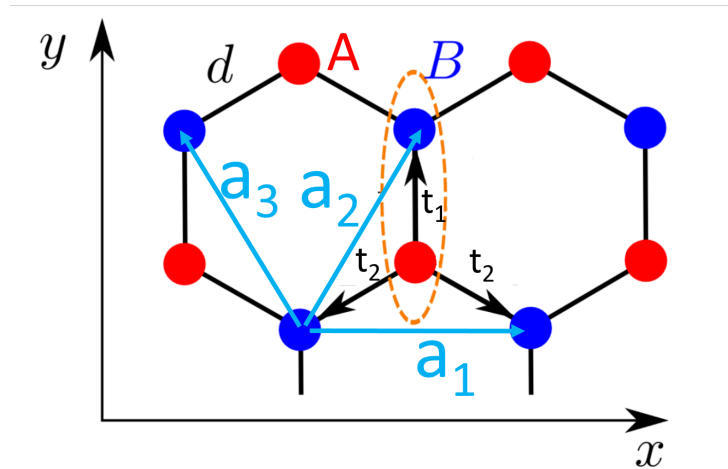


FIGURE 1 – La structure cristalline du graphène contraint

1. Donner l'expression de  $\hat{H}_k$  et l'expression généralisée de  $\gamma_k$  pour une valeur non nulle de  $\beta$ .
2. En partant des résultats déjà obtenus pour le graphène non contraint, calculer les relations de dispersion  $E(k_x, k_y)$  en fonction de  $\beta$ .
3. Pour quelles valeurs de  $\beta$  les bandes se touchent-elles ? Calculer les coordonnées des points de contact. Commenter l'évolution de la structure de bande lorsque l'on augmente la valeur de  $\beta$  au-delà de 1. Déterminer la valeur critique  $\beta_c$  pour laquelle on observe une transition.

On s'intéresse dans la suite à une interprétation de la transition observée en termes de phase géométrique. Pour cela nous allons calculer la phase de Berry autour des cônes de Dirac.

4. Montrer que l'état quantique  $\frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{\gamma_k}{|\gamma_k|} \end{pmatrix}$  est vecteur propre de l'Hamiltonien  $\hat{H}_k$  du graphène non contraint. Pour quelle valeur propre ?
5. Calculer la connection de Berry de cet état propre.
6. Par un raisonnement géométrique, en déduire l'enroulement de la phase de Berry autour des points de contact pour  $\beta = 1$  et  $\beta = \beta_c$ .