Initiation à la matière quantique
Introduction

– Cours 11 –

Isolants topologiques 2D et correspondance volume-bord – *systèmes avec symétrie par renversement du temps*

(chapitre 4 des notes de cours)

université PARIS-SACLAY

FACULTÉ DES SCIENCES D'ORSAY

Théorème de Kramers pour les électrons dans des bandes

Symétrie par renversement du temps dans des bandes d'énergie :

$$THT^{-1} = H \qquad \Rightarrow \qquad E_{n,\uparrow}(\mathbf{k}) = E_{n,\downarrow}(-\mathbf{k})$$

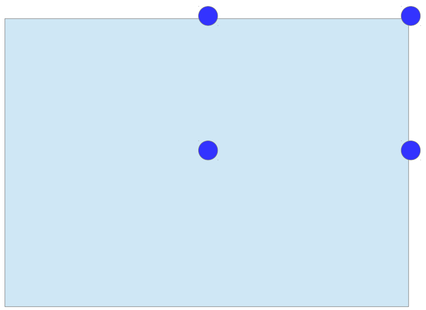
Théorème de Kramers : double dégénérescence quand

$$\mathbf{k} = -\mathbf{k} + \mathbf{G}$$

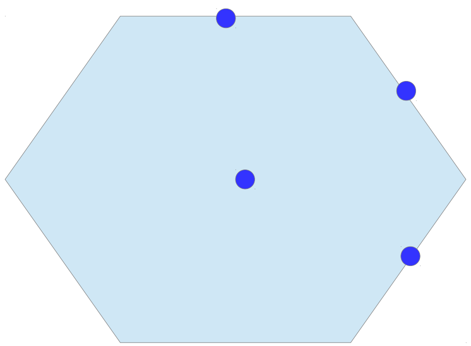
...modulo un vecteur du réseau réciproque

→ impulsions invariantes par renversement du temps : $\mathbf{G}/2$

exemples (zones de Brillouin) :

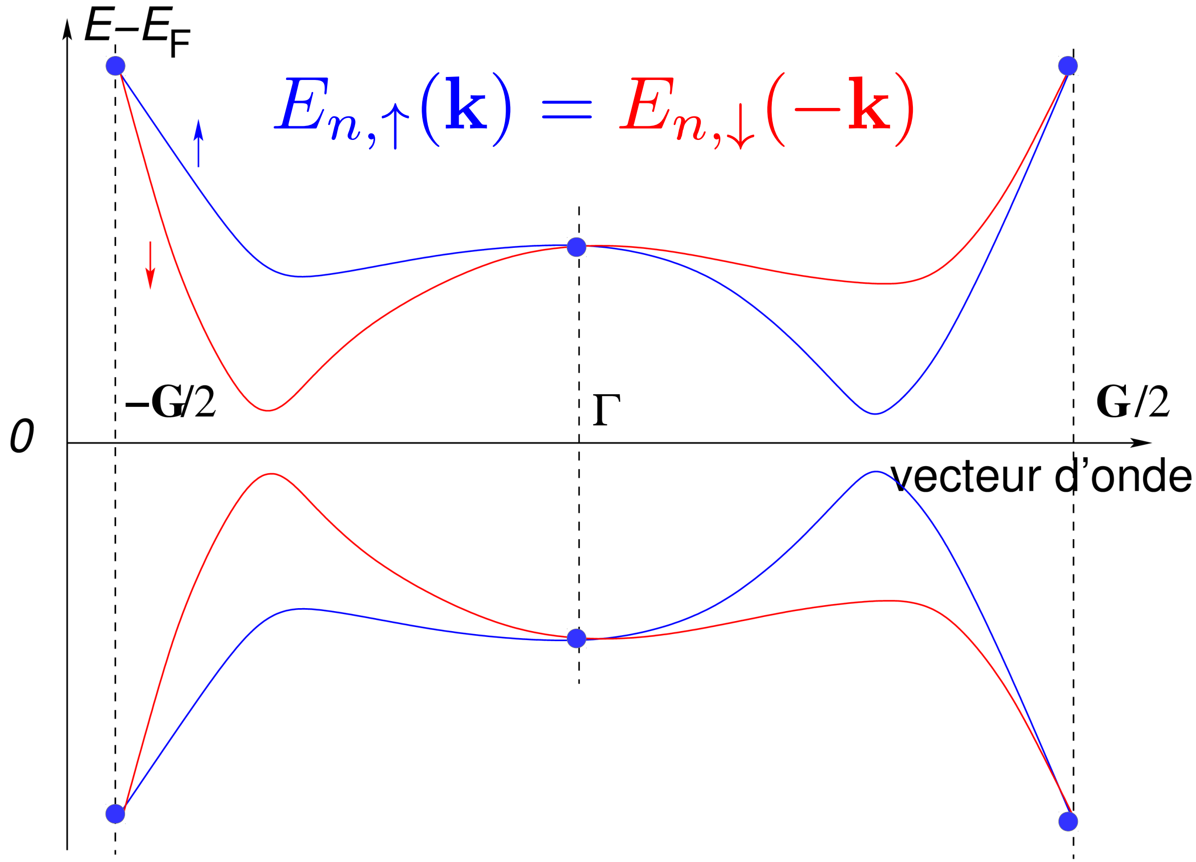


réseau rectangulaire



réseau triangulaire

Théorème de Kramers pour les électrons dans des bandes



N.B. : ce type de structure de bande nécessite un *couplage spin-orbite*

→ modèles de liaisons fortes sans sauts dépendant du temps

$$E_{n,\uparrow}(\mathbf{k}) = E_{n,\downarrow}(\mathbf{k}) = E_{n,\uparrow}(-\mathbf{k}) = E_{n,\downarrow}(-\mathbf{k})$$

Courbure de Berry pour des systèmes respectant la symétrie par renversement du temps

→ *antisymétrie de la courbure de Berry :* $\mathcal{B}_n^\sigma(\mathbf{k}) = i\epsilon^{\sigma\mu\nu}\langle \partial_{k_\mu} u_n | \partial_{k_\nu} u_n \rangle$

1) "fermions sans spin" $T|u(\mathbf{k})\rangle = |u(-\mathbf{k})\rangle = |u(\mathbf{k})\rangle^*$

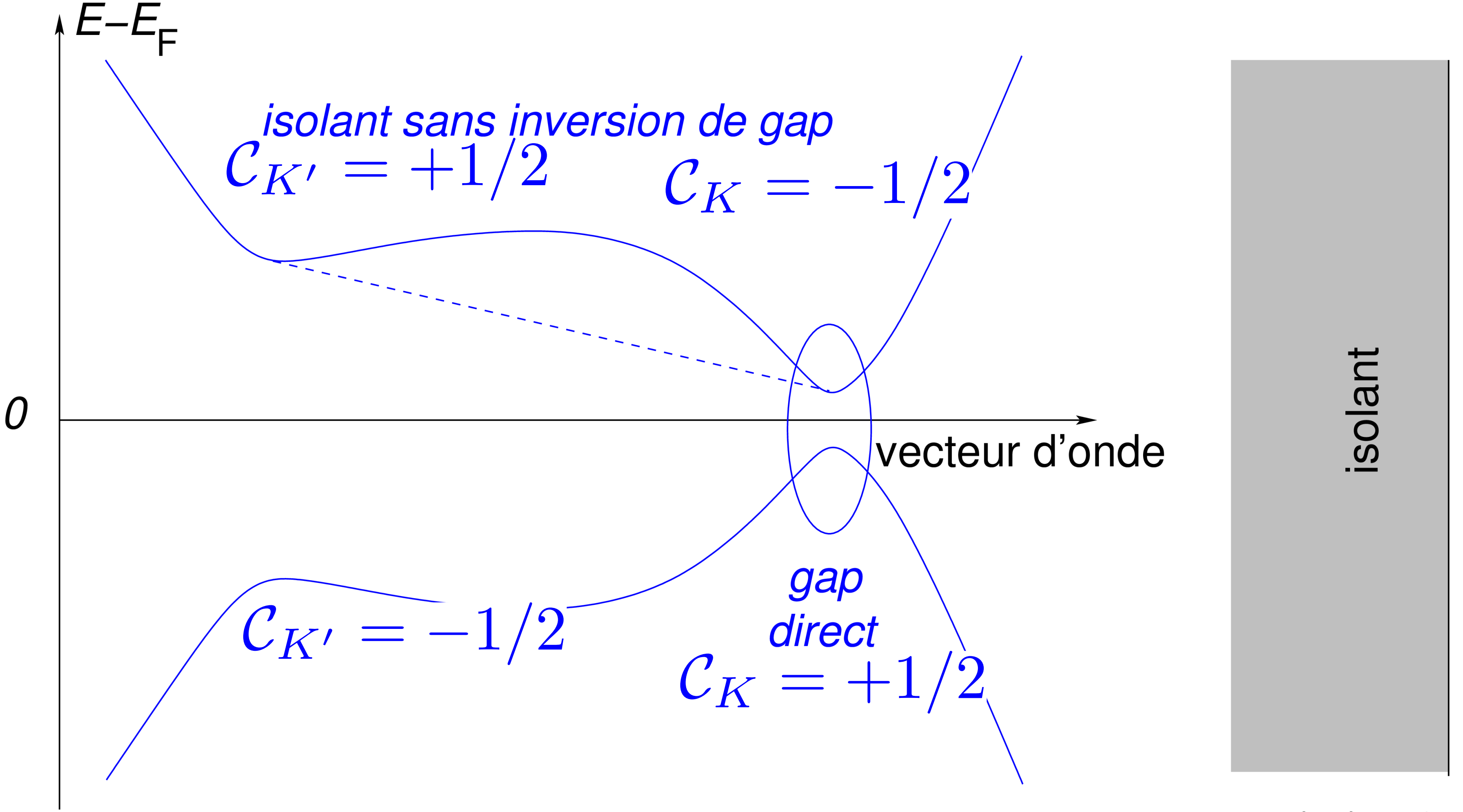
$$\mathcal{B}_\lambda(-\mathbf{k}) = -\mathcal{B}_\lambda(\mathbf{k})$$

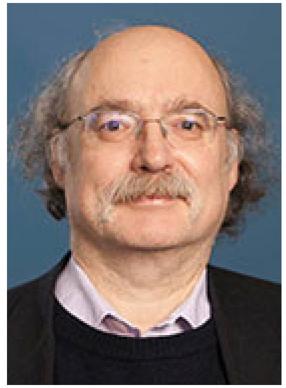
2) "fermions avec spin" $T|u_\sigma(\mathbf{k}\rangle = |u_{-\sigma}(-\mathbf{k})\rangle$ avec $T^2 = -1$

$$\mathcal{B}_\lambda^{-\sigma}(-\mathbf{k}) = -\mathcal{B}_\lambda^\sigma(\mathbf{k})$$

→ *dans les deux cas :* $\mathcal{C}_\lambda = 0$

Bandes sans symétrie par renversement du temps – modèle de Haldane





Haldane (1988)

Symétrie par renversement du temps brisée : $E(\mathbf{k}) \neq E(-\mathbf{k})$

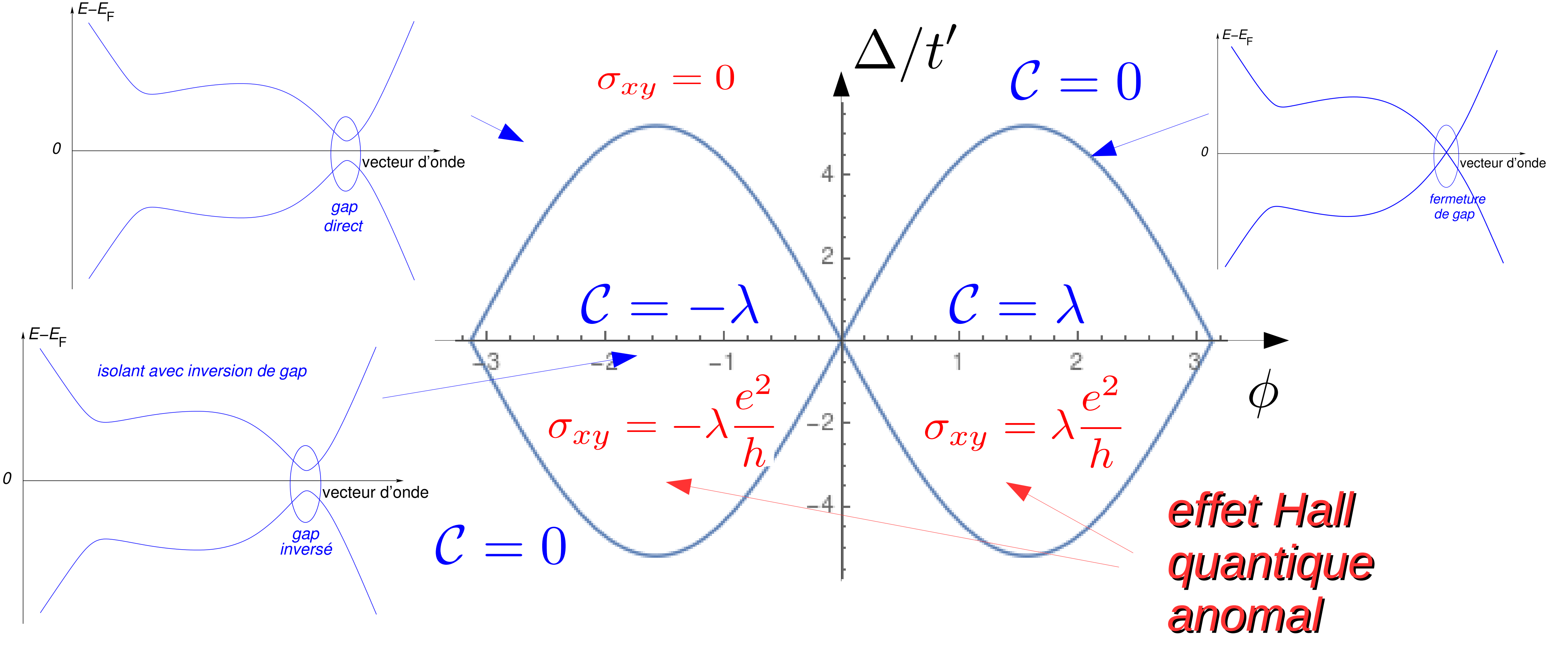
modifier les points de Dirac <u>individuellement</u>

Modèle de Haldane (1988)

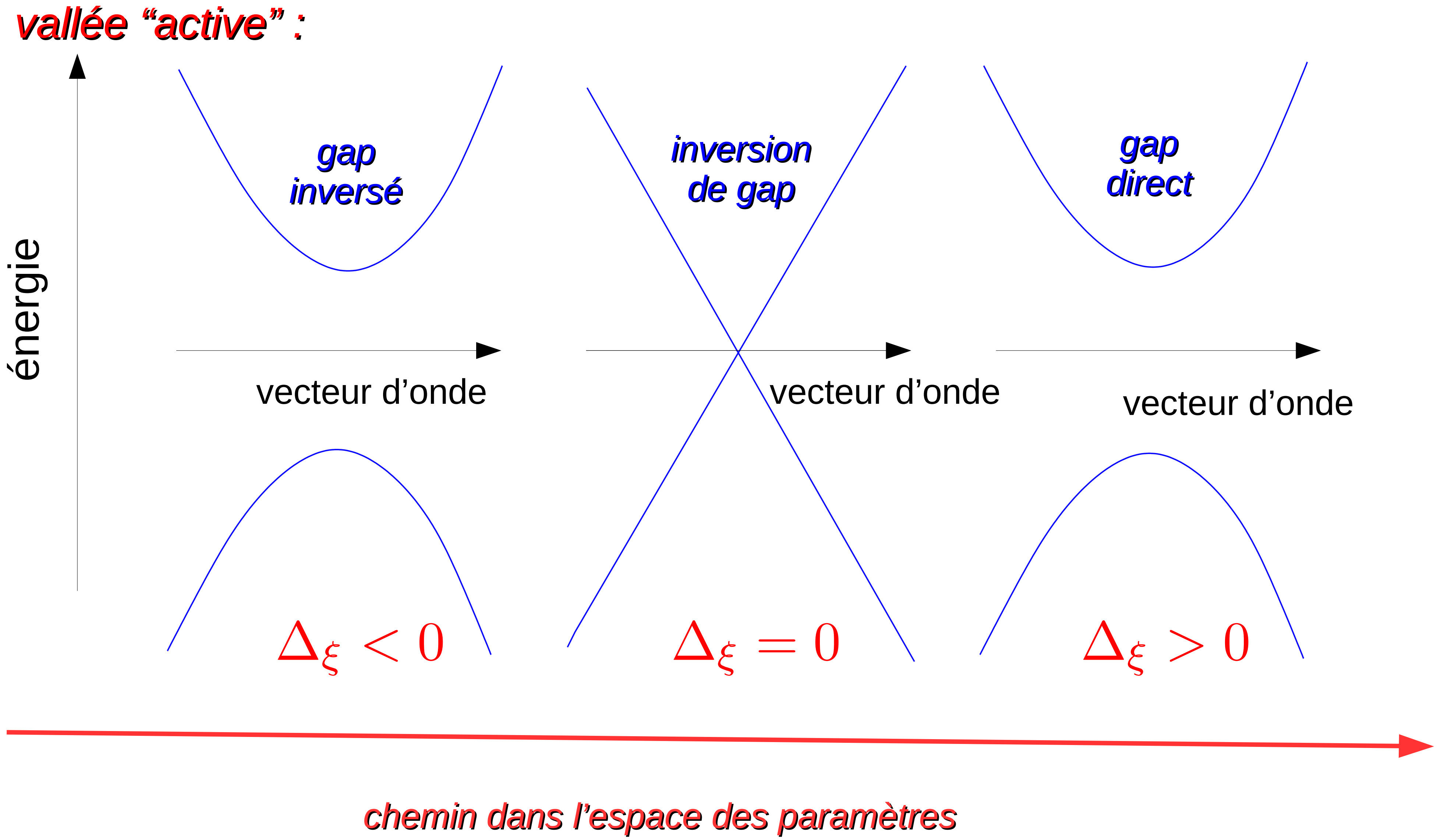
[Haldane, Phys. Rev. Lett. (1988)]

<u>Rappel :</u> nombre de Chern = somme des contributions des deux points de Dirac

$$\mathcal{C} = -\frac{1}{2}\lambda[\mathrm{sgn}(m_K) - \mathrm{sgn}(m_{K'})] \quad \text{où} \quad m_\xi v^2 = \Delta - \xi 3\sqrt{3}t' \sin(\phi)$$

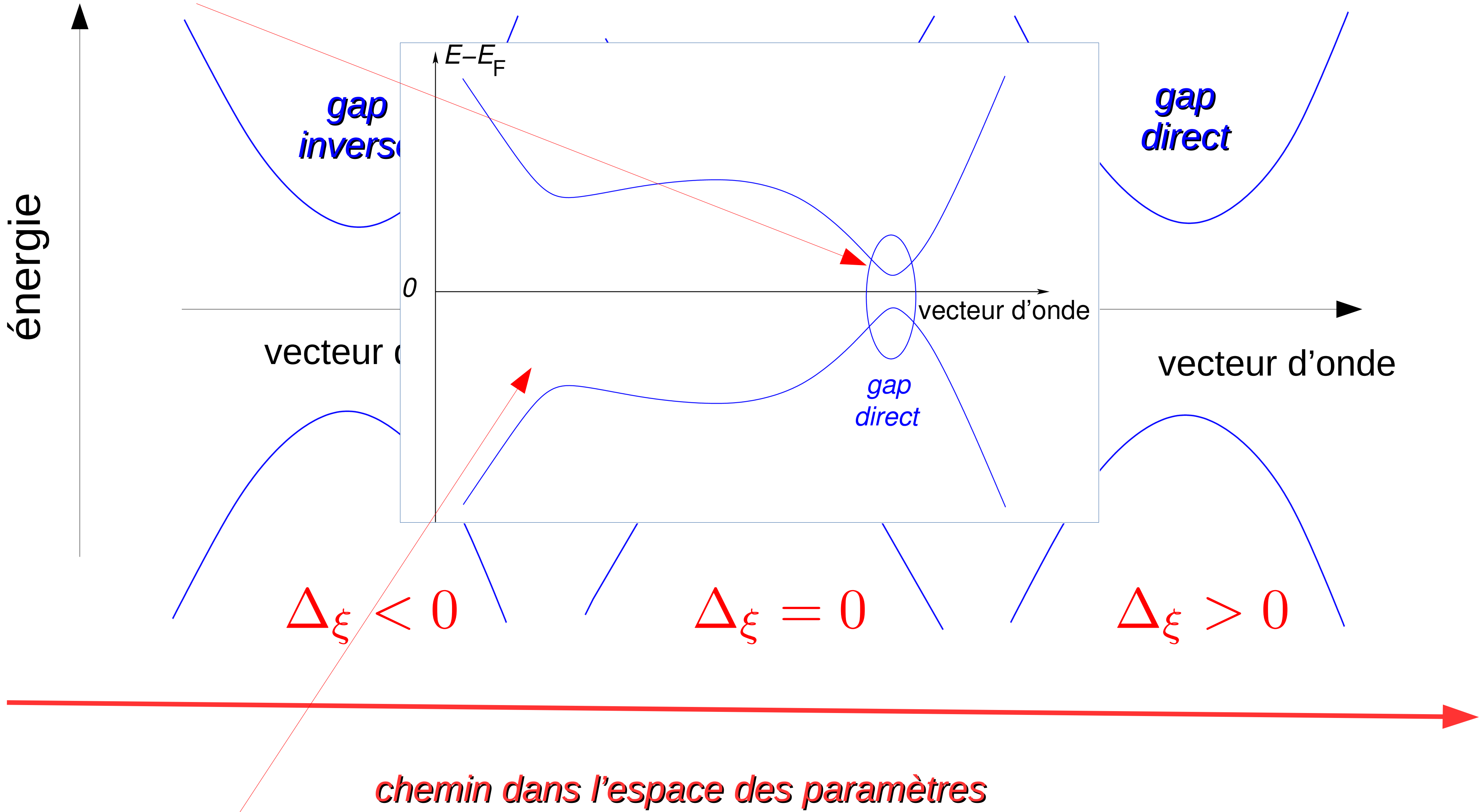


Transition de phase topologique



Transition de phase topologique

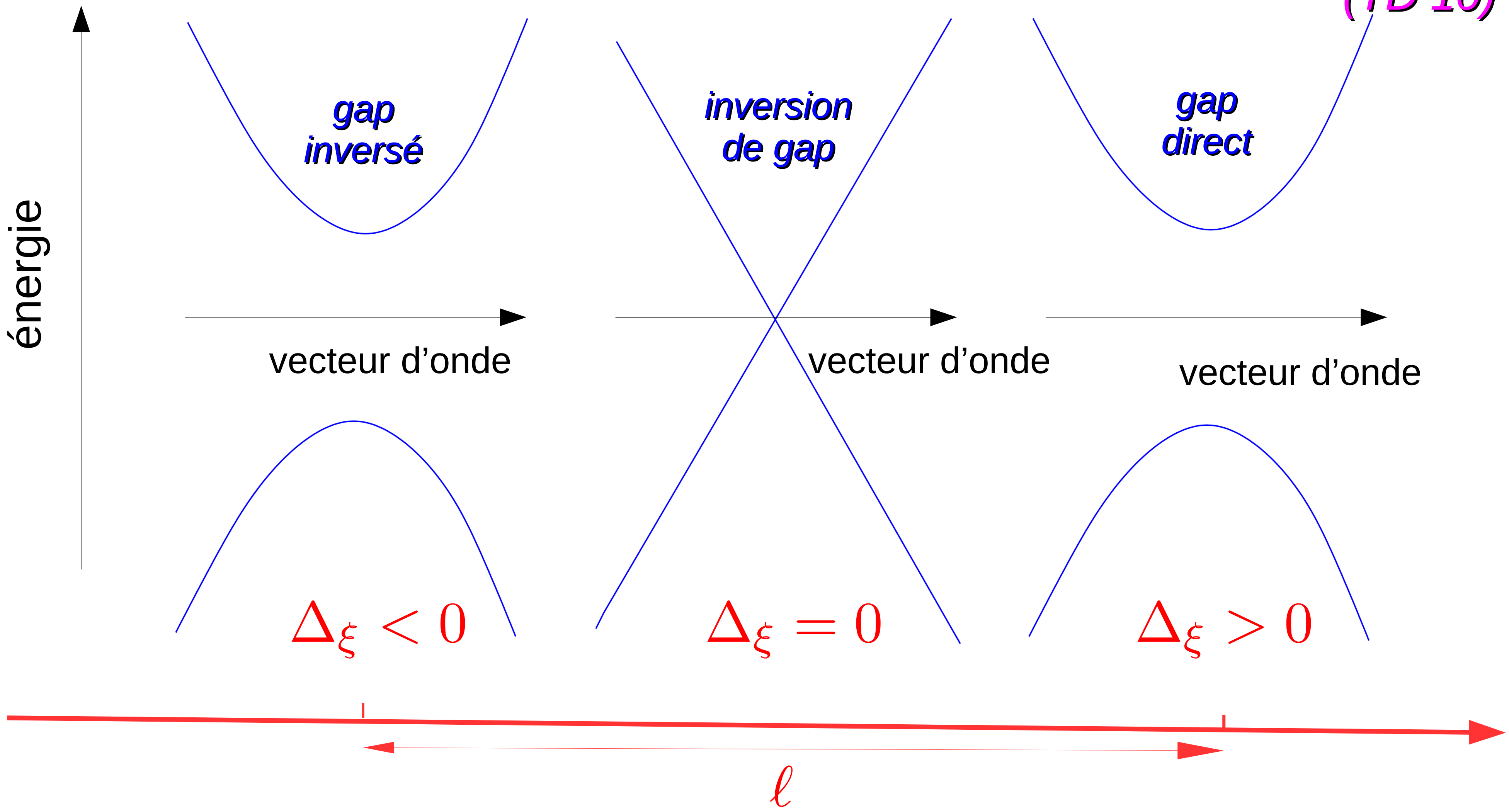
vallée “active” :



vallée “spectatrice” : $\Delta_{-\xi} > 0$ *(lors de la transition)*

Transition de phase topologique – correspondance volume-bord

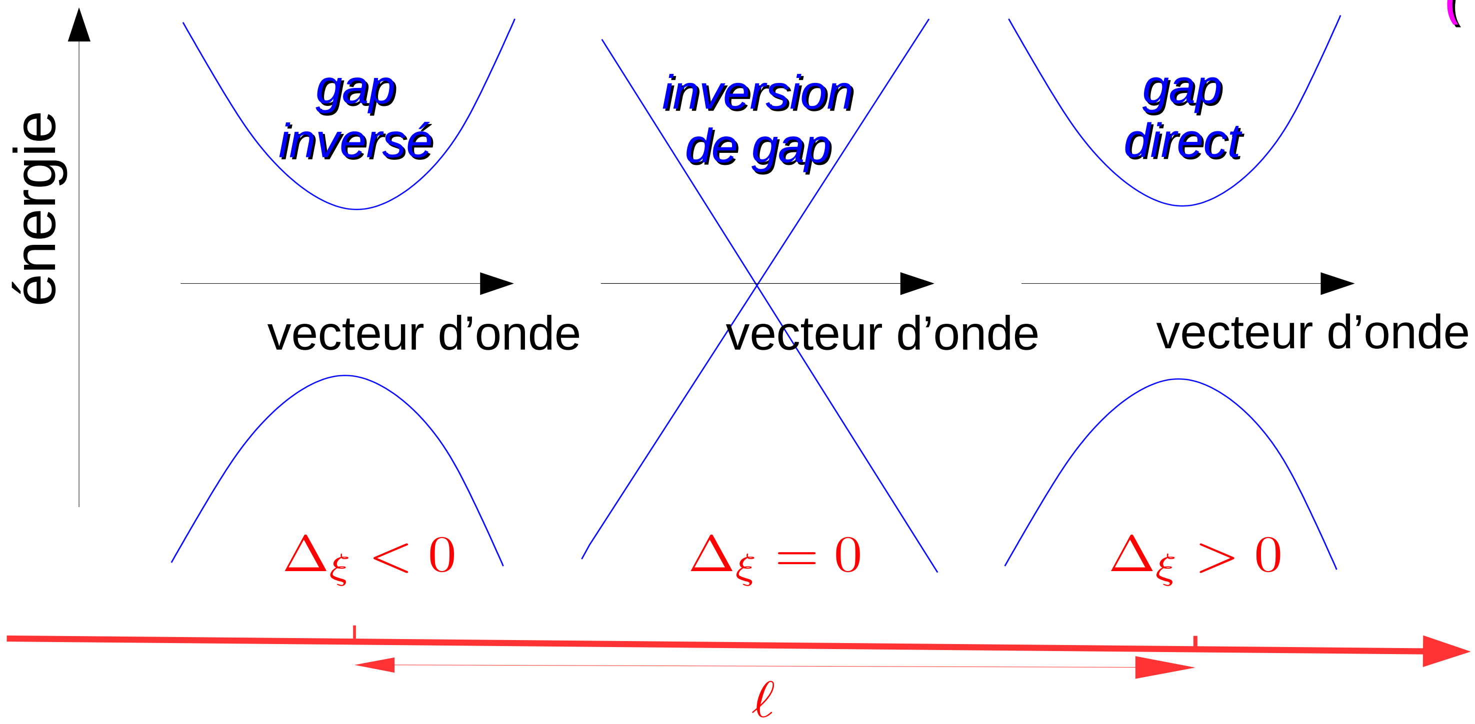
(TD 10)



chemin dans l’espace des paramètres
~ changement du paramètre à une interface de largeur ℓ $\quad \Delta_\xi \rightarrow \Delta_\xi(x/\ell)$

Transition de phase topologique – correspondance volume-bord

(TD, exo 1)



1.1)

$$H = \begin{pmatrix} \Delta(x/\ell) & \hbar v(\xi q_x - i q_y) \\ \hbar v(\xi q_x + i q_y) & -\Delta(x/\ell) \end{pmatrix}$$

Hamiltonien décrivant seulement la vallée où le gap change de signe

Modèle 2D d'une interface graduée (*hétérojunction topologique*)

1.2)

Transformation unitaire : $U = \exp(i\pi\sigma_x/4)$

$$\sigma_z \to -\sigma_y, \qquad \sigma_y \to \sigma_z$$

$$H' = \begin{pmatrix} \hbar v q_y & \xi\hbar v q_x + i\Delta(\frac{x}{\ell}) \\ \xi\hbar v q_x - i\Delta(\frac{x}{\ell}) & -\hbar v q_y \end{pmatrix}$$

Quelle sera l'allure du spectre ?

mécanique quantique : $[x, q_x] = i$

→ quantification du mouvement selon x

→ famille de ***bandes 1D*** : $E_n(q_y)$

Modèle 2D d'une interface graduée (*hétérojunction topologique*)

1.2)

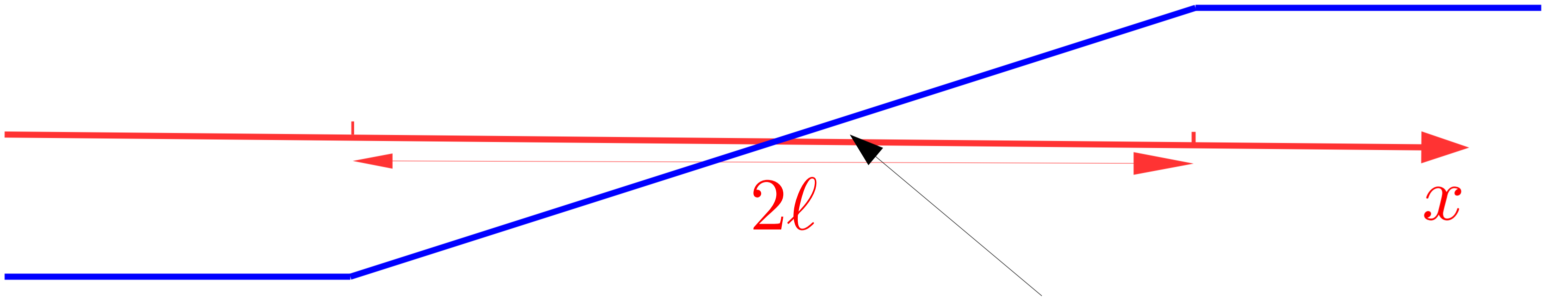
Transformation unitaire : $U = \exp(i\pi\sigma_x/4)$

$$\sigma_z \to -\sigma_y, \qquad \sigma_y \to \sigma_z$$

$$H' = \begin{pmatrix} \hbar v q_y & \xi\hbar v q_x + i\Delta_0 \frac{x}{\ell} \\ \xi\hbar v q_x - i\Delta_0 \frac{x}{\ell} & -\hbar v q_y \end{pmatrix}$$

1.3)

Simplification (*linéarisation* de la fonction du gap) : $\Delta(x \to \infty) = \Delta_0$



$\Delta(x \to -\infty) = -\Delta_0$

$\Delta(x/\ell) \simeq \Delta_0 x/\ell$

Modèle 2D d'une interface graduée (*hétérojunction topologique*)

1.2)

Transformation unitaire : $U = \exp(i\pi\sigma_x/4)$

$$\sigma_z \to -\sigma_y, \qquad \sigma_y \to \sigma_z$$

1.3)

$$H' = \begin{pmatrix} \hbar v q_y & \xi\hbar v q_x + i\Delta_0 \frac{x}{\ell} \\ \xi\hbar v q_x - i\Delta_0 \frac{x}{\ell} & -\hbar v q_y \end{pmatrix}$$

→ ***fermions de Dirac 2D dans un champ magnétique avec un "gap"*** $\hbar v q_y$

1.4)

→ longueurs caractéristiques :

$$\lambda_C^{-1} = \frac{\Delta_0}{\hbar v}$$

longueur intrinsèque

$$\xi\hbar v \left(q_x + i\xi \frac{\Delta_0}{\hbar v} \frac{x}{\ell} \right)$$

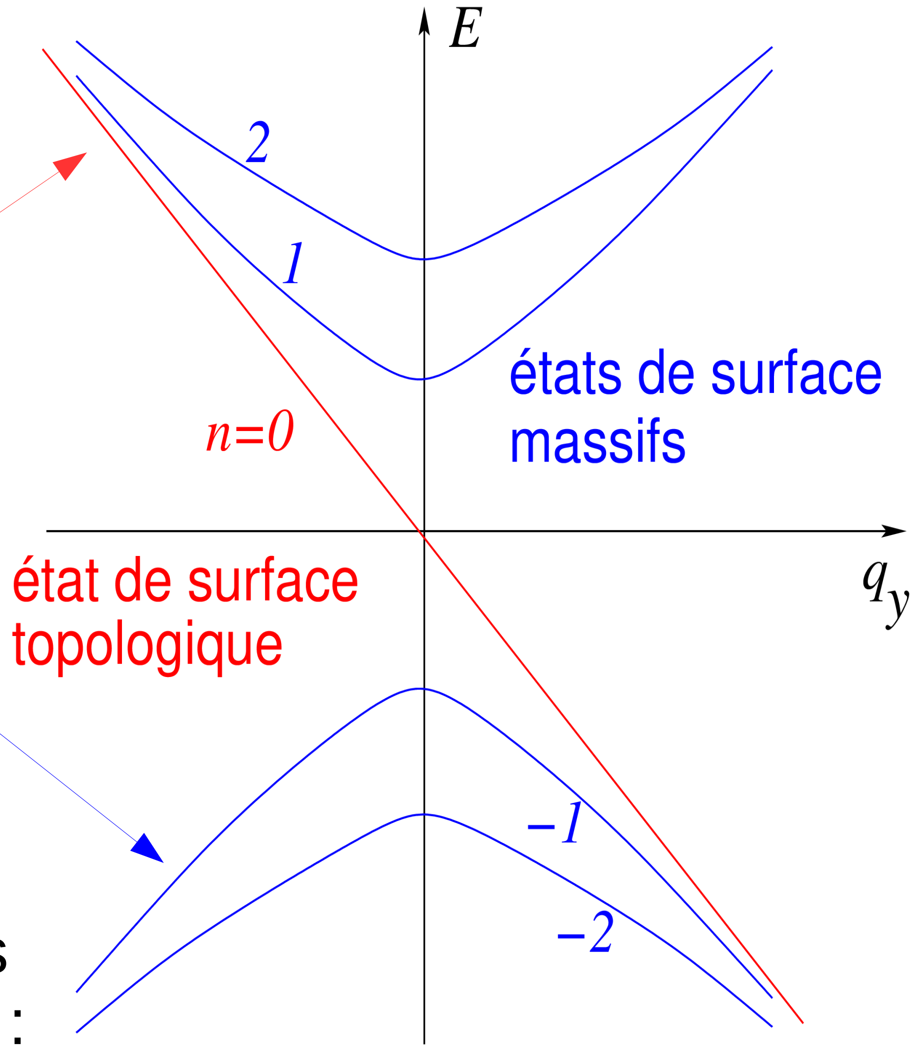
États de bord

chiralité :

$$v_\xi = \xi v$$

1.5)

$$\begin{aligned} E_{n=0}(q_y) &= \xi\hbar v q_y \\ E_{\lambda,n\neq 0}(q_y) &= \lambda\hbar v\sqrt{q_y^2 + 2n/\ell_S^2} \end{aligned}$$



dépendent de la modélisation de la surface

Condition de visibilité (états en-dessous du gap de volume) :

$$E_n = \hbar v\sqrt{2n/\ell\bar{\lambda}_C} < \Delta_0 \qquad \Leftrightarrow \qquad 2n < \ell/\bar{\lambda}_C$$

États de bord

1.6)

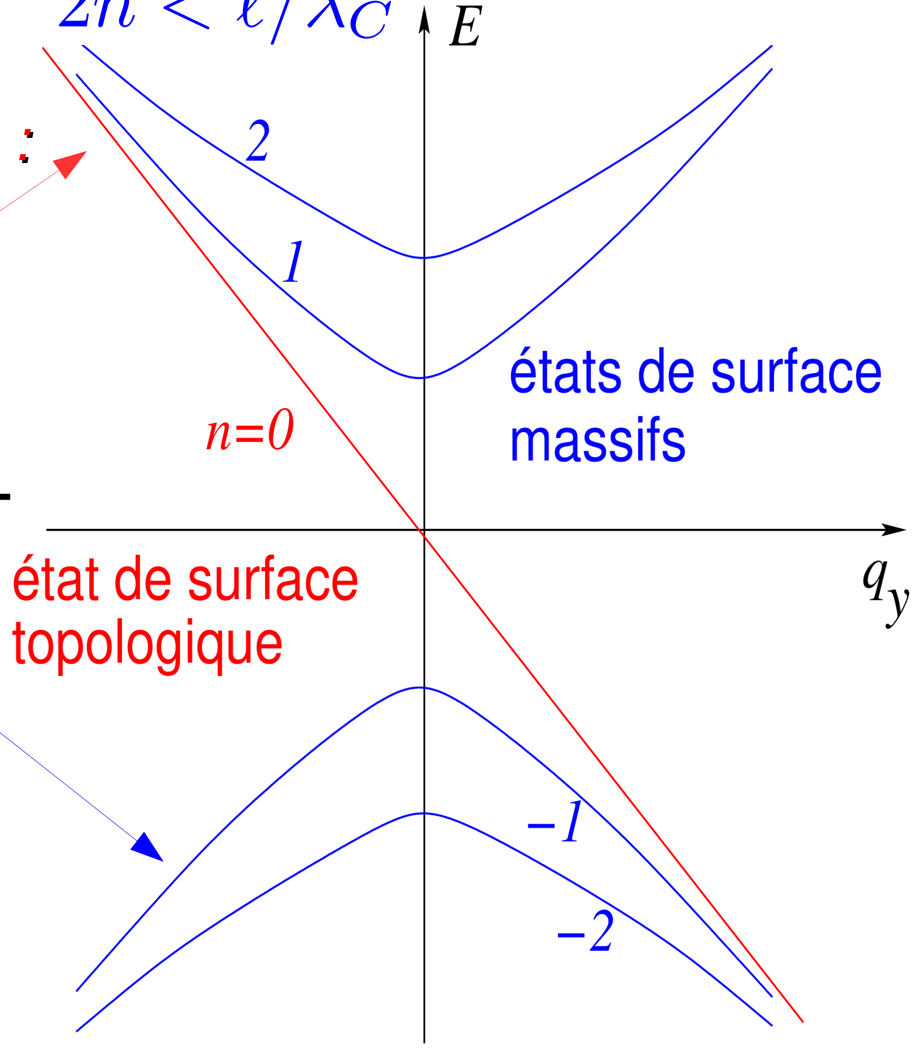
$$E_n = \hbar v\sqrt{2n/\ell\lambdabar_C} < \Delta_0 \qquad \Leftrightarrow \qquad 2n < \ell/\lambdabar_C$$

limite $\ell/\lambdabar_C \to 0$ (interface/surface abrupte) :

$$E_{n=0}(q_y) = \xi\hbar v q_y$$

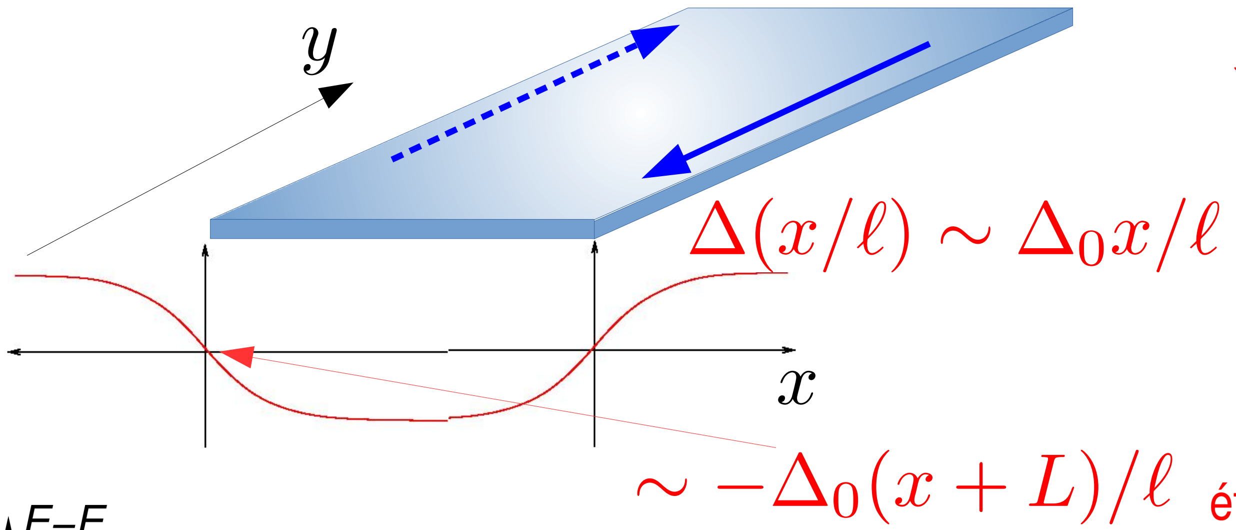
$$\cancel{E_{\lambda,n\neq0}(q_y) = \lambda\hbar v\sqrt{q_y^2 + 2n/\ell_S^2}}$$

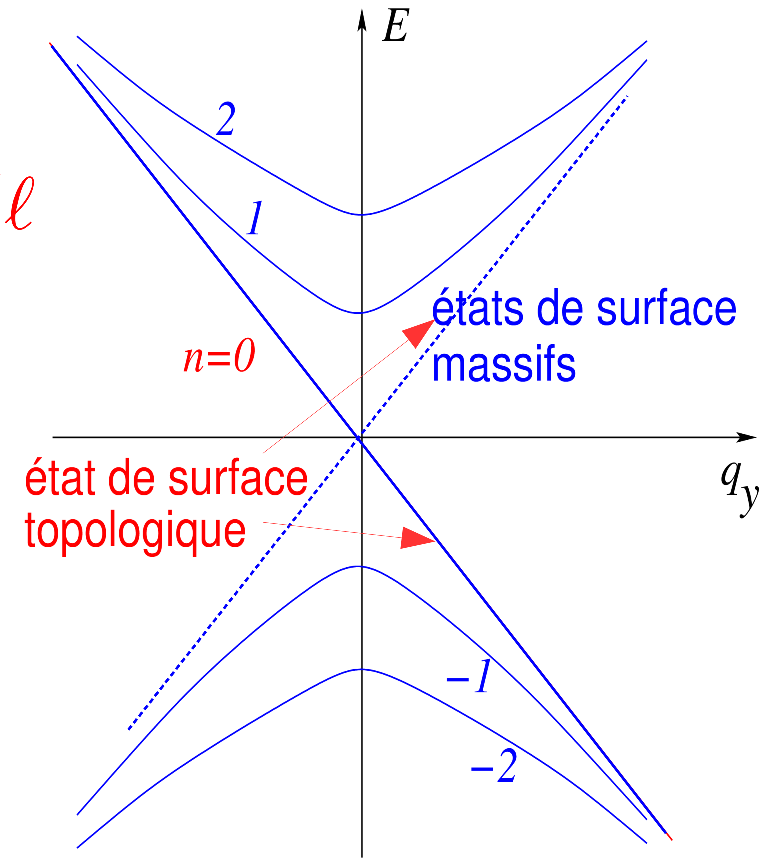
dépendent de la modélisation de la surface

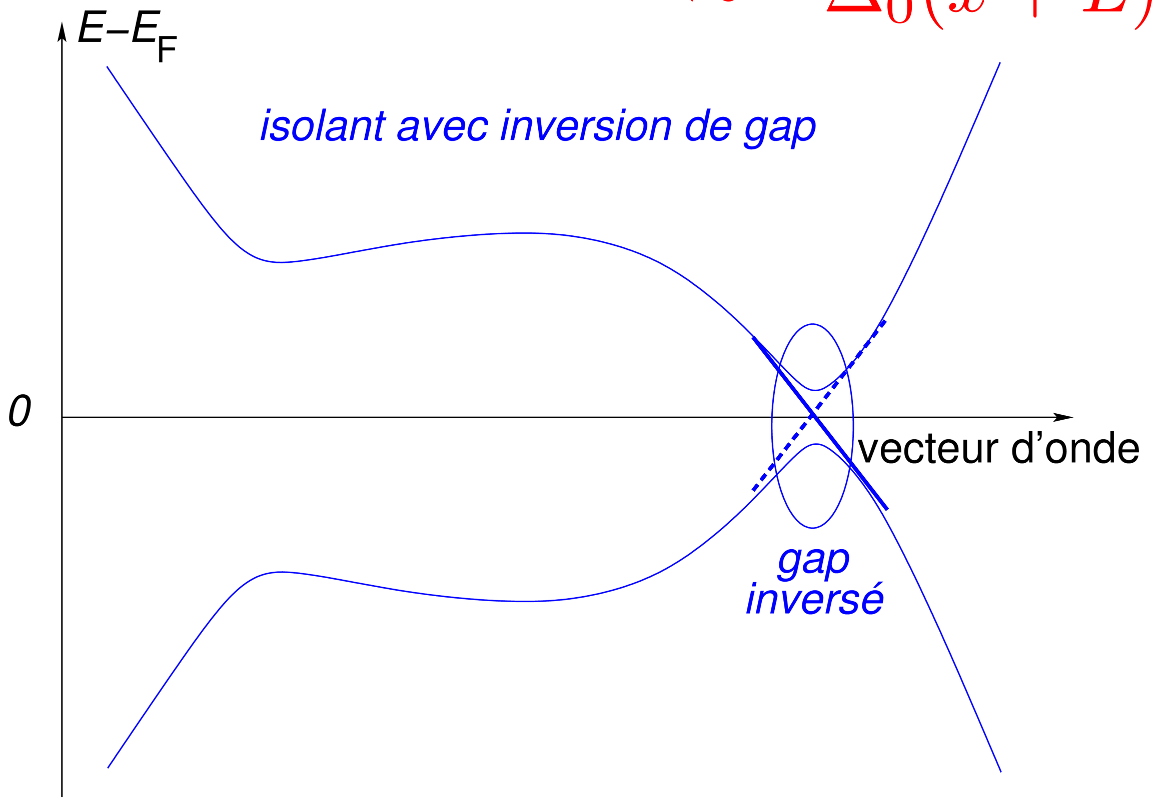


Seuls les états chiraux survivent dans la limite d'une interface abrupte (états topologiquement protégés).

États de bord (chiraux)

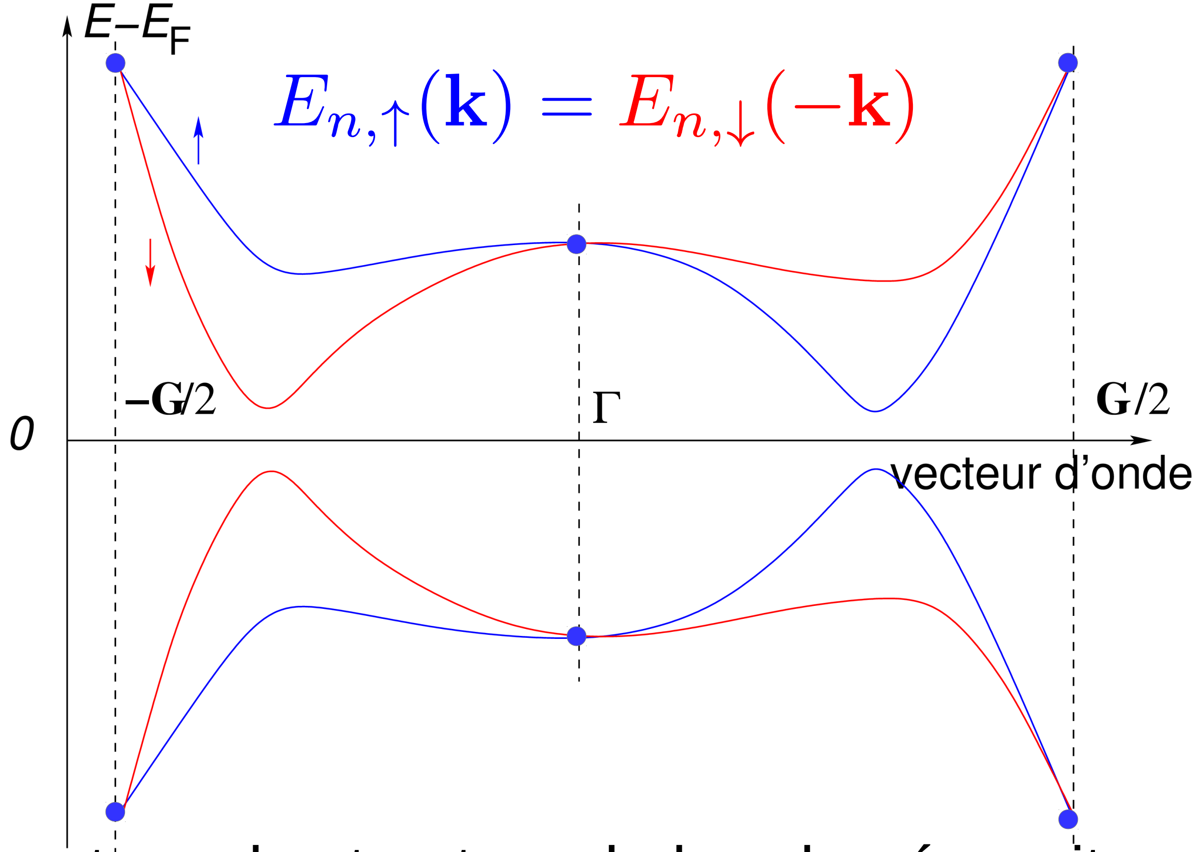






ressemblance avec l'effet Hall quantique à $\nu = 1$
→ effet Hall quantique anomal

Peut-on avoir un isolant topologique sans briser la symétrie par renversement du temps ?



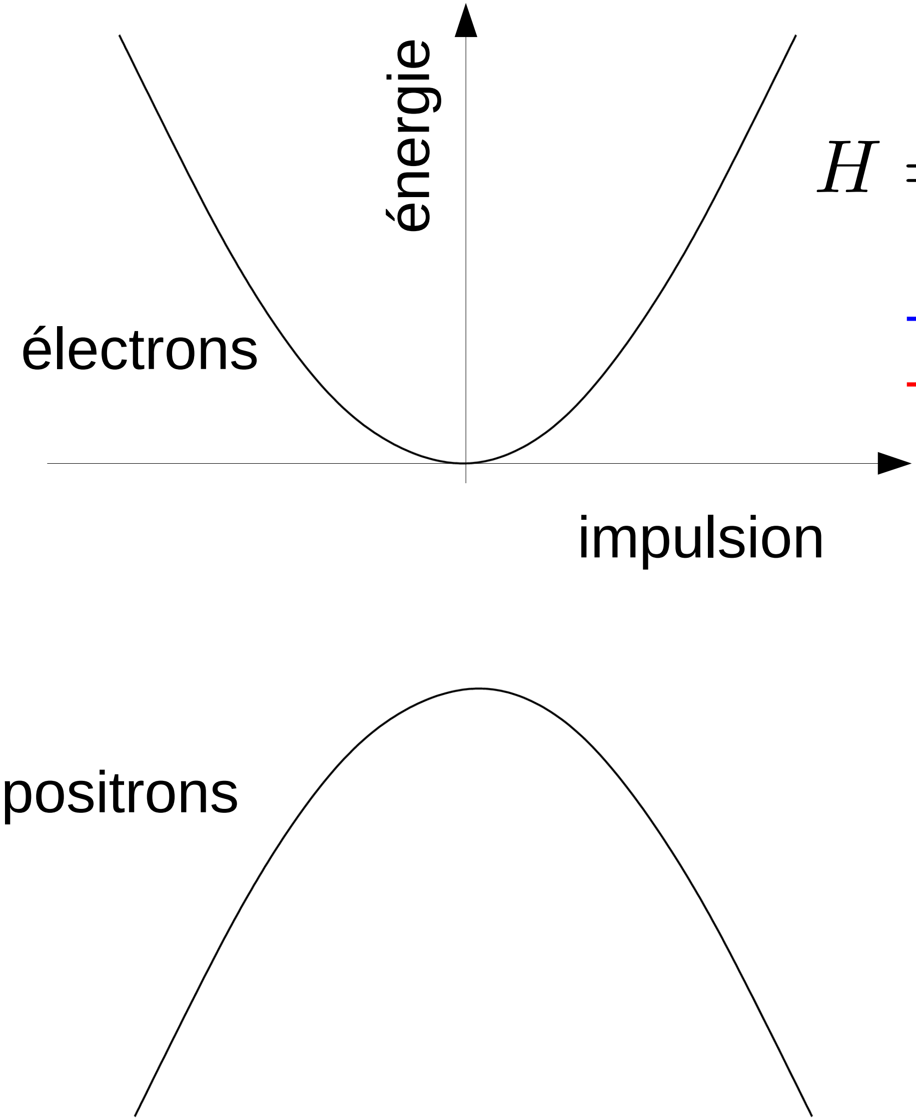
N.B. : ce type de structure de bande nécessite un *couplage spin-orbite*

→ modèles de liaisons fortes sans sauts dépendant du temps

$$\cancel{E_{n,\uparrow}(\mathbf{k}) = E_{n,\downarrow}(\mathbf{k}) = E_{n,\uparrow}(-\mathbf{k}) = E_{n,\downarrow}(-\mathbf{k})}$$

Le couplage spin-orbite

Retour à l'introduction du spin dans l'équation ~~de Schrödinger :~~ *de Dirac*



$$H = \frac{p^2}{2m} - \frac{\hbar\gamma}{2}\sigma \cdot \mathbf{B} + \lambda_{SO}\sigma \cdot (\mathbf{p} \times \mathbf{E})$$

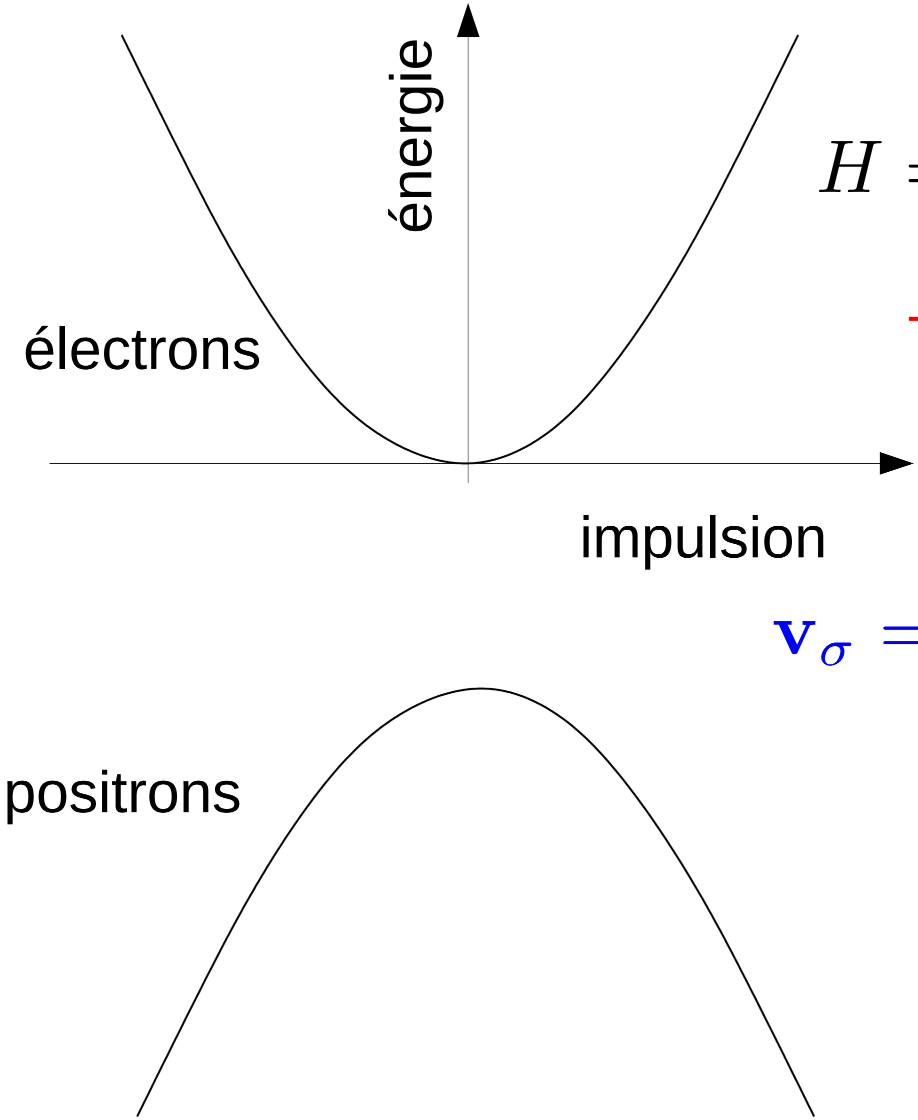
+ un champ magnétique (effet Zeeman)
+ un champ électrique (→ spin-orbite)

effets dus à la mécanique quantique relativiste :

→ *équation de Dirac*
→ "couplage" entre électrons et positrons dû aux champs

Le couplage spin-orbite

Retour à l'introduction du spin dans l'équation de Dirac ~~de Schrödinger :~~

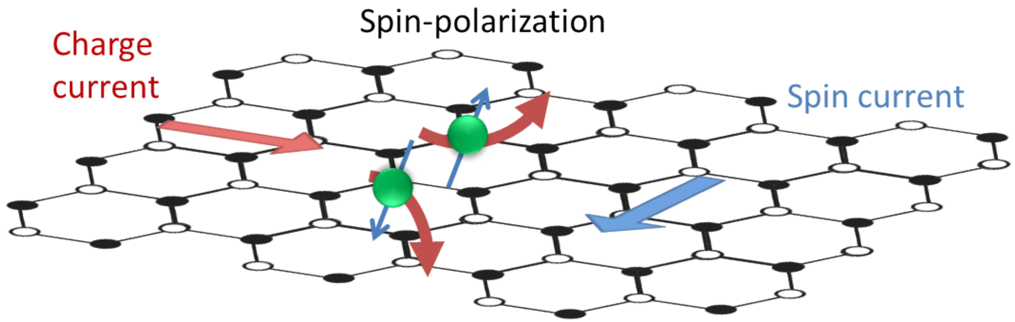


$$H = \frac{p^2}{2m} + \lambda_{SO}\sigma \cdot (\mathbf{p} \times \mathbf{E})$$

+ un champ électrique (→ spin-orbite)

→ nouvelle contribution à la vitesse :

$$\mathbf{v}_\sigma = \nabla_\mathbf{p} H = \mathbf{v}(\lambda_{SO} = 0) - \lambda_{SO}\sigma \times \mathbf{E}$$



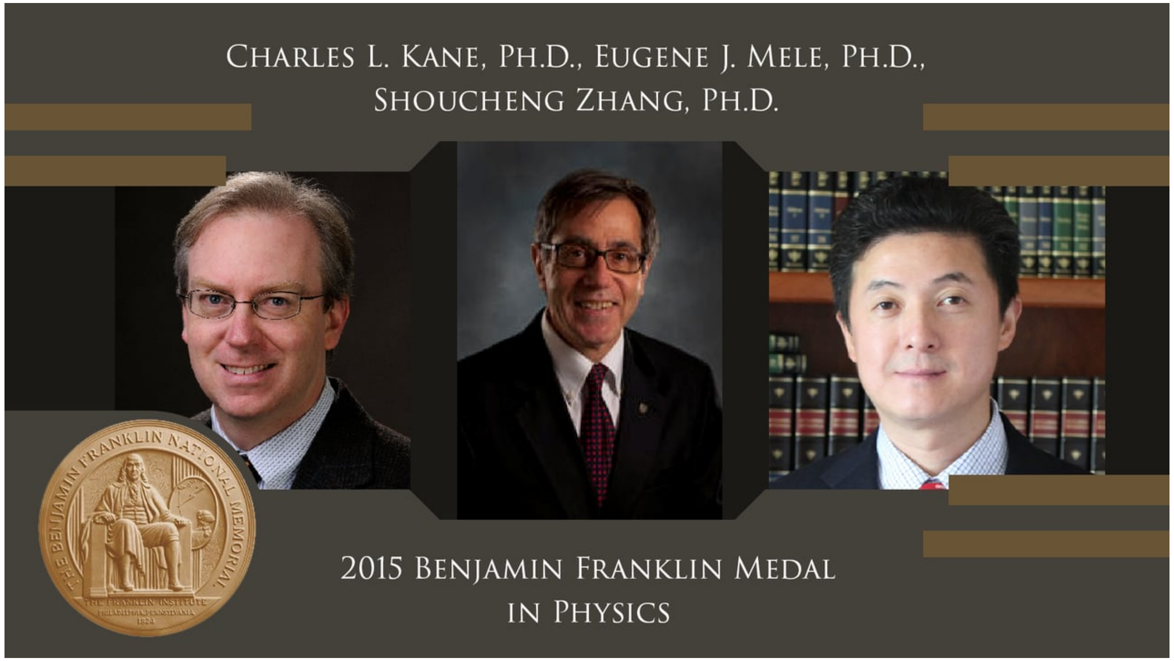
effet Hall de spin

Isolants avec symétrie par renversement du temps

modèles de

Kane & Mele

BHZ (2005/06)



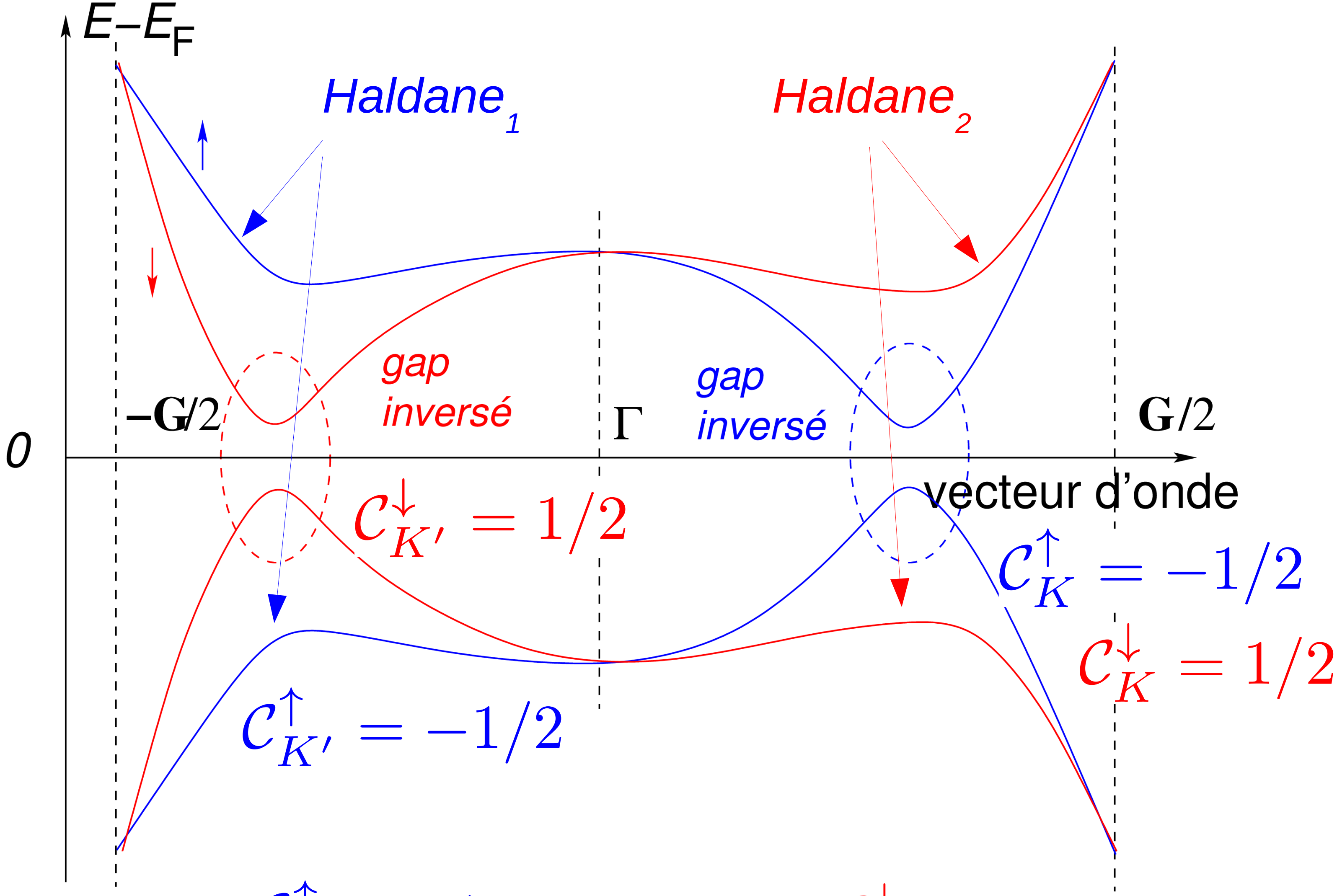
$$H_{4\times 4} = \begin{pmatrix} H_\uparrow(\mathbf{k}) & 0 \\ 0 & H_\downarrow(\mathbf{k}) \end{pmatrix}$$

un modèle de Haldane par spin

pas nécessairement spin $\uparrow$ ou $\downarrow$, mais indice Z_2 (paire de Kramers)

avec $H_\downarrow(\mathbf{k}) = H_\uparrow^*(-\mathbf{k})$

Modèle de Kane & Mele

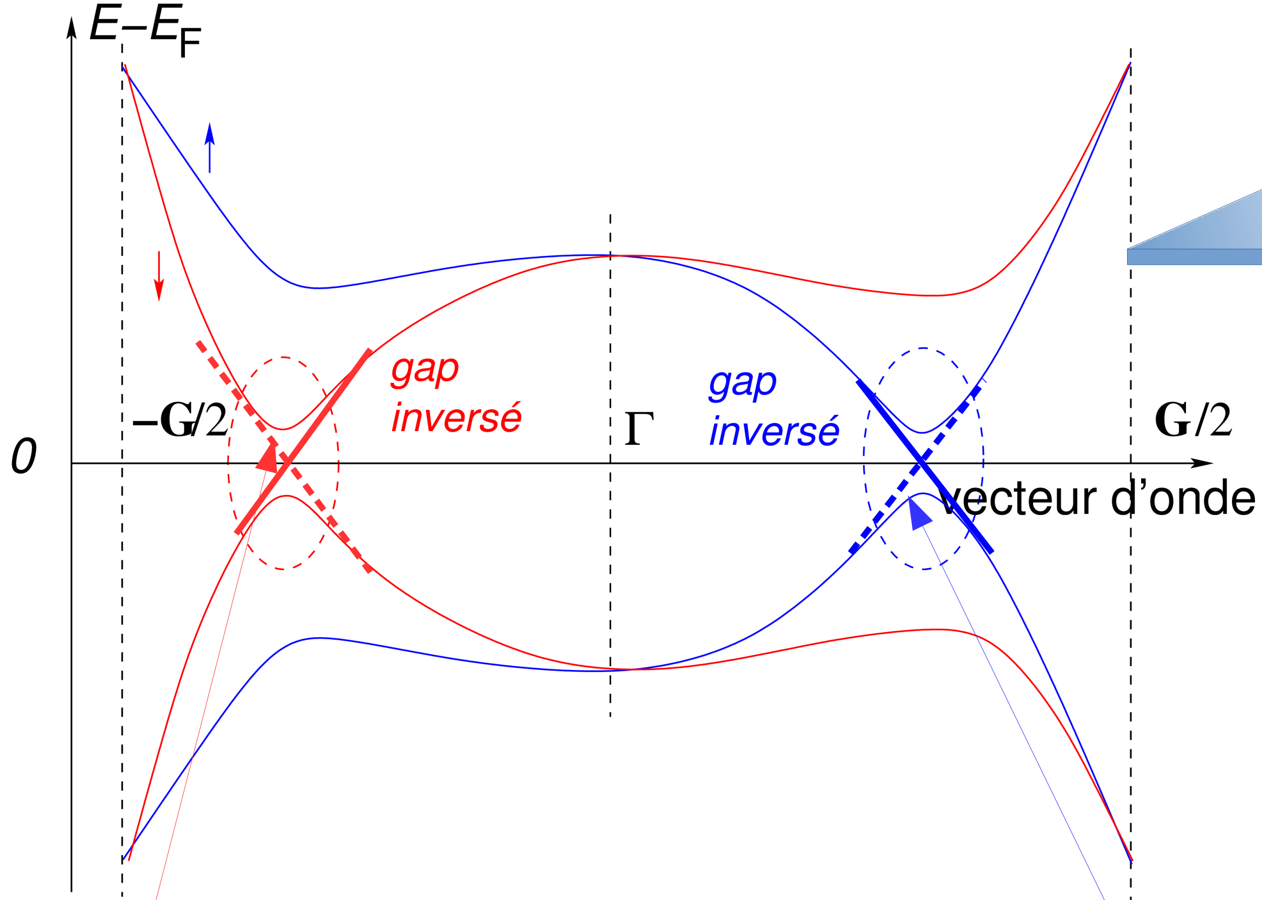


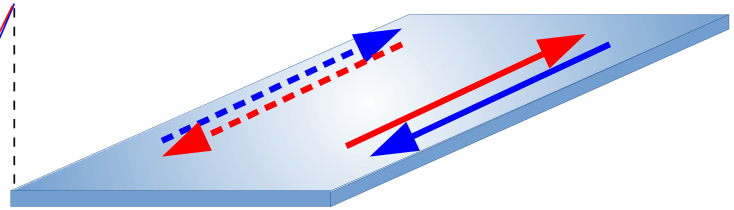
$\rightarrow \mathcal{C}^{\uparrow} = -1$ et $\rightarrow \mathcal{C}^{\downarrow} = +1$

nombre de Chern total : $\mathcal{C} = \mathcal{C}^{\uparrow} + \mathcal{C}^{\downarrow} = 0$ mais $\mathcal{C}_{\text{spin}} = \mathcal{C}^{\uparrow} - \mathcal{C}^{\downarrow} \neq 0$

Modèle de Kane & Mele + *bords*

1.7)





→ états de bord ***hélicaux*** (direction de propagation déterminée par le spin)

$$H^{\downarrow}_{\xi=+} = \begin{pmatrix} \hbar v q_y & \sqrt{2}\hbar\frac{v}{\ell_S}\hat{a} \\ \sqrt{2}\hbar\frac{v}{\ell_S}\hat{a}^\dagger & -\hbar v q_y \end{pmatrix} \qquad H^{\uparrow}_{\xi=-} = \begin{pmatrix} \hbar v q_y & -\sqrt{2}\hbar\frac{v}{\ell_S}\hat{a}^\dagger \\ -\sqrt{2}\hbar\frac{v}{\ell_S}\hat{a} & -\hbar v q_y \end{pmatrix}$$

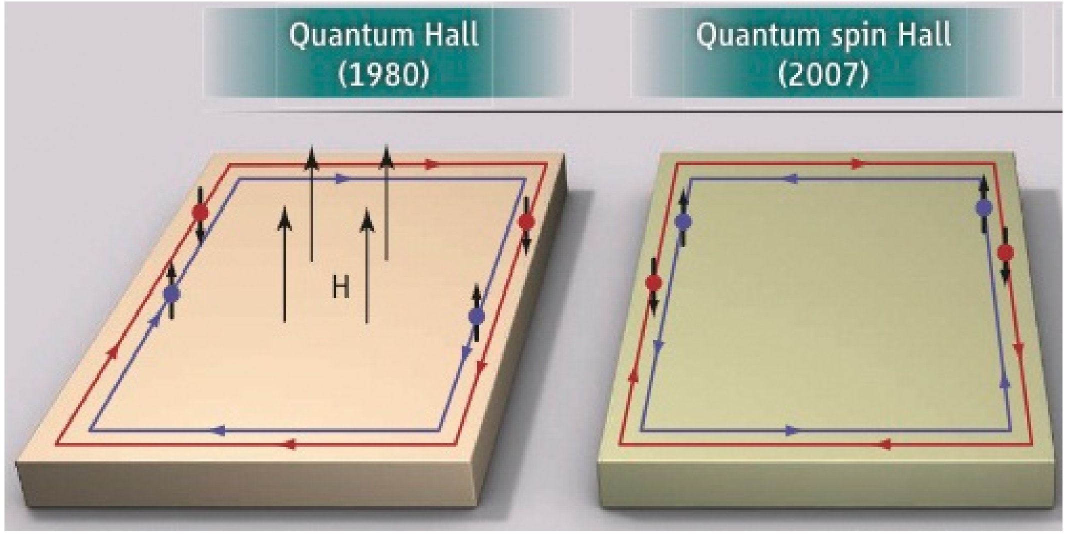
$E^{\downarrow}_{n=0,\xi=+}(q_y) = +\hbar v q_y \quad$ pour $\quad x = 0$

$E^{\downarrow}_{n=0,\xi=+}(q_y) = -\hbar v q_y \quad$ pour $\quad x = -L$

$E^{\uparrow}_{n=0,\xi=-}(q_y) = -\hbar v q_y \quad$ pour $\quad x = 0$

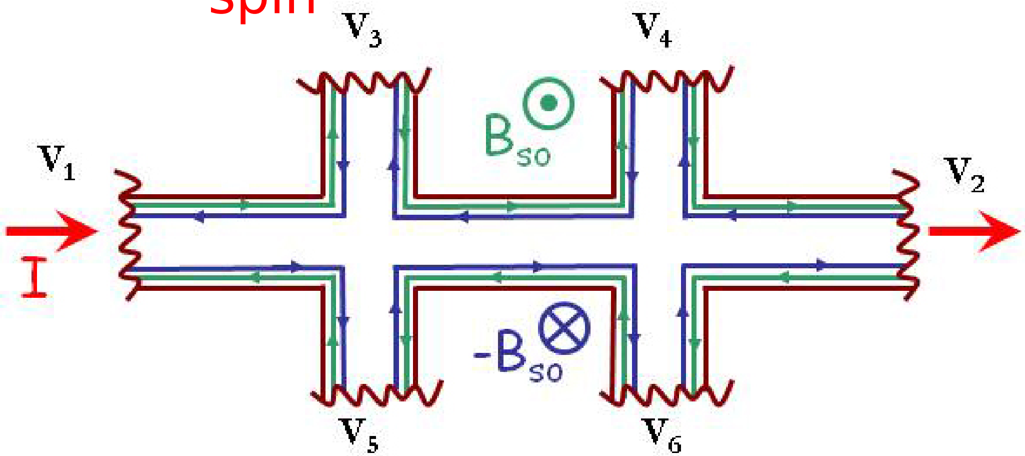
$E^{\uparrow}_{n=0,\xi=-}(q_y) = \hbar v q_y \quad$ pour $\quad x = -L$

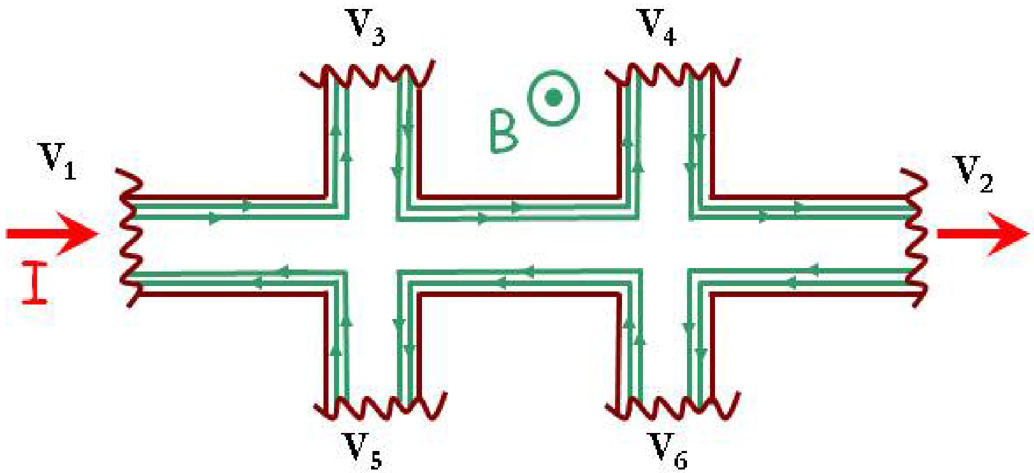
Effet Hall quantique de spin (2006/07)



Science,*766*, ***318*** (2007),
groupe exp. de Würzburg

Effet Hall quantique de spin



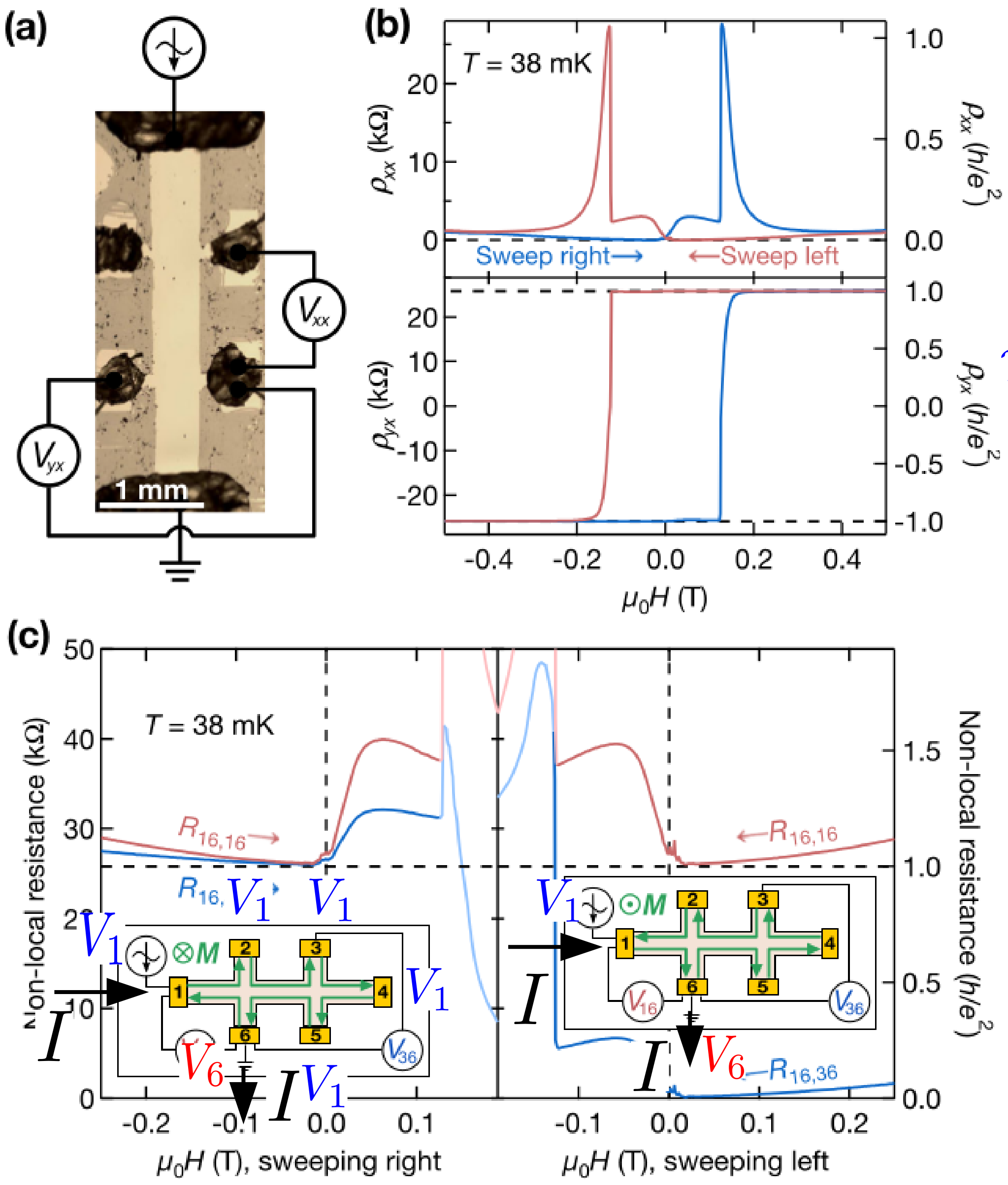


Effet Hall quantique

Les états de spin + ou – se déplacent
dans des directions opposées

Effet Hall quantique anomal (expérience)

2.1)



[Bostwick et al., Phys. Rev. Lett. (2015)]

matrices de transmission (sweep right) :

$$\mathcal{T}_+ = \mathcal{T}_{\mathrm{QH}} = \begin{pmatrix} M & 0 & 0 & 0 & 0 & -M \\ -M & M & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -M & M & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -M & M & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -M & M & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -M & M \end{pmatrix}$$

2.2)

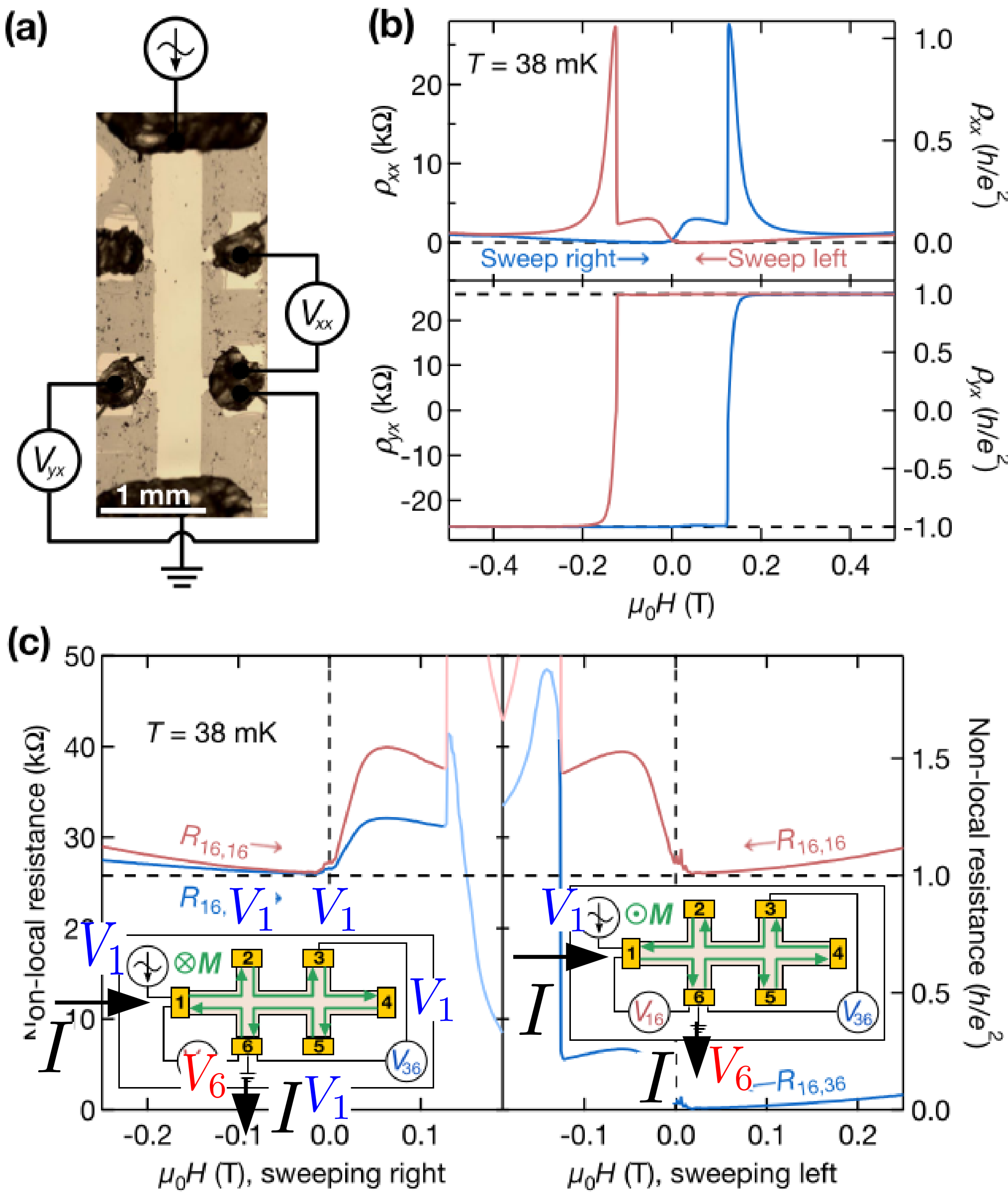
→ assigner les potentiels V_i

$$\vec{I} = \frac{e^2}{h}\mathcal{T}\vec{V}$$

ici : $M = 1$

Effet Hall quantique anomal (expérience)

2.1)



[Bostwick et al., Phys. Rev. Lett. (2015)]

matrices de transmission (sweep right) :

$$\mathcal{T}_+ = \mathcal{T}_{\mathrm{QH}} = \begin{pmatrix} M & 0 & 0 & 0 & 0 & -M \\ -M & M & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -M & M & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -M & M & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -M & M & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -M & M \end{pmatrix}$$

2.2)

→ première ligne de la matrice :

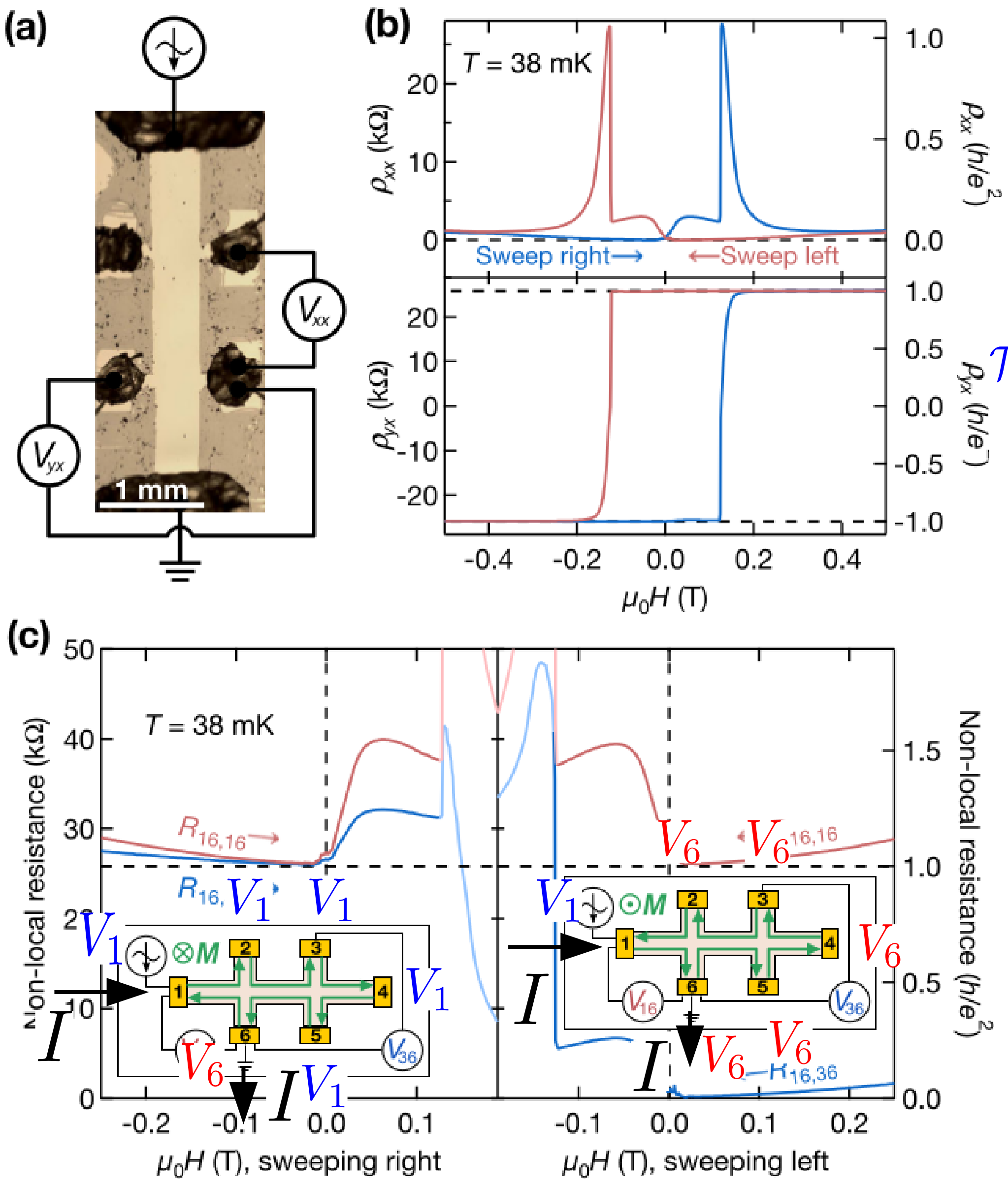
$$I = \frac{e^2}{h} M (V_1 - V_6)$$

$$R_{16,16} = \frac{V_1 - V_6}{I} = \frac{h}{e^2}$$

$$R_{16,36} = \frac{V_3 - V_6}{I} = \frac{h}{e^2}$$

Effet Hall quantique anomal (expérience)

2.1)



[Bostwick et al., Phys. Rev. Lett. (2015)]

matrices de transmission (sweep left) :

$$\mathcal{T}_- = \mathcal{T}_{\mathrm{QH}}^\dagger = \begin{pmatrix} M & -M & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & M & -M & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & M & -M & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & M & -M & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & M & -M \\ -M & 0 & 0 & 0 & 0 & M \end{pmatrix}$$

2.2)

→ première ligne de la matrice :

$$I = \frac{e^2}{h} M (V_1 - V_2)$$

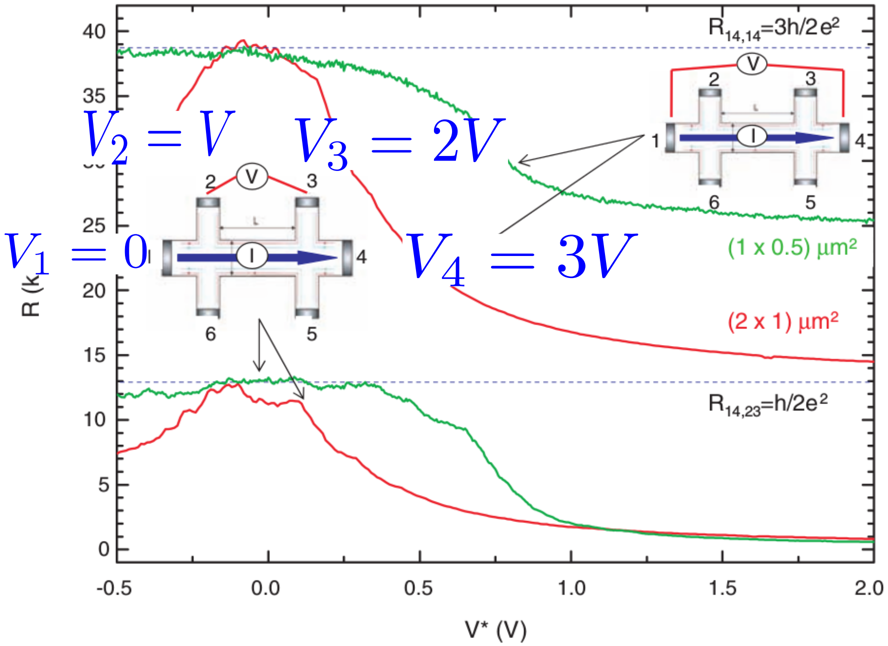
$$R_{16,16} = \frac{V_1 - V_6}{I} = \frac{h}{e^2}$$

$$R_{16,36} = \frac{V_3 - V_6}{I} = 0$$

Effet Hall quantique de spin (expérience)

2.3)

[Roth et al., Science (2009)]



matrice de transmission :

$$\mathcal{T} = \mathcal{T}_+ + \mathcal{T}_-$$

$$= \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 & 0 & 0 & -1 \\ -1 & 2 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 2 & -1 \\ -1 & 0 & 0 & 0 & -1 & 2 \end{pmatrix}$$

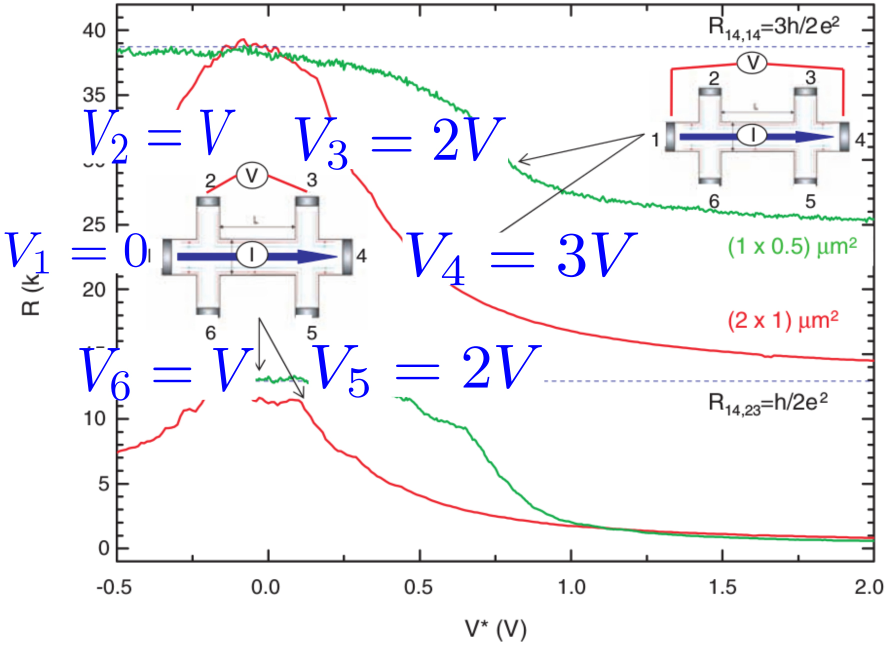
→ assigner les potentiels V_i (sans courant) :

$$V_2 = \frac{V_1 + V_3}{2} \qquad \text{et} \qquad V_3 = \frac{V_2 + V_4}{2}$$

Effet Hall quantique de spin (expérience)

2.3)

[Roth et al., Science (2009)]



matrice de transmission :

$$\mathcal{T} = \mathcal{T}_+ + \mathcal{T}_-$$

$$= \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 & 0 & 0 & -1 \\ -1 & 2 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 2 & -1 \\ -1 & 0 & 0 & 0 & -1 & 2 \end{pmatrix}$$

→ bilan dans le contact 1 :

$$I = \frac{e^2}{h}(2V_1 - V_2 - V_6) = -2\frac{e^2}{h}V \qquad \Rightarrow \qquad \frac{V}{I} = -\frac{h}{2e^2}$$

$$R_{14,14} = -\frac{3V}{I} = \frac{3}{2}\frac{h}{e^2} \qquad\qquad R_{14,23} = -\frac{V}{I} = \frac{1}{2}\frac{h}{e^2}$$