



HAL
open science

Aspects topologiques des dérivés du graphène

Raphaël de Gail

► **To cite this version:**

Raphaël de Gail. Aspects topologiques des dérivés du graphène. Autre [cond-mat.other]. Université Paris Sud - Paris XI, 2014. Français. NNT : 2014PA112046 . tel-00987051

HAL Id: tel-00987051

<https://theses.hal.science/tel-00987051v1>

Submitted on 5 May 2014

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

École Doctorale de Physique de la Région Parisienne
Laboratoire de Physique des Solides, CNRS UMR 8502



THÈSE DE DOCTORAT

présentée par : **Raphaël de GAIL**

soutenue le : **20/03/2014**

pour obtenir le grade de : **Docteur en Science de l'Université Paris Sud**

Discipline / Spécialité : **Physique**

Aspects topologiques des dérivés du graphène Topological Aspects of Graphene Derivatives

JURY

Dr. GOERBIG Mark-Oliver	DIRECTEUR DE THÈSE , <i>Laboratoire de Physique des Solides, Université Paris Sud</i>
Dr. CARPENTIER David	RAPPORTEUR , <i>Laboratoire de Physique, Ecole Normale Supérieure de Lyon</i>
Dr. CAYSSOL Jérôme	RAPPORTEUR , <i>Laboratoire Ondes et Matière d'Aquitaine, Université Bordeaux I</i>
Dr. SIMON Pascal	PRÉSIDENT DU JURY , <i>Laboratoire de Physique des Solides, Université Paris Sud</i>
Dr. DOUCOT Benoît	EXAMINATEUR , <i>Laboratoire de Physique Théorique et Hautes Energies, Université Pierre et Marie Curie</i>
Dr. MONTAMBAUX Gilles	MEMBRE INVITÉ , <i>Laboratoire de Physique des Solides, Université Paris Sud</i>

*"We may be on a staride to nowhere, but it may be the most beautiful journey."
Labi Siffre*

Résumé

Ces dernières années, la physique de la matière condensée a connu une profonde révolution de concepts par la découverte de nombreuses phases de la matière qui ne sont pas classifiables à la Landau, c'est à dire par leur groupe de symétrie. Si les premiers travaux remontent à ceux des effets Hall quantiques (entier et fractionnaire), ce n'est que récemment, avec l'avènement du graphène et des isolants topologiques que les physiciens ont réalisé que ces phases de la matière ne nécessitent, dans l'absolu, ni champ magnétique, ni basse température, par opposition aux effets Hall quantiques précédemment cités.

Ces nouveaux états de la matière sont caractérisés non pas par la géométrie du problème mais plutôt par la topologie. Ici donc, la forme précise du spectre électronique n'est pas importante, seules certaines caractéristiques, comme la présence ou l'absence d'un gap, le sont. De manière similaire à la classification de Landau des groupes de symétries, il est possible de classer ces nouveaux systèmes par l'intermédiaire de groupes topologiques. La branche mathématique invoquée est celle de la topologie algébrique. A travers les invariants qu'elle génère, il est possible de classer les états topologiquement non-triviaux. De plus, les transitions entre des états à topologies distinctes sont aussi accessibles par cette théorie.

Les travaux réalisés dans le cadre de cette thèse s'intéressent aux effets topologiques dans la structure de bandes de matériaux bi-dimensionnels. Après une présentation du formalisme mathématique général, un premier chapitre s'intéressera à la topologie locale, c'est à dire pour une portion restreinte de la première zone de Brillouin, des points de croisements de bandes, dits points *de Dirac*. Un effort sera porté vers la classification de ces systèmes et des transitions associées. Le chapitre suivant mettra en lumière un moyen efficace de mesurer les effets de la topologie des électrons en deux dimensions. Il s'agit de l'étude des niveaux de Landau qui résultent de l'application d'un champ magnétique

transverse au plan des électrons. Les points de Dirac se transmutent alors en niveaux à énergie nulle topologiquement stables, c'est à dire peu ou pas influencés par les diverses perturbations. L'étude des différents modèles justifiera la discrimination entre la physique à champ magnétique faible et celle à champ magnétique fort, faible ou fort étant très dépendant du système étudié. Enfin, dans un dernier chapitre plus prospectif on s'intéressera à la topologie globale, c'est à dire pour l'ensemble de la première zone de Brillouin. Ce type d'étude est surtout caractérisé par l'existence d'états de bords robustes. On en fera l'expérience d'une double manière. D'abord par l'étude un modèle à un électron, puis par celle d'un système en forte interaction de N électrons.

A travers les différents exemples étudiés, on s'attachera à démontrer la puissance de l'outil topologique pour les problèmes de la matière condensée, phénomène qui devrait s'accroître les prochaines années.

Abstract

During the last few decades, condensed matter physics has witnessed a deep refoundation of its paradigms, through the discovery of many systems that the usual symmetry classification *à la Landau* cannot handle properly. Although the first major breakthroughs were realized at the time of discovery of integer and fractional quantum Hall effects, only recently physicists have agreed that these peculiar phases of matter require neither a magnetic field nor low temperature.

Those new states of matter cannot be characterized by the geometric aspects of the model but rather by topological ones. The precise shape of the electronic spectrum is no longer relevant, but only particular features are, such as the presence or the absence of a gap. Similarly to the Landau classification scheme, one can achieve a construction through extensive use of topological groups. This is the realm of algebraic topology. Related generated topological invariants can hold a classification of non-trivial topological states, as well as of the accompanying transitions.

This thesis focusses on peculiar topological features of two-dimensional electronic band structures. After a technical introduction to the underlying formalism, the first chapter is devoted to local topology, that is for a restricted piece of the first Brillouin zone, of band crossing points, also known as Dirac points. Special care is taken to classify these points and related transitions. The next chapter sheds some light on a particularly efficient way of measuring topology for two-dimensional electrons. This is achieved through measurements of Landau levels that are generated by a magnetic field applied perpendicular to a plane. Dirac points then generate zero Landau levels that are topologically stable, i.e. almost not influenced by perturbations at all. Distinctions between low and high magnetic fields will prove to be relevant, although very system-dependant.

Through the several models studied, we particularly stress out the importance of the topological tool for condensed matter physics, past present... and future.

Remerciements

Comment ai-je pu en arriver là ?

Comment le petit garçon qui s'endormait le sourire aux lèvres, en rêvant qu'il démembrerait méthodiquement ses professeurs à la tronçonneuse, a-t-il pu basculer de l'autre côté et embrasser une carrière universitaire ? Si ce petit garçon s'épanouit aujourd'hui dans ce qu'il maudissait à l'époque, c'est parce qu'il a grandi. Mais cette évolution n'est pas le résultat d'une retraite solitaire, faite de méditations, elle est le fruit de nombreuses rencontres et d'interactions avec le monde extérieur autrefois si effrayant. Aujourd'hui, alors que ma thèse est sur le point de s'achever, je souhaite prendre le temps de me retrouver vers le passé et de remercier toutes les personnes qui m'ont aidé à grandir.

En premier lieu, et de manière évidente, je remercie ma famille de m'avoir accompagné tout au long de ce trajet. A "Pap'Mam", pour m'avoir toujours soutenu depuis le début, dans le meilleur comme dans le pire. A mes petits frères et soeurs, Tephén (et Aurélie !), Titou et Ninon, sans qui la vie serait bien morne. Les mots ne suffisent pas pour décrire l'amour que je leur porte, aussi je leur dirai simplement merci !

Une pensée à mes grand-parents : A ma grand-mère que j'aimerais voir plus souvent et à la mémoire de mon grand-père de mon papy et de ma mamie qui, j'espère, seraient fiers de ce que je suis devenu aujourd'hui !

Un mot pour ma famille outre-atlantique ! Merci à Marcia et Sidney pour leurs encouragements. J'espère vous revoir bientôt !

La vie est aussi faite de rencontres, dont certaines que je tiens à souligner. Au groupe du "Mac'Do", Samuel et Naoko, Bruno, Florence et les expatriés Oudom, Thomas et Lydia, Stéphane et Marie. En espérant vous revoir tous très bientôt, vous comptez beaucoup pour

moi !

Au docteur Nortier, ingrédient essentiel de ce que je suis devenu aujourd'hui. Merci de m'avoir accompagné depuis mes premiers pas d'étudiant et de m'avoir aidé à ne jamais renoncer à mes rêves, même lorsque tout semblait perdu.

Et bien sûr, il y a Mark ! Plus qu'un directeur de thèse, je le considère comme un grand frère. Je lui suis infiniment reconnaissant de m'avoir pris sous son aile et de m'avoir guidé, humainement et professionnellement, durant ces années de thèse.

Plus généralement, je tiens à remercier toute l'équipe théorique du LPS, avec qui j'ai eu le plaisir de discuter pendant de longues heures durant les pauses café. A Gilles, qui a modestement refusé d'apparaître comme co-directeur de thèse, même si je le considère comme tel. A Jean-Noël, avec qui il me tarde de collaborer et à Fred, pour son regard aiguisé sur la physique.

Je n'oublie pas les personnes qui m'ont mis le pied à l'étrier dans le monde de la matière condensée, notamment Alain Comtet, Claude Aslangul et Nicolas Regnault.

Je tiens aussi à remercier David Carpentier et Jérôme Cayssol pour avoir accepté d'être rapporteurs de ma thèse, Pascal Simon président du jury et Benoît Douçot examinateur.

Enfin, je tiens à remercier toutes les personnes que j'ai pu croiser pendant ces années de thèse. Si j'en suis là aujourd'hui, c'est aussi grâce à vous !

Merci de la part du petit garçon que j'étais !

Merci de la part de l'adulte que je suis désormais !

Merci à tous !

Table des matières

Introduction	19
1 Introduction à la topologie des bandes	29
1.1 Un premier exemple	29
1.2 Formalisme mathématique	31
1.2.1 Cas d'une bande non-dégénérée	33
1.2.2 Invariants topologiques	34
1.2.3 Cas de bandes dégénérées	35
1.3 Modèle à deux bandes	37
1.4 Applications au travail de thèse	38
2 Topologie locale des électrons de Dirac en deux dimensions	41
2.1 Propriétés des points de Dirac	42
2.1.1 Physique d'un fermion de Dirac	42
2.1.2 Points de Dirac	43
2.1.3 Physique de plusieurs points de Dirac	43
2.1.4 Stabilité des points de Dirac	44
2.2 La monocouche de graphène	45
2.2.1 Modèle effectif	48
2.2.2 Stabilité des points de Dirac – symétries	49

TABLE DES MATIÈRES

2.2.3	Fusion $(+1) + (-1) \rightarrow (0)$	50
2.3	Le cristal moléculaire de α -(BEDT-TTF) $_2$ I $_3$	54
2.4	La bicouche de graphène	57
2.4.1	Modèle effectif	57
2.5	La bicouche de graphène désaxée	60
2.5.1	Symétrie des bandes et phases de Berry	63
2.5.2	Modèle effectif – Fusion $(+1) + (+1) \rightarrow (+2)$	67
2.6	La bicouche de graphène avec correction trigonale	70
2.7	Conclusions	76
3	Topologie et magnétotransport	79
3.1	Un premier exemple : le graphène	79
3.1.1	Aspects expérimentaux	83
3.1.2	Description semi-classique	85
3.2	Le théorème de l'indice	87
3.2.1	Une introduction au théorème	88
3.2.2	Propriétés mathématiques de l'indice	89
3.2.3	Dégénérescence maximale et dégénérescence topologiquement protégée	91
3.3	Le graphène sous contrainte	92
3.3.1	Le théorème de l'indice	95
3.3.2	Une approche heuristique	96
3.4	La bicouche de graphène	98
3.4.1	Aspects expérimentaux	99
3.4.2	Approche semi-classique	99
3.5	La bicouche de graphène désaxée	101
3.5.1	Aspects expérimentaux	103

TABLE DES MATIÈRES

3.6	La bicouche avec correction trigonale	105
3.6.1	Spectre sans distortion $\delta = 0$	106
3.6.2	Spectre avec une faible déformation $0 \neq \delta \ll 1$	108
3.6.3	Fusion $\delta \ll -1$	110
3.6.4	Fusion triple $\delta \gg 1$	110
3.7	Espace réciproque sous champ magnétique et niveaux de Landau	112
3.7.1	L'espace réciproque non commutatif	113
3.7.2	La quantification par déformation	114
3.7.3	Applications à la physique des points de Dirac	116
3.7.4	Une approche perturbative	118
3.7.5	Le graphène sous contrainte	122
3.8	Conclusions	124
	Conclusion et perspectives	127
	Bibliographie	131

TABLE DES MATIÈRES

Table des figures

1	Illustration de la topologie locale	21
2	Illustration de la topologie globale	21
3	Illustrations de la topologie algébrique	22
1.1	Réseaux	30
1.2	La connexion de Berry	36
2.1	Exemples de points de Dirac	41
2.2	Enroulements relatifs de deux vortex	44
2.3	Le graphène	46
2.4	Enroulements relatifs des points de Dirac du graphène.	48
2.5	Fusion $(+1) + (-1) \rightarrow (0)$	53
2.6	Le cristal moléculaire de α -BEDT	55
2.7	La bicouche de graphène	58
2.8	La bicouche désaxée	61
2.9	Figures de Moiré de la bicouche de graphène désaxée	62
2.10	La bicouche désaxée, symétries des bandes	65
2.11	Modèle effectif, à deux bandes, de la bicouche de graphène désaxée.	68
2.12	La bicouche de graphène avec correction trigonale	72
2.13	Fusion $A - D$	73
2.14	Fusion triple $B - C - D$	74

TABLE DES FIGURES

2.15	Echelles d'énergie des différents exemples	76
3.1	Orbites cyclotron	80
3.2	Niveaux de Landau du graphène.	82
3.3	Mesure de l'effet Hall quantique entier dans le graphène	83
3.4	La vision semi-classique	86
3.5	Spectre des niveaux de Landau pour le hamiltonien effectif	93
3.6	Transition de Lifshitz	94
3.7	Illustration du brouillage magnétique	97
3.8	Niveaux de Landau de la bicouche de graphène	98
3.9	Effet Hall quantique entier pour la bicouche de graphène	100
3.10	Spectre des niveaux de Landau pour le hamiltonien effectif de la bicouche désaxée	102
3.11	Résultats de l'expérience d'effet Hall pour la bicouche de graphène désaxée .	104
3.12	Spectre des niveaux de Landau pour la bicouche de graphène avec correction trigonale et $\delta = 0$	107
3.13	Les différents secteurs du spectre de la bicouche de graphène avec correction trigonale	109
3.14	Spectre des niveaux de Landau de la bicouche de graphène avec correction trigonale	111
3.15	Brouillage magnétique pour deux points de Dirac	120

Introduction

‘ Les avancées en physique et en mathématiques vont souvent de pair’ [EGH80].

Comme exemple, nous citerons ici l’introduction du livre de Naber sur la topologie [Nab06]

‘ In Egypt, geometry was created to measure the land. Similar motivations, on a somewhat larger scale, led Gauss to the intrinsic differential geometry of surfaces in space. Newton created the [differential] calculus to study the motion of physical objects (apples, planets, etc.) and Poincaré was similarly impelled toward his deep and far-reaching topological view of dynamical systems.’

Dans cette thèse, on tentera d’illustrer cette dernière dualité en appliquant les règles de la topologie à la physique de l’électronique.

Plus généralement, on pourrait tenter de résumer cette relation entre les deux sciences par la célèbre formule de Galilée [Gal23],

‘ Le livre de la nature est écrit dans le langage mathématique.’

Les mathématiques apparaissent ainsi au physicien comme une sorte de grammaire, parfois aride mais parfois aussi aidant aux envolées lyriques que serait la physique.

Plus précisément, les mathématiques apportent à la physique une structure logique et quantifiable aux concepts de cette dernière. Les physiciens peuvent ainsi piocher dans la multitude des objets mathématiques pour théoriser la notion voulue. Ainsi, certaines découvertes mathématiques qui semblaient trop abstraites pour le champ de la physique, ont elles finalement trouvé une application dans un effet de la nature. Ce fut le cas de l’algèbre de matrices, introduites par Heisenberg pour décrire la mécanique quantique [Hei25]. Notons ici que si celles-ci font aujourd’hui partie intégrante de l’arsenal du physicien, elles

furent accueillies à l'époque avec beaucoup de scepticisme. Dans un autre domaine, on pourra citer le rapprochement effectué par Jean Perrin entre les *monstres de l'analyse*, à savoir les fonctions continues partout et dérivables nulle part, et la physique du mouvement Brownien [Per13].

A l'inverse la physique apporte aux mathématiques, une source intarissable de problèmes. Parmi la célèbre liste des problèmes de Hilbert [Hil02], le sixième faisait par exemple référence à l'axiomatisation de la physique. Une première approche de ce problème fut proposée par von Neumann [vN32], mathématiquement rigoureuse et faisant appel aux opérateurs d'un espace de Hilbert. Elle fût plus ou moins boudée par les physiciens qui lui préférèrent la vision de Dirac [Dir30]. Cette dernière s'appuyait néanmoins sur une *fonction delta* aux propriétés irreconciliables avec l'analyse classique. De cette manière, la physique initia un champ de recherche qui fut notamment étudié plus tard par Schwartz dans sa théorie des distributions [Sch50]. Dans une perspective plus récente, on notera que parmi les problèmes du millénaire, proposés par l'institut Clay [Ins00], deux font immédiatement référence à la physique, à savoir le problème du gap de masse dans les théories de Yang-Mills¹ et la résolution de l'équation de Navier-Stokes.

Histoire de la topologie en physique

Introduite par Poincaré dans *Analysis Situs* [Poi95], c'est à dire *l'étude du lieu*, la topologie est la science des déformations dites continues. On considère ainsi que deux objets sont topologiquement équivalents si on peut déformer progressivement l'un en l'autre, sans couper quoi que ce soit. La topologie s'intéresse ainsi à des aspects non locaux des objets en faisant abstraction des différences géométriques. Un exemple souvent évoqué est celui de la tasse à café, figure 1, qui peut, en raison de son anse, être continuellement déformée en un tore, mais pas une sphère. Notons qu'un gobelet sans anse est, lui, déformable en une sphère. La notion de *trou* est ainsi une caractéristique topologique, qui reste néanmoins locale. La topologie peut aussi traiter de la forme globale d'un objet. Par exemple, sur la figure 2(a), on peut observer un ruban qui représente l'épaississement d'un cercle. Ce ruban possède

¹Résumé en termes simples, les particules de ces théories voyagent à la vitesse de la lumière bien que leur masse soit non nulle.

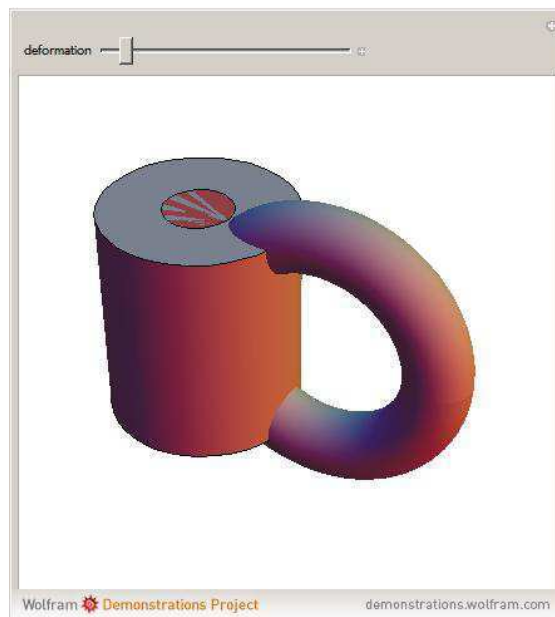


FIGURE 1 – Illustration de la topologie locale

Une version schématique d'une tasse à café est représentée, où on peut deviner que l'anse peut être déformée en un tore. Le reste de la tasse est topologiquement trivial, c'est à dire qu'en absence de l'anse, il pourrait être déformé en une sphère.

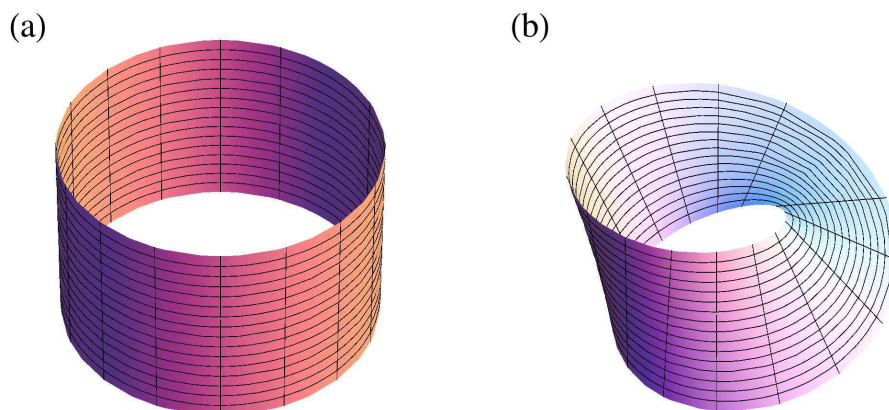


FIGURE 2 – Illustration de la topologie globale

En (a) est représenté un ruban classique, et donc orientable, qui présente une face interne et une externe. En (b), on observe un ruban dit de Möbius, exemple typique d'une variété non-orientable, c'est à dire où les deux faces du ruban sont mélangées. Il n'est pas possible de dire quelle face est à l'extérieur et laquelle est à l'intérieur.

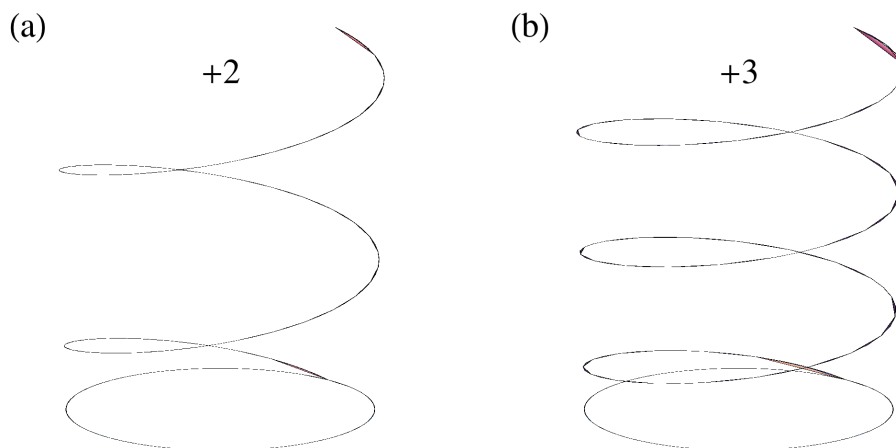


FIGURE 3 – Illustrations de la topologie algébrique

On a représenté deux exemples de chemins qui entourent une base circulaire. Pour plus de lisibilité, les chemins ont été développés suivant la verticale pour pouvoir observer les différents nombres d'enroulements. En (a) figure un chemin qui entoure le cercle deux fois. Le nombre d'enroulement associé est $+2$. En (b) figure un chemin qui entoure le cercle trois fois. Le nombre d'enroulement associé est $+3$.

deux faces, comme on peut s'en rendre compte en les coloriant de couleurs de différentes. La figure 2(b) illustre, elle, un ruban dit de Möbius qui est un autre épaissement du cercle, mais où les deux faces se rejoignent. Si localement il est toujours possible de différencier une face de l'autre, on peut se rendre compte de la différence avec le premier exemple, en remarquant que, globalement, il n'est pas possible de différencier une face de l'autre. On pourra s'en convaincre en essayant de colorier les deux faces du ruban de Möbius de deux couleurs différentes. Mathématiquement, la notion que nous illustrons ici est celle d'orientabilité, qui est une notion topologique. Notons enfin qu'il n'est pas possible pour un observateur d'avoir accès à cette caractéristique topologique en faisant une mesure locale, par exemple la courbure en un point, sans explorer toute la surface.

Une part important de la théorie topologique est celle appelée *topologie algébrique* [Hat01], qui code les informations topologiques par des nombres. On peut, par exemple, compter le nombre de tours effectués par un chemin sur un cercle, figure 3. On parle ici de nombre d'enroulements. Ces nombres portent le nom d'invariants topologiques, c'est

à dire qu'ils restent inchangés par une transformation continue de l'espace. En physique, ces invariants sont d'une grande importance car ils ne sont pas modifiés par toute une catégorie de perturbations, dites continues. Si, par exemple, la conductance électrique d'un système physique est déterminée par la topologie, elle reste invariante même quand on ajoute un désordre local, en perturbation. Ce phénomène est à l'origine d'une quantification extrêmement précise de la conductivité transverse dans l'effet Hall quantique entier et qui sera discuté dans le dernier chapitre de cette thèse. On verra par exemple que cette conductivité transverse est proportionnelle à l'invariant topologique appelé *premier nombre de Chern*.

On distinguera deux types d'invariants : ceux appelés locaux, et ceux globaux. L'aspect local permet, par exemple, de caractériser un défaut de l'espace comme un trou dans un plan, ou le cœur d'un vortex. L'aspect global, lui, traite des propriétés comme la forme de l'espace, ou l'orientabilité discutée plus tôt. Les deux aspects seront discutés dans cette thèse, avec une transition entre les deux par l'intermédiaire du champ magnétique comme nous invitons le lecteur à le découvrir dans le chapitre 3.

L'intérêt de la topologie pour la physique se fonde ainsi sur la notion d'observables invariantes de forme. Ces observables se révèlent être résistantes à toute une classe de perturbations, les déformations continues. C'est cette notion de stabilité qui justifie l'emploi de la topologie en physique. Suivant la formule de Thouless [Tho97], la physique topologique permet d'obtenir "des résultats reproductibles dans des échantillons non-reproductibles". Le premier exemple d'applications de la topologie en physique remonte à l'étude de la quantification de la charge électrique par Dirac [Dir31]. Suivirent le développement des théories de Yang-Mills [YM54] en parallèle avec les mathématiques des fibrés [Ste51]. Un des succès de cette approche est la description des *instantons*, particules localisées dans le temps et l'espace, comme un défaut topologique de l'espace-temps [BPST75], caractérisé par la quantité topologique appelée *deuxième nombre de Chern*.

Topologie et matière condensée

En matière condensée, l'application de la topologie s'est révélée cruciale car elle s'est accompagnée d'un changement de paradigme. Jusqu'alors, la physique des solides était principalement guidée par les théories des bandes, celle des transitions de phases par brisure de symétries [GL50] et enfin, des liquides de Fermi [Lan37]. La théorie des bandes permet de distinguer un matériau conducteur, comme les métaux de transition, d'un isolant, comme le diamant. Elle permet aussi d'appréhender la notion de semi-conducteur, dont les propriétés de conduction dépendent de la température, du dopage, etc. La théorie des liquides de Fermi permet, une fois la structure de bande établie, d'introduire les corrélations électroniques par une transition adiabatique entre le système à un électron et celui à N électrons en interaction. Cette théorie permet d'expliquer le succès des descriptions à un électron, à une renormalisation des paramètres près, telle que la masse effective. Enfin la théorie des transitions de phases permet de rendre compte des effets collectifs qu'on retrouve dans le magnétisme ou la supraconductivité.

La découverte de l'effet Hall quantique entier (EHQE) en 1981 et que nous avons déjà évoqué plus haut [KDP80], mis en évidence une nouvelle extension, topologique, de la théorie des bandes. L'EHQE se traduit essentiellement par un volume isolant, comme prédit par la structure de bandes, mais avec des bords conducteurs [GL11]. La conductivité transverse peut être reliée à un invariant topologique [TKNdN82], le *premier nombre de Chern*, qui sera discuté dans cette thèse, et est quantifiée en unité du quantum de conductance, $G_K = e^2/h$. On rappelle ici un aspect essentiel de la topologie sous-jacente : cette quantification étant topologiquement stable elle est peu affectée par des changements locaux du système, comme l'ajout d'impuretés dans l'échantillon qui agiraient normalement comme des diffuseurs et affecteraient ainsi les propriétés de transport du système.

Ceci résulte en une très grande précision de la mesure de $G_K = e^2/h$, à 10^{-9} près, de telle sorte que l'EHQE est aujourd'hui utilisé comme étalon pour la résistance $R_K = 1/G = h/e^2$. [NIS95].

L'effet Hall quantique fractionnaire (EHQF) [TSG82, Lau83] est, lui, un exemple typique de non liquide de Fermi, car l'interaction coulombienne domine face à l'énergie ciné-

tique. Il est caractérisé par une fractionalisation des électrons et des états de bords robustes. Par ailleurs, tous les états qui présentent un EHQF ne brisent aucune symétrie si bien que la théorie des transitions de phases à la Landau est inefficace. Afin de distinguer entre les différentes phases possibles, Wen a introduit la notion d'*ordre topologique* [WEN90].

On associait, jusqu'à récemment ces changements de paradigme à une partie reculée du diagramme de phases, à savoir celle des champs magnétiques forts, des basses températures et du faible désordre. Avec l'arrivée du graphène, il fut reconnu que ces dernières conditions n'étaient pas indispensables. Du point de vue de notre exposé, la particularité du graphène est que l'équation émergente à basse énergie, est du type Dirac et non Schrödinger avec masse effective. Or, on sait que l'équation de Dirac intègre naturellement le spin de l'électron [Wei05, Cay13]. Dans le cas du graphène, les électrons de basse énergie portent donc un pseudospin issu des bandes, le *pseudospin de bande*. C'est cette propriété qui rend le graphène topologiquement différent des matériaux usuels.

Plus récemment, la découverte d'isolants dont les bandes sont décrites par une équation de Dirac massive² a démontré que la présence d'un champ magnétique n'était pas essentielle pour générer une phase topologique. C'est ainsi que la physique des isolants topologiques [HK10, FC13, Cay13] s'est développée comme une sorte d'EHQE sans brisure de renversement du temps, c'est-à-dire sans champ magnétique. Comme pour l'EQHE, on observe un volume isolant mais avec des états de bords conducteurs et robustes. La physique est encore une fois dirigée par l'invariant topologique, premier nombre de Chern.

L'équivalent de l'EHQF, bien qu'encore hypothétique, correspond aux isolants de Chern fractionnaires [PRS13]. Il s'agit d'isolants à bande plate, de nombre de Chern non nul, soumis à l'interaction coulombienne qui devient pertinente pour un remplissage partiel de la bande. Là encore, le champ magnétique n'est pas nécessaire.

Ce qui rend si intéressant l'étude de ces matériaux "topologiques", est l'existence de phases de la matière, à la fois exotiques et robustes aux perturbations. Ces caractères exotiques et robustes peuvent aussi se révéler dans différentes expériences. Dans cette thèse, nous allons illustrer ces caractères par l'étude du graphène, notamment de ses dérivés,

²A ne pas confondre avec la masse effective de l'équation de Schrödinger

comme la monocouche sous contrainte et la bicouche avec un défaut d'empilement, et les expériences de transport sous champ magnétique.

Objet de cette thèse

La présente thèse vise à illustrer les aspects topologiques qui émergent de la physique des électrons de Dirac en matière condensée. Seuls quelques exemples sont discutés et en aucun cas on ne pourra considérer ce travail comme une présentation générale à la problématique. On s'intéressera notamment à la bicouche de graphène sous différentes déformations, aujourd'hui expérimentalement accessibles. L'intérêt de la bicouche est qu'elle porte plusieurs branches de basse énergie, toutes étant décrites par une équation de Dirac, et qu'il est possible de manipuler ces branches en modifiant le couplage entre les couches de graphène.

L'organisation de ce manuscrit est la suivante.

Le premier chapitre est une introduction générale à la topologie appliquée à la théorie des bandes. L'émergence des électrons de Dirac sera discutée dans diverses situations, mais toujours en deux dimensions d'espace. On discutera notamment de la physique des points de Dirac, dans un modèle générique à deux bandes.

Le chapitre suivant traitera de modèles, physiquement pertinents, où les bandes considérées possèdent des points de Dirac. Il s'agira essentiellement de discuter le cas du graphène et de la bicouche de graphène, sous diverses contraintes.

Le dernier chapitre présentera une manière de sonder la topologie des points de Dirac grâce au magnéto-transport. L'existence de niveaux de Landau à énergie nulle est, en effet, étroitement liée à la présence de points de Dirac dans la structure de bande. On introduira ici un formalisme particulièrement adapté à cette physique, à savoir la quantification par déformation.

Cette thèse a été rédigée dans un souci de complétude, afin que le lecteur ne soit pas obligé de se référer à la bibliographie pour les points essentiels discutés. Cette position incite alors à développer des sujets qui ne font pas partie intégrante du travail de thèse,

mais qui sont nécessaires à la compréhension du problème.

Afin de mettre en lumière les parties issues du travail de thèse, on présente les articles publiés.

L'article [dGGG⁺11] traite de la bicouche de graphène désaxée (*twisted*), sans et avec champ magnétique. Ce travail a inspiré des études de magnéto-transport effectués à l'institut Max Planck, Stuttgart [LRB⁺11] et au MIT à Boston [SYTW⁺12]. De manière générale, toutes les parties qui traitent de la bicouche désaxée sont issues du travail de thèse.

L'article [dGGM12] traite de la bicouche avec correction trigonale (*trigonal warping*), encore une fois sans et avec champ magnétique. Comme pour le premier article, toutes les parties qui traitent de la bicouche avec correction trigonale sont issues du travail de thèse.

De plus, dans un acte de colloque [dFG⁺12], nous avons proposé un modèle simplifié pour décrire plusieurs points de Dirac, dont les propriétés topologiques sont analysées dans le troisième chapitre de cette thèse.

L'approche des niveaux de Landau suivant la quantification par déformation, même si elle n'a pas encore mené à une publication, a néanmoins été développée lors de cette thèse.

INTRODUCTION

Chapitre 1

Introduction à la topologie des bandes

Dans ce chapitre préliminaire, on introduit le formalisme nécessaire à l'exposition des résultats de cette thèse, présentés dans les chapitres suivants. L'ensemble de ce travail repose, en effet, sur un principe commun dont une manifestation est la phase de Berry. On propose donc ici une relecture de la physique associée à cette quantité. Notre objectif étant purement utilitaire, on se permettra de ne pas suivre la présentation historique du problème [Ber84], à savoir l'évolution adiabatique d'un système en fonction d'un paramètre donné. Nous considérerons ainsi plutôt l'évolution de la phase de la fonction d'onde électronique d'une bande donnée, pour une orbite fermée décrite dans l'espace réciproque.

On s'attachera ici à démontrer que, lors de la projection d'un système sur une seule bande d'énergie, il peut rester des reliques de la physique des autres bandes, ce couplage entre bandes se manifestant par la phase de Berry.

1.1 Un premier exemple

Commençons par un exemple tiré de l'électronique, thème essentiel de cette thèse. On imagine un cristal fait d'atomes, organisé suivant un réseau carré pour fixer les idées, voir Fig. 1.1(a). Dans l'approximation des liaisons fortes [AM02], le mouvement des électrons est décrit par des sauts de sites en sites. Le réseau carré étant un réseau de Bravais [AM02], tous les sites sont géométriquement équivalents et il est donc impossible à l'électron de

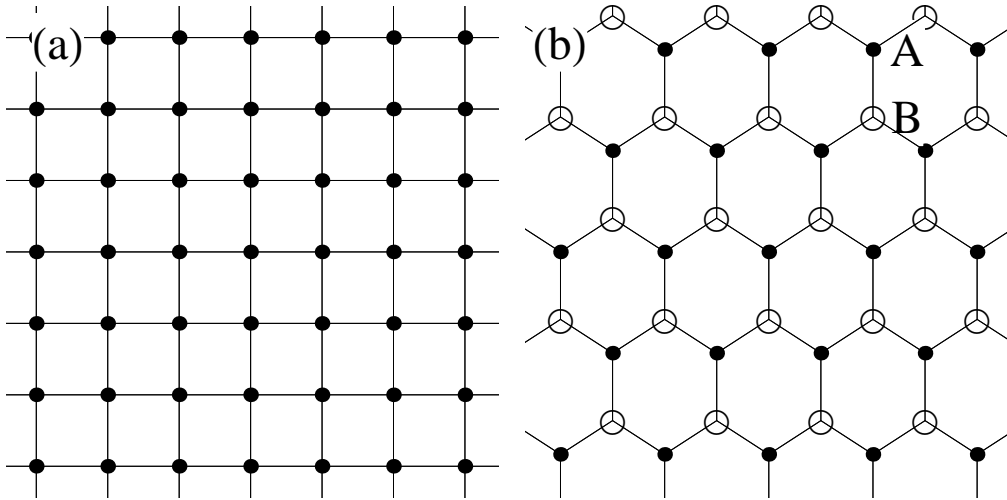


FIGURE 1.1 – Réseaux

(a) Le réseau carré est un réseau de Bravais ; tous les sites sont géométriquement équivalents et donc tous représentés par des points de même symbole (cercle plein). (b) Le réseau hexagonal (ou *en nid d'abeilles*) possède deux atomes par maille élémentaire. Ces deux atomes sont géométriquement distincts et donc représentés par deux symboles différents (ici, cercle plein et vide, ou *A* et *B*).

distinguer un site d'un autre. Une conséquence de cette symétrie discrète est la possibilité de développer la fonction d'onde des électrons en fonctions de Bloch, dépendantes d'une impulsion de réseau, restreinte à la première zone de Brillouin. Cette impulsion, comme la vraie impulsion d'une particule libre, étant un bon nombre quantique, le spectre d'énergie consiste en des bandes (de Bloch) qui sont fonctions de cette impulsion.

Que se passe-t-il si le réseau en question n'est plus un réseau de Bravais ? Nous considérons ici l'exemple du réseau *en nid d'abeilles*, qui possède deux atomes par maille élémentaire, cf. Fig. 1.1(b). C'est le réseau choisi par les atomes de carbone dans le graphène. L'électron peut alors effectuer une ségrégation entre les deux types d'atomes. Il peut, par exemple, choisir de moduler son amplitude de probabilité entre ces deux sites. Dans un cas extrême, il peut même choisir de ne résider que sur un type d'atomes. Comme dans le réseau carré, il est néanmoins possible de décrire la fonction d'onde des électrons à l'aide de fonctions de Bloch définies sur le réseau de Bravais sous-jacent (par exemple un des sous-réseaux triangulaire, *A* ou *B*). On sera désormais confronté à une structure énergétique avec autant de bandes que de sites (ou plus généralement d'orbitales) à l'intérieur de

la maille élémentaire, dont dans ce cas, deux bandes.

Que devient le mouvement électronique dans ce cas ? On peut comparer le sous-espace formé par les deux atomes de la maille élémentaire à celui d'un spin $1/2$, avec les états $|\text{spin haut}\rangle$ et $|\text{spin bas}\rangle$ correspondant aux sites $|A\rangle$ et $|B\rangle$ de la figure 1.1(b). On parlera ici de spin/spineur de bande. A mesure que l'électron se déplace sur le réseau, son spineur peut ainsi effectuer des rotations dans ce sous-espace de liberté.

Se concentrer sur une bande particulière revient alors à considérer un certain type de rotation pour les électrons qui se déplacent non seulement sur le réseau mais aussi dans l'espace réciproque des impulsions ou vecteurs d'onde de la première zone de Brillouin. Le mouvement des électrons est accompagné d'un vecteur de jauge, la connexion de Berry, qui dirige la rotation du spin de bande, dans l'espace réciproque, de la même manière que le potentiel vecteur de l'électromagnétisme dirige le mouvement d'un électron, dans l'espace réel.

Puisque les spins de bande décrivent des chemins, relatifs à leur rotation, il est naturel de classer ces différents mouvements par la théorie mathématique de la *topologie*. Dans l'espace réciproque, le mouvement des électrons sera donc caractérisé par un invariant topologique local, issu de la *courbure de Berry*, et global, le *premier nombre de Chern*, qui est l'intégrale de la courbure sur toute la première zone de Brillouin. La topologie du système considéré peut, en effet, se révéler à travers la courbure de Berry, bien que cette dernière soit un objet plutôt géométrique. De même que la courbure de Berry peut être vue comme une sorte de champ magnétique dans l'espace réciproque, le premier nombre de Chern serait son flux à travers tout l'espace réciproque, cf. table (1.1).

1.2 Formalisme mathématique

On présente maintenant le formalisme sous-jacent à l'exemple précédent.

Notre point de départ sera encore un modèle de liaisons fortes, caractérisé par le hamiltonien

$$H = \sum_{(i,j):(a,b)} t_{ij}^{ab} c_{i,a}^\dagger c_{j,b}, \quad (1.1)$$

où les indices i et j désignent les sites du réseau de Bravais et (a, b) sont des indices des M

sous-réseaux (sites ou orbitales de la maille élémentaire). Les amplitudes t_{ij}^{ab} sont fournies par les intégrales de sauts relatives entre les sites. Enfin, les $c_{i,a}^\dagger$ et $c_{i,a}$ sont les opérateurs de création et d'annihilation électronique au site considéré.

Dans toute la suite de cette thèse, on travaillera dans l'espace réciproque, on applique donc une transformation de Fourier à l'équation (1.1). Le théorème de Bloch [AM02] nous indique que l'amplitude t_{ij} ne dépend que de la distance relative entre les deux sites i et j (ce qui résulte de l'invariance par translation discrète). On obtient alors une nouvelle forme pour le hamiltonien

$$H = \sum_{\mathbf{k};(a,b)} c_{\mathbf{k},a}^\dagger h_{ab}(\mathbf{k}) c_{\mathbf{k},b}, \quad (1.2)$$

où $c_{\mathbf{k},a}$ est la transformée de Fourier de $c_{i,a}$. Le hamiltonien de bande $h_{ab}(\mathbf{k})$, qui est une matrice $M \times M$, permet de définir les bandes de Bloch par la relation

$$\sum_b h_{ab}(\mathbf{k}) u_b^\alpha(\mathbf{k}) = E_\alpha(\mathbf{k}) u_a^\alpha(\mathbf{k}), \quad (1.3)$$

où les spineurs à M composantes $u^\alpha(\mathbf{k})$ sont les états propres de la bande de Bloch α , d'énergie $E_\alpha(\mathbf{k})$.

On démontre maintenant comment la projection de la dynamique sur une seule de ces bandes fait naturellement émerger une connexion, c'est à dire l'équivalent d'un potentiel vecteur en électrodynamique. On suit pour cela, le formalisme de [Fed96, EGH80]. A chaque vecteur d'onde \mathbf{k} de la première zone de Brillouin, on associe le (ou les) vecteur(s) propre(s) $u^\alpha(\mathbf{k})$, d'énergie $E_\alpha(\mathbf{k})$. En mathématiques cette construction porte le nom de fibré vectoriel. Afin de pouvoir comparer deux vecteurs propres issus de deux vecteurs d'onde différents, il est nécessaire de savoir comment évolue lesdits vecteurs quand on déplace son point de référence. Ce *transport parallèle* peut être implémenté au niveau local par l'existence d'une connexion ∂ , qui généralise la notion de différentielle. On pourrait envisager de choisir comme connexion pour notre fibré vectoriel la simple différentielle de $u^\alpha(\mathbf{k})$

$$\partial(u^\alpha(\mathbf{k})) \stackrel{?}{=} d(u^\alpha(\mathbf{k})). \quad (1.4)$$

Néanmoins, si on veut se restreindre à l'étude d'une seule bande, il est nécessaire de projeter

le résultat sur la bande considérée,

$$\partial u^\alpha(\mathbf{k}) = P^\alpha(\mathbf{k}) du^\alpha(\mathbf{k}), \quad (1.5)$$

$$\partial u_a^\alpha(\mathbf{k}) = \sum_b P_{ab}^\alpha du_b^\alpha(\mathbf{k}),$$

où $P^\alpha(\mathbf{k})$ est le projecteur sur la bande α , avec

$$h(\mathbf{k})P^\alpha(\mathbf{k}) = E_\alpha P^\alpha(\mathbf{k}) \quad (1.6a)$$

$$P^\alpha(\mathbf{k})P^\alpha(\mathbf{k}) = P^\alpha(\mathbf{k}). \quad (1.6b)$$

L'équation (1.6a) correspond à l'équation aux valeurs propres, alors que (1.6b) est l'équivalent de la normalisation des vecteurs propres.

Associée à cette connexion ∂ , on peut définir une courbure

$$\partial \partial u^\alpha(\mathbf{k}) = \Omega^\alpha(\mathbf{k}) u^\alpha(\mathbf{k}). \quad (1.7)$$

Si on utilise la formule (1.5), on obtient

$$\begin{aligned} \partial \partial u^\alpha(\mathbf{k}) &= \partial [P^\alpha(\mathbf{k}) du^\alpha(\mathbf{k})] \\ &= P^\alpha(\mathbf{k}) d[P^\alpha(\mathbf{k}) du^\alpha(\mathbf{k})] = P^\alpha(\mathbf{k}) dP^\alpha(\mathbf{k}) \wedge du^\alpha(\mathbf{k}) \\ &= P^\alpha(\mathbf{k}) dP^\alpha(\mathbf{k}) \wedge d[P^\alpha(\mathbf{k}) u^\alpha(\mathbf{k})] = [P^\alpha(\mathbf{k}) dP^\alpha(\mathbf{k}) \wedge dP^\alpha(\mathbf{k})] u^\alpha(\mathbf{k}), \end{aligned} \quad (1.8)$$

où dans la dernière ligne on a utilisé $PdPP = 0$, qui se déduit de $PP = P$, ainsi que $Pu = u$. Le symbole \wedge est celui du vectoriel en deux dimensions.

Outre sa forme compacte, la formule

$$\Omega = PdP \wedge dP \quad (1.9)$$

présente aussi l'intérêt de ne pas être affectée par les possibles multi-valuations des états propres. En effet, les phases variables des vecteurs propres ne se retrouvent pas dans le projecteur associé.

1.2.1 Cas d'une bande non-dégénérée

On suppose ici que la bande α est non-dégénérée, c'est à dire caractérisée par un seul vecteur propre, de sorte que le projecteur peut s'écrire

$$P_{ab}^\alpha(\mathbf{k}) = u_a^\alpha(\mathbf{k}) u_b^\alpha(\mathbf{k})^\dagger. \quad (\text{matrice } M \times M) \quad (1.10)$$

On peut définir les 1-formes de connexion locale, Γ par

$$\partial u^\alpha = \Gamma u^\alpha, \quad (1.11)$$

ce qui implique par l'équation (1.5)

$$\Gamma = \left(u^\alpha(\mathbf{k})^\dagger, du^\alpha(\mathbf{k}) \right), \quad (1.12)$$

$$\Leftrightarrow \Gamma = \sum_a u_a^{\alpha*}(\mathbf{k}) \partial_\mu u_a^\alpha(\mathbf{k}). \quad (1.13)$$

L'équation (1.12) qui définit la connexion sur la bande α n'est rien d'autre que la connexion de Berry Γ , cf. [Ber84, XCN10]. Ici, le produit scalaire est représenté par les parenthèses (\cdot, \cdot) .

On voit donc comment la physique de la phase de Berry apparaît naturellement dans le contexte de la projection d'un système multi-bandes à une seule bande. Cette projection n'est rien d'autre que l'équivalent de l'approximation adiabatique dans la formulation historique de la phase de Berry. En effet, si on se place dans le cadre de cette approximation, alors il est possible de projeter le système sur l'état propre considéré, à chaque instant.

On peut aussi évaluer la courbure associée

$$\begin{aligned} \Omega u &= (PdP \wedge dP) u \\ &= (u^\dagger, du) u \wedge (u^\dagger, du) + (du^\dagger, u) \wedge (u^\dagger, du) u \\ &\quad + (du^\dagger \wedge du) u + (du^\dagger, u) \wedge (du^\dagger, u) u \\ &= \left(du^\dagger \wedge du \right) u. \end{aligned} \quad (1.14)$$

On retrouve alors le résultat général

$$\begin{aligned} \Omega &= \left(du^\dagger \wedge du \right), \quad (1.15) \\ \Omega(\mathbf{k}) &= \epsilon^{z\mu\nu} \sum_a \partial_\mu u_a^{\alpha*}(\mathbf{k}) \partial_\nu u_a^\alpha(\mathbf{k}), \end{aligned}$$

cf. [FPGM10, XCN10, FC13], où nous avons utilisé une formulation explicite en composantes dans la dernière ligne (toujours pour une dimension 2).

1.2.2 Invariants topologiques

Une fois la courbure de Berry construite, il est possible d'y associer des invariants qui ne dépendent que de la forme du fibré vectoriel, et pas de la connexion ou de la courbure.

La méthode de classification repose sur les classes de Chern, cf. [Fed96, EGH80].

Dans notre cas, la *première classe de Chern* est la courbure Ω elle-même et donc une quantité locale. Les propriétés topologiques de cette courbure ne dépendent que de la forme du fibré qui les arbite. Ainsi, si l'on avait choisi une connexion, et une courbure, autre que celle de Berry pour décrire le fibré des bandes de Bloch, la topologie de la première classe de Chern aurait été équivalente [FC13]. L'intégrale de cette classe sur toute la première zone de Brillouin fournit le *premier nombre de Chern* qui est donc un invariant topologique global. Première classe de Chern et premier nombre de Chern sont des objets algébriques qui décrivent la topologie du système (on parle de *topologie algébrique*).

Raisonnons sur un exemple. On peut représenter le pseudo-spin comme un champ vectoriel qui habille l'espace réciproque. Sur la figure 1.2, on a représenté une texture possédant un vortex. Ce défaut topologique est caractérisé par le nombre d'enroulement W de Γ autour du cœur, c'est à dire la vorticité. Le nombre ainsi obtenu est algébrique dans le sens où si on tourne autour de deux vortex, W_1 et W_2 , on obtient un nombre d'enroulement $W_1 + W_2$. Dans la section suivante, on verra sous quelles conditions on peut générer de tels vortex.

Enfin, on fera la remarque que les multiples écritures possibles des états propres d'un système à plusieurs atomes par mailles [BM09], si elles affectent la connexion et la courbure, ne modifient pas la topologie du fibré, c'est à dire ne peuvent créer ou supprimer les vortex mentionnés ci-dessus. Sur les figures 1.2(b) et (c), on a illustré cette remarque, en comparant deux textures qui sont reliées par un tel changement de base, et qui montrent la même vorticité.

1.2.3 Cas de bandes dégénérées

Si on autorise maintenant les bandes électroniques à se croiser en certains points, la courbure de Berry associée devient singulière en ces points. Une manière de traiter ces singularités est de régulariser le spectre en ajoutant un terme dit "de masse" qui lève la dégénérescence des bandes. On peut ensuite faire tendre ce terme de masse vers 0, à la fin du calcul. A noter que ce procédé n'est physiquement pertinent que si le résultat est indépendant de la régularisation choisie.

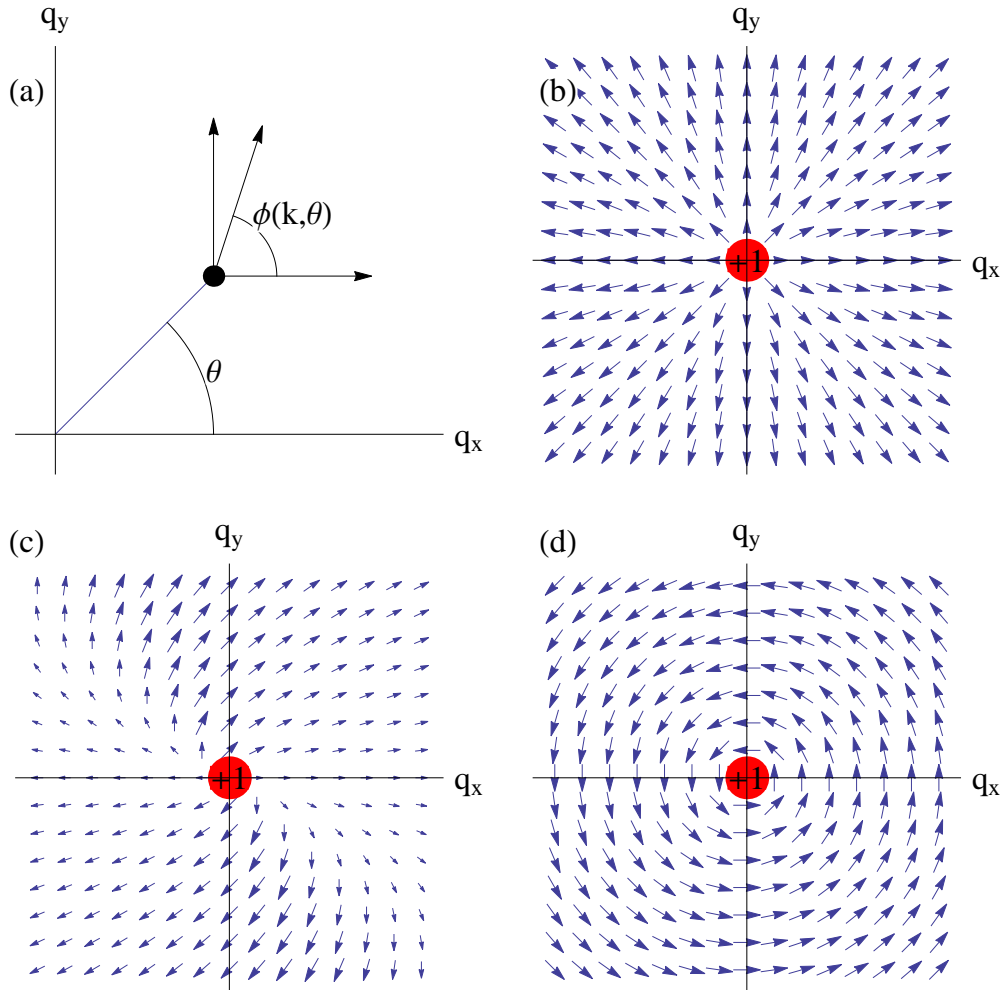


FIGURE 1.2 – La connexion de Berry

En (a), on a représenté $\phi = \text{Arg}(A(\mathbf{k}))$, pour un point de l'espace réciproque $\theta = \text{Arg}(\mathbf{k})$.

En (b), on peut observer un exemple de texture qui présente un vortex dont le cœur est représenté en rouge. Le nombre d'enroulement, c'est à dire la vorticit , est de +1. En (c), on pr sente une texture diff rente, c'est   dire une autre jauge, mais qui poss de la m me topologie, i.e. la m me vorticit . Enfin en (d), on a repr sent  la connexion de Berry correspondante au champ de phase (b). On observe bien l'enroulement de la connexion autour du c ur du vortex.

Une autre mani re de traiter le probl me est de raisonner en termes de "champ magn tique dans l'espace r ciproque", les singularit s repr santant alors des monop les magn tiques, comme ceux introduits par Dirac [EGH80]. Ces singularit s sont topologiquement non-triviales car elles n cessitent l'introduction d'une coupure dans l'espace, les cordes de Dirac.

1.3 Modèle à deux bandes

L'exemple le plus simple d'un système multi-bandes est celui d'un système à deux états. On peut alors calculer simplement la connexion de Berry.

Soit $h(\mathbf{k})$ le hamiltonien à deux bandes le plus général possible. Celui-ci se décompose sur les matrices de Pauli (σ_i).

$$h(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} f_0(\mathbf{k}) + f_z(\mathbf{k}) & f_x(\mathbf{k}) - if_y(\mathbf{k}) \\ f_x(\mathbf{k}) + if_y(\mathbf{k}) & f_0(\mathbf{k}) - f_z(\mathbf{k}) \end{pmatrix} = f_0(\mathbf{k})\mathbb{1} + \vec{f}(\mathbf{k}) \cdot \vec{\sigma}. \quad (1.16)$$

La partie proportionnelle à $\mathbb{1}$ est topologiquement triviale car elle n'affecte pas les vecteurs propres du système. Pour cette raison, on ne considérera plus le terme f_0 dans la suite du problème, tout en se souvenant que les bandes d'énergies sont décalées par $f_0(\mathbf{k})$. Dans l'équation (1.16), $\vec{\sigma} = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ est un vecteur regroupant les trois matrices de Pauli

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (1.17)$$

Les énergies propres de $h(\mathbf{k})$ sont, pour $f_0(\mathbf{k}) = 0$,

$$E^\pm(\mathbf{k}) = \pm \sqrt{f_x^2(\mathbf{k}) + f_y^2(\mathbf{k}) + f_z^2(\mathbf{k})} = \pm |\vec{f}(\mathbf{k})| \quad (1.18)$$

et permettent de réécrire h

$$h(\mathbf{k}) = |\vec{f}(\mathbf{k})| \begin{pmatrix} \cos \beta & \sin \beta e^{-i\phi} \\ \sin \beta e^{i\phi} & -\cos \beta \end{pmatrix} = |\vec{f}(\mathbf{k})| \tilde{h}(\mathbf{k}), \quad (1.19)$$

avec $\cos \beta = f_z(\mathbf{k})/E(\mathbf{k})$ et $\phi = \text{Arg}(f_x(\mathbf{k}) + if_y(\mathbf{k}))$. On a supposé ici que l'énergie ne s'annule nulle part, pour pouvoir factoriser $|\vec{f}(\mathbf{k})|$. Cela signifie que les deux bandes sont bien séparées en énergie et ne se touchent en aucun point \mathbf{k} .

Les projecteurs associés s'écrivent

$$P^\pm(\mathbf{k}) = \frac{1}{2}(\mathbb{1} \pm \tilde{h}(\mathbf{k})). \quad (1.20)$$

Les courbures de Berry, voir Eq. (1.7), sont

$$\begin{aligned} \Omega^\pm(\mathbf{k})u^\pm(\mathbf{k}) &= \left(\frac{1}{8}(\mathbb{1} \pm \tilde{h}(\mathbf{k}))d\tilde{h}(\mathbf{k}) \wedge d\tilde{h}(\mathbf{k}) \right) u^\pm(\mathbf{k}) \\ \Omega^\pm(\mathbf{k}) &= \pm \left(\frac{i}{2} \sin \beta d\beta \wedge d\phi \right), \end{aligned} \quad (1.21)$$

en accord avec [FPGM10].

Cette courbure présente une topologie non triviale, du fait du facteur ϕ qui est une fonction multivaluée. Il est nécessaire de décrire la connexion de Berry correspondante avec une coupure dans l'espace réciproque, autour du point de rotation de ϕ . Dans le cas d'un croisement de bandes ($\cos(\beta) = 0$), cette coupure est l'équivalent des cordes de Dirac pour un monopôle magnétique¹, dans l'espace réel [EGH80].

De manière équivalente, le système peut être décrit par un nombre d'enroulement $\oint d\phi$, qui caractérise la multi-valuation de $\phi = \phi(k_x, k_y)$. Considérons l'exemple où $f_x(\mathbf{k}) - if_y(\mathbf{k}) = (k_x - ik_y)^\delta$, qui abrite un point de croisement en $k_x = k_y = 0$. Comme on le verra par la suite, $\delta = 1$ correspond à la situation d'un cône de Dirac du graphène, alors que $\delta = 2$ est caractéristique d'une parabole de Dirac de la bicouche de graphène. On a $\phi = \delta \cdot \theta$ où $\theta = \arg(k_x - ik_y)$. Par une intégration polaire, on obtient

$$\frac{1}{2\pi} \oint d\phi = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \delta \cdot d\theta = \delta. \quad (1.22)$$

A travers cet exemple, on voit comment le modèle le plus simple d'un système à deux bandes peut générer une topologie non-triviale, décrite en terme de vortex, et de leurs nombres d'enroulements.

1.4 Applications au travail de thèse

On retiendra de ce chapitre que, lorsqu'on projette un système multi-bandes sur une seule bande, il se développe un vecteur de jauge, la connexion, qui affecte le mouvement des électrons comme le potentiel-vecteur de l'électromagnétisme. La connexion et la courbure qui en résultent portent respectivement le nom de connexion de Berry et courbure de Berry. On résume la comparaison dans la table (1.1).

Dans la suite de cette thèse, on se propose d'étudier la physique de Berry dans les dérivés du graphène.

1. Dans le chapitre 2, on s'intéressera à la physique de la courbure de Berry, c'est à dire à une étude locale du système. A travers l'exemple des dégénérescences ponctuelles

¹Si on ouvre maintenant un gap dans le spectre, le monopôle n'est plus ponctuel mais de taille finie

Objet mathématique	Espace réel	Espace réciproque
connexion	potentiel-vecteur	connexion de Berry
courbure	champ magnétique	courbure de Berry
holonomie	flux magnétique	phase de Berry
nombre de Chern	flux total	nombre de Chern

TABLE 1.1 – Comparaison : électromagnétisme et physique de Berry.

La notion d'holonomie [Sim83], qui ne sera pas plus discutée dans cette thèse, se définit comme la caractérisation des défauts topologiques en intégrant une forme autour d'eux. Ceci correspond bien à la notion de flux magnétique où la surface intégrée est supportée par le contour de l'intégration holonomique.

de bandes, on s'attachera à caractériser les singularités associées à cette courbure de Berry.

2. Dans le chapitre 3, on discutera d'un type de mesure possible de la topologie associée à la courbure de Berry, par le biais d'un champ magnétique réel. On tentera une approche par la quantification par déformation, qui permet d'introduire le champ magnétique en perturbation.

Chapitre 2

Topologie locale des électrons de Dirac en deux dimensions

A la suite de ce premier chapitre introductif, on se propose d'étudier une première situation où la physique de Berry prend toute sa place, celle des croisements ponctuels de bandes, aussi appelés points de Dirac, figure 2.1. L'objet de ce chapitre est de classer les

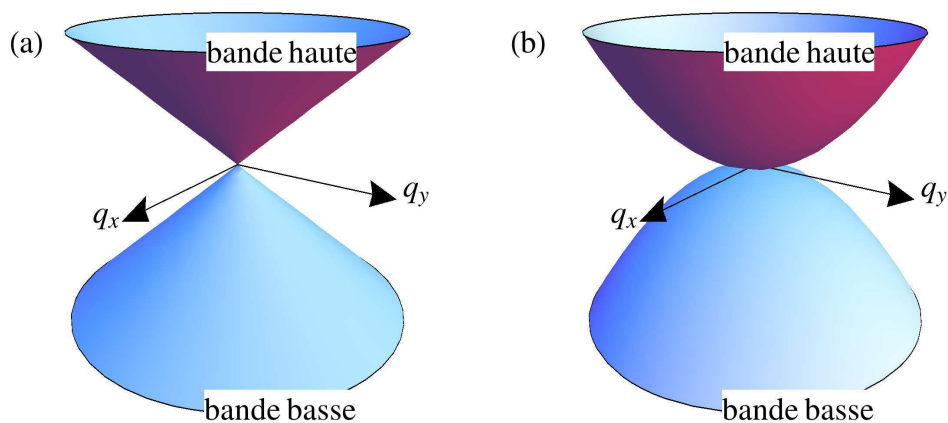


FIGURE 2.1 – Exemples de points de Dirac

On présente ici différentes dispersions énergétiques en \mathbf{q} , autour d'un point de Dirac, croisement entre les bandes haute et basse. (a) dispersion linéaire qui forme un cône de Dirac. Cette structure peut se retrouver dans le cas de la monocouche de graphène autour du point K, ou K', de la première zone de Brillouin. (b) dispersion quadratique qui forme une parabole de Dirac. Cette structure est typique de la bicouche de graphène autour du point K ou K' de la première zone de Brillouin.

différents exemples expérimentaux en fonction de leurs propriétés topologiques, selon les lignes introduites précédemment. On s'intéressera, ici, uniquement aux aspects locaux de la topologie, à travers la première classe de Chern, c'est à dire la courbure de Berry, par opposition aux aspects globaux décrits par le premier nombre de Chern.

Outre l'intérêt théorique pour de tels modèles proches de la physique relativiste, ce chapitre permet d'introduire les résultats essentiels pour le chapitre suivant sur le transport électronique dans les niveaux de Landau. En conséquence, il ne sera pas fait ici explicitement mention des expériences permettant de mettre en évidence les concepts introduits, et on se concentrera sur les aspects théoriques des structures de bande. Les diverses expériences relatives seront discutés en détail dans le chapitre 3.

2.1 Propriétés des points de Dirac

On utilise ici les résultats du chapitre précédent pour caractériser les points de Dirac. Ces points représentent des défauts topologiques, caractérisables par leur vorticité.

2.1.1 Physique d'un fermion de Dirac

Commençons par étudier la physique d'un système à deux bandes couplées. On se restreindra à une étude locale du point, choisissant ainsi de travailler dans le continu, en oubliant la forme toroïdale de la première zone de Brillouin qui résulte de la périodicité du réseau réciproque.

On utilise ici les résultats du chapitre précédent sur le système à deux bandes. La connexion de Berry du hamiltonien (1.19)

$$h(\mathbf{k}) = |\vec{f}(\mathbf{k})| \begin{pmatrix} \cos \beta & \sin \beta e^{-i\phi} \\ \sin \beta e^{i\phi} & -\cos \beta \end{pmatrix}. \quad (2.1)$$

s'écrit $\Gamma = \mp i \sin^2(\beta/2) d\phi$. Dans le langage des classes de Chern, la connexion Γ est non-triviale de part la fonction multivaluée $d\phi$. On peut la caractériser mathématiquement par un nombre d'enroulement $\oint \Gamma$.

2.1.2 Points de Dirac

On s'intéresse maintenant au cas de deux bandes couplées et dégénérées en un point, appelé point de Dirac. Dans les calculs précédents, cela correspond à la limite $\cos \beta \rightarrow 0$, c'est à dire $\Gamma = \mp(i/2)d\phi$. On pourrait croire que la courbure correspondante, $\Omega = d\Gamma$ est nulle, mais elle présente, en réalité, une singularité au cœur du vortex défini par $d\phi$.

Par comparaison avec l'électromagnétisme, le cas des points de Dirac est l'équivalent d'un monopole magnétique localisé en un point [EGH80]. Ce monopole peut être caractérisé par la charge qu'il porte, aussi appelé nombre d'enroulement en topologie

$$W = \pm \frac{1}{2\pi} \oint_C d\phi = \pm \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \frac{\partial \phi}{\partial \theta} d\theta, \quad (2.2)$$

avec $\oint \Gamma = (W/2)$.

2.1.3 Physique de plusieurs points de Dirac

On généralise maintenant notre étude au cas de plusieurs singularités dans la structure de bande. La courbure de Berry sera caractérisée par autant de nombres d'enroulement que de points de Dirac.

On notera tout d'abord, que si le système étudié possède la symétrie d'inversion temporelle, alors les points de Dirac arrivent par paires. En effet, on peut écrire la transformation

$$T^{-1} \cdot H(\mathbf{k}) \cdot T = H^*(-\mathbf{k}), \quad (2.3)$$

où T est l'opérateur d'inversion temporelle et où on a négligé la présence du vrai spin. On voit alors qu'un point de dégénérescence de bande en \mathbf{k} , implique aussi un point de dégénérescence en $-\mathbf{k}$. On rappelle que T est un opérateur anti-unitaire ce qui explique la conjugaison complexe, et l'inversion du spin, dans l'équation (2.3).

Qu'en est-il du nombre d'enroulement ? On pourra observer sur l'exemple de la figure 2.2(a) que le sens est inversé, ce qui vient de la conjugaison complexe dans l'équation (2.3). En référence à l'équation (2.2), on voit en effet que la conjugaison complexe implique $\phi \rightarrow -\phi$, soit $W \rightarrow -W$.

Dans notre étude, on considérera aussi plusieurs paires temporelles, les unes n'étant pas

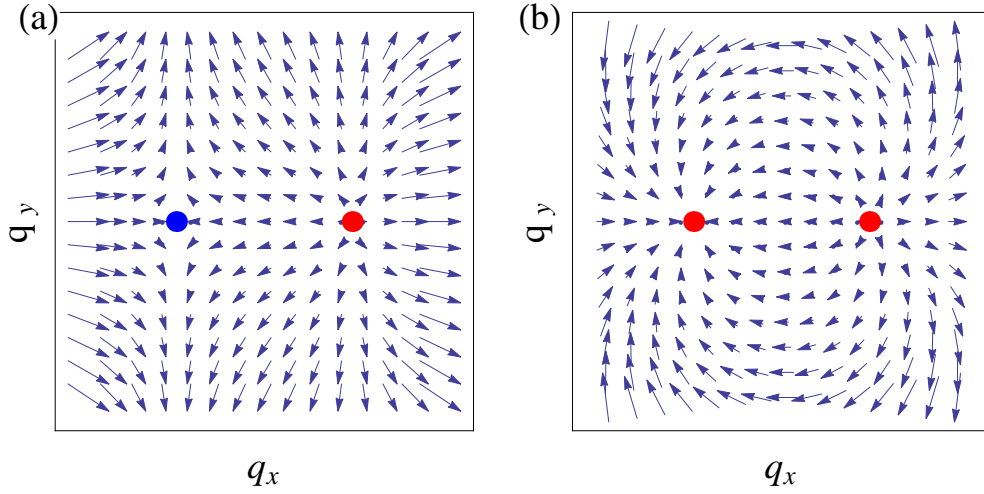


FIGURE 2.2 – Enroulements relatifs de deux vortex

En (a), on présente deux vortex, de vorticité opposée (+1) et (-1), reliés par la symétrie d'inversion temporelle, cf. l'équation (2.3). En (b), sont représentés deux vortex de même vorticité (+1).

reliées aux autres par une quelconque transformation. C'est la symétrie du hamiltonien H qui déterminera alors les nombres d'enroulement relatifs des points de Dirac.

2.1.4 Stabilité des points de Dirac

On souhaiterait maintenant pouvoir tester la stabilité des points de Dirac face à diverses perturbations. Il existe essentiellement deux méthodes pour faire disparaître de tels points. La première se base sur les symétries (géométrie), la seconde sur la topologie.

1. Suivant les travaux de [Hor05, Vol03], les points de Dirac à deux dimensions ne sont généralement pas stables. Une perturbation, aussi petite soit-elle, peut suffire à lever la dégénérescence au point considéré. Néanmoins, si les perturbations respectent certaines symétries, il est possible de stabiliser ces points. Dans le cas du graphène, il s'agit des symétries d'inversion du réseau et de renversement du temps, comme il sera discuté plus loin. C'est uniquement lorsque la perturbation brise une des symétries qu'il est possible de lever la dégénérescence.

Par ailleurs on notera que, même après l'émergence éventuelle d'un gap dans le spectre, les électrons continuent de suivre la dynamique de l'équation de Dirac, mais

massive cette fois. Il convient donc de distinguer, cf. [Fuc13], les points de Dirac, anomalies topologiques instables à deux dimensions, des fermions de Dirac, où le spin de bande donne encore lieu à une texture non-triviale, comme nous l'avons vu plus haut.

2. La deuxième manière de manipuler les points de Dirac s'appuie sur la nature algébrique du nombre d'enroulement. Si on fusionne deux points (ou plus) en un, on obtient un nouveau point de Dirac. Dans le cas de deux vortex de nombre d'enroulement W_1 et W_2 , le nombre d'enroulements résultant est déterminé par la somme *algébrique* des deux vortex $W_{tot} = W_1 + W_2$. Dans la suite de ce chapitre, on discutera deux cas génériques, $(+1) + (-1) \rightarrow (0)$ ou $(+1) + (+1) \rightarrow (+2)$. Ces transitions seront qualifiées de topologiques car elles impliquent un changement des singularités de la courbure de Berry. Notons ici que, à l'inverse de la première manière, la fusion de points ne repose sur aucune symétrie particulière.

On va maintenant considérer quelques exemples concrets qui illustrent les notions développées dans cette section.

2.2 La monocouche de graphène

Notre premier exemple est aussi le plus connu et le plus étudié. Isolé en 2005 pour la première fois, le graphène a connu une ascension fulgurante comme en atteste le nombre de publications quotidiennes sur l'archive (ArXiv.org). Comme indiqué par le co-lauréat du prix Nobel K. Novoselov [Nov11], une des raisons de ce succès vient de la structure en cônes de Dirac qui permet de dresser un pont entre l'électronique et la physique relativiste.

Le graphène, ou graphite $2D$, est un composé purement bidimensionnel constitué d'atomes de carbones qui s'ordonnent en un réseau en nid d'abeille, c'est à dire en deux sous-réseaux triangulaires imbriqués, figure 2.3(a). La monocouche de graphène est aussi la membrane la plus fine qui existe, avec une épaisseur d'un seul atome de carbone. La maille élémentaire du réseau de Bravais comporte deux atomes inéquivalents (notés A et B), chacun portant une orbitale p_z . Dans l'approche liaisons fortes, le graphène sera donc décrit par

2.2. LA MONOCOUCHE DE GRAPHÈNE

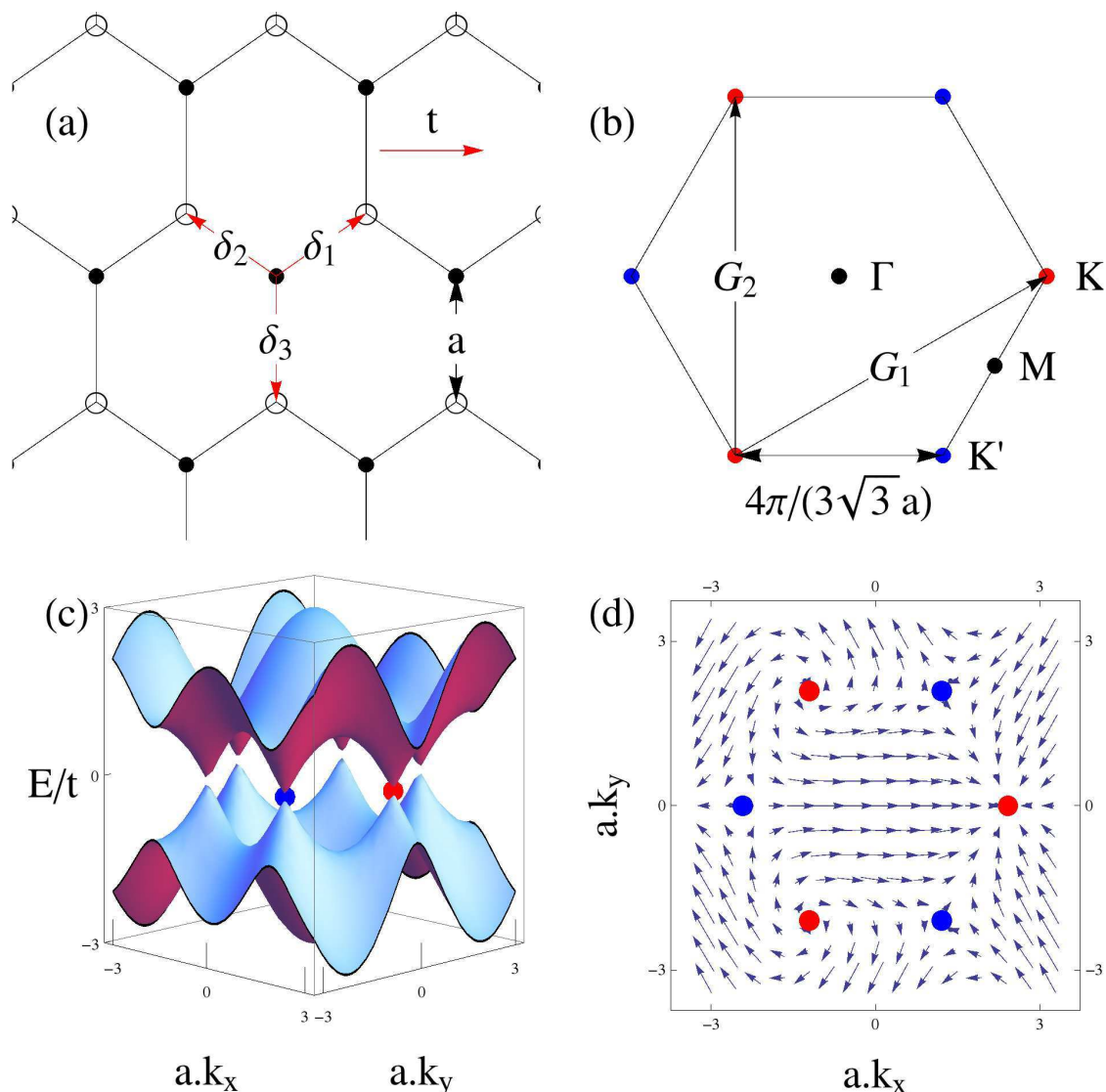


FIGURE 2.3 – Le graphène

En (a) est représenté le réseau hexagonal du graphène, introduit précédemment. La distance entre deux atomes de carbone voisins est de $a = 0.142\text{nm}$. Les sauts premiers voisins (d'amplitude t) sont indiqués par les vecteurs $\{\delta_i\}_{i=1,2,3}$. La première zone de Brillouin est représentée en (b). Les vecteurs \mathbf{G}_1 et \mathbf{G}_2 servent de base au réseau réciproque et relient les trois cônes \mathbf{K} (rouge), et \mathbf{K}' (bleu), équivalents. En (c), on observe la structure de bande du graphène, avec des cônes de Dirac en \mathbf{K} et \mathbf{K}' . Enfin en (d) est représentée la connexion de Berry du hamiltonien (2.4). On observe bien un nombre d'enroulement opposé pour les points \mathbf{K} et \mathbf{K}' , en accord avec la symétrie de renversement du temps.

deux bandes avec le hamiltonien suivant

$$h(\mathbf{k}) = t \begin{pmatrix} 0 & f(\mathbf{k}) \\ f^*(\mathbf{k}) & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.4)$$

2.2. LA MONOCOUCHE DE GRAPHÈNE

où t est l'amplitude du saut entre premiers voisins ($\sim 3\text{eV}$), et

$$f(\mathbf{k}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{\delta}_1} + e^{i\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{\delta}_2} + e^{i\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{\delta}_3}, \quad (2.5)$$

le facteur de forme avec les $\boldsymbol{\delta}_i$ comme vecteurs premiers voisins du réseau hexagonal, Figure 2.3(a).

$$\boldsymbol{\delta}_1 = a \left(\frac{\sqrt{3}}{2} + i\frac{1}{2} \right),$$

$$\boldsymbol{\delta}_2 = a \left(-\frac{\sqrt{3}}{2} + i\frac{1}{2} \right), \quad (2.6)$$

$$\boldsymbol{\delta}_3 = a(0 - i). \quad (2.7)$$

(a est la distance entre premiers voisins). Ici, nous utilisons une notation complexe pour les vecteurs à deux dimensions

$$\vec{v} \sim \mathbf{v} \sim v_x + iv_y \sim (v_x, v_y). \quad (2.8)$$

La première zone de Brillouin (BZ1) est hexagonale, figure 2.3(b). Les deux bandes se touchent au niveau des points cristallographiques $\mathbf{K} = (4\pi/(3\sqrt{3}a), 0)$ et $\mathbf{K}' = (-4\pi/(3\sqrt{3}a), 0)$, aux coins de (BZ1), et pour une énergie nulle, voir figures 2.3 et 2.1(a). Il s'agit des deux points de Dirac reliés par la symétrie d'inversion temporelle. Comme chaque orbitale p_z héberge un électron dans le graphène non dopé et pourrait encore accueillir un deuxième de spin opposé, la structure de bande est à moitié remplie et le niveau de Fermi se situe exactement sur ces points de Dirac. A noter que sur les six coins de (BZ1), seuls deux sont distincts, les autres étant reliés à \mathbf{K} , ou \mathbf{K}' , par un vecteur du réseau réciproque, \mathbf{G}_1 et \mathbf{G}_2 , figure 2.3(b).

On trace la connexion de Berry en fonction de \mathbf{q} , voir chapitre 1. Cette connexion peut être vue comme une texture où le cœur du vortex se situe au point de Dirac. Ici, la vorticité, c'est à dire le nombre d'enroulement, ne dépend effectivement pas des détails de la texture, en accord avec l'invariance topologique de ce dernier, figure 2.4. Les deux figures se distinguent par le choix de $f(\mathbf{k})$ dans le hamiltonien (2.4). Alors que la figure 2.4(a) représente la connexion Γ pour le choix (2.5), cette fonction est multipliée par $e^{-i\mathbf{k}\cdot\boldsymbol{\delta}_3}$ sur la figure 2.4(b). Les quantités topologiques, telles que la vorticité, ne dépendent pas de ce facteur de phase relatif entre les deux composantes du spineur [BM09].

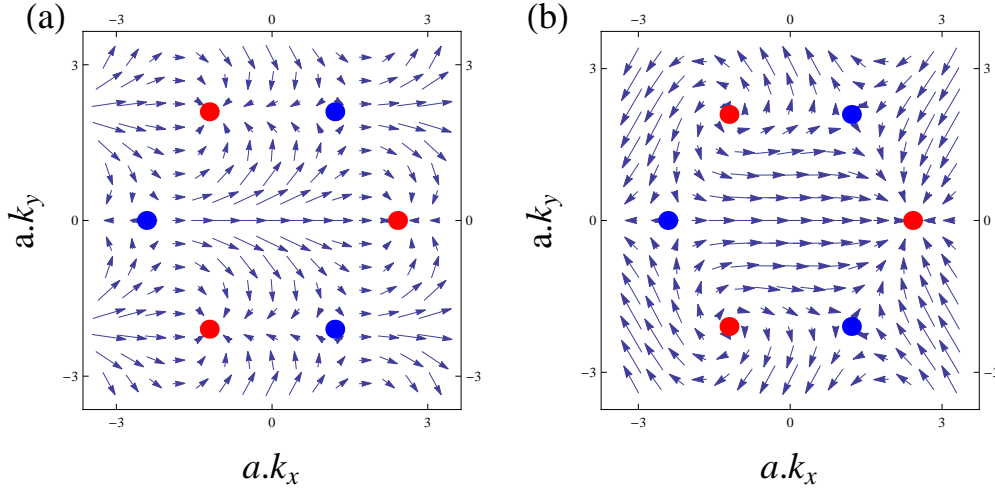


FIGURE 2.4 – Enroulements relatifs des points de Dirac du graphène.

La texture du pseudo-spin du graphène est représentée sur toute la première zone de Brillouin, et ce pour deux bases, (a) et (b), différentes du hamiltonien de liaisons fortes [BM09]. On voit bien ici que les nombres d'enroulements +1 (points rouges) et -1 (points bleus) ne sont pas affectés par ces différentes définitions. La distance entre premiers voisins est notée a .

2.2.1 Modèle effectif

On développe maintenant le hamiltonien (2.4) autour de \mathbf{K}/\mathbf{K}' en faisant l'approximation $|\mathbf{q}|a \ll 1$ où \mathbf{q} est le vecteur d'onde au niveau d'un coin de (BZ1) : $\mathbf{k} = \pm\mathbf{K} + \mathbf{q}$ ($\mathbf{K}' = -\mathbf{K}$). On obtient $tf(\mathbf{k}) = tf(\pm\mathbf{K} + \mathbf{q}) \simeq \hbar v_F(\pm q_x - iq_y)$, c'est à dire

$$h(\mathbf{K} + \mathbf{q}) = \hbar v_F \begin{pmatrix} 0 & \mathbf{q}^* \\ \mathbf{q} & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.9a)$$

$$h(-\mathbf{K} + \mathbf{q}) = -\hbar v_F \begin{pmatrix} 0 & \mathbf{q} \\ \mathbf{q}^* & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.9b)$$

où $v_F = 3ta/2\hbar = 10^6 \text{m/s}$ est la vitesse de Fermi, au voisinage d'un point de Dirac.

D'après les résultats du paragraphe précédent, cf. Equation (2.1), on a $\sin \beta = 1$ et $\phi = \pm\theta$. On en déduit le nombre d'enroulement

$$W = \pm \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\theta = \pm 1 \quad (2.10)$$

où \mathbf{K} et \mathbf{K}' prennent la valeur $-$ et $+$ respectivement. Comme nous l'avons vu plus généralement dans la section 2.1.3, nous retrouvons ici le résultat que l'inversion temporelle

entre \mathbf{K} et \mathbf{K}' implique des nombres d'enroulement opposés.

2.2.2 Stabilité des points de Dirac – symétries

En référence à la section 2.1.4, on souhaite maintenant tester la stabilité des points de Dirac du graphène. On s'intéresse, dans un premier temps, aux symétries qui assurent cette stabilité. Il s'agit de la symétrie d'inversion du réseau et celle de renversement du temps [MnGV07].

Considérons l'ajout d'une perturbation générale $\hbar v_F \vec{a} \cdot \vec{\sigma}$ au hamiltonien de basse énergie, Equations (2.9a) et (2.9b), on obtient le spectre suivant

$$E(\mathbf{q}) = \pm \hbar v_F \sqrt{a_z^2 + |\mathbf{q} + a_x + ia_y|^2}, \quad (2.11)$$

c'est à dire qu'un gap se développe, fonction de a_z , éliminant le point de Dirac. A noter que ce résultat est très dépendant de la dimensionalité. En effet, en dimension trois, on possède un degré de liberté supplémentaire k_z

$$E_{3D}(\vec{q}) = \pm \hbar v_F |\vec{q} + \vec{a}|, \quad (2.12)$$

qui peut venir refermer le gap en $\vec{q} = -\vec{a}$. La physique des semi-métaux dits *de Weyl*, c'est à dire des points de Dirac tri-dimensionnels, ne sera pas discutée dans cette thèse, [WTVS11]

Dans le cas bidimensionnel, il convient d'introduire des contraintes supplémentaires au système pour annuler le terme a_z de l'équation (2.11).

- La symétrie d'inversion du réseau implique

$$\mathbf{k} \leftrightarrow -\mathbf{k}, \quad A \leftrightarrow B. \quad (2.13)$$

On obtient alors la relation

$$h(\mathbf{k}) \leftrightarrow \sigma_x h(-\mathbf{k}) \sigma_x, \quad (2.14)$$

$$\begin{pmatrix} f_z(\mathbf{k}) & f_x(\mathbf{k}) - if_y(\mathbf{k}) \\ f_x(\mathbf{k}) + if_y(\mathbf{k}) & -f_z(\mathbf{k}) \end{pmatrix} \leftrightarrow \begin{pmatrix} -f_z(-\mathbf{k}) & f_x(-\mathbf{k}) + if_y(-\mathbf{k}) \\ f_x(-\mathbf{k}) - if_y(-\mathbf{k}) & f_z(-\mathbf{k}) \end{pmatrix}$$

Le vecteur d'onde \mathbf{k} est mesuré à partir du point Γ , qui est invariant par renversement du temps, si bien que la relation (2.14) devient une égalité, $h(\mathbf{k}) = \sigma_x h(-\mathbf{k}) \sigma_x$, ce qui implique que :

f_x soit une fonction paire,

f_y soit une fonction impaire,

f_z soit une fonction impaire.

- La symétrie de renversement du temps implique

$$\mathbf{k} \leftrightarrow -\mathbf{k}, \quad h(\mathbf{k}) \leftrightarrow h^*(-\mathbf{k}). \quad (2.15)$$

On obtient alors la relation

$$\begin{pmatrix} f_z(\mathbf{k}) & f_x(\mathbf{k}) - if_y(\mathbf{k}) \\ f_x(\mathbf{k}) + if_y(\mathbf{k}) & -f_z(\mathbf{k}) \end{pmatrix} \leftrightarrow \begin{pmatrix} f_z(-\mathbf{k}) & f_x(-\mathbf{k}) + if_y(-\mathbf{k}) \\ f_x(-\mathbf{k}) - if_y(-\mathbf{k}) & -f_z(-\mathbf{k}) \end{pmatrix} \quad (2.16)$$

ce qui implique que :

f_x soit une fonction paire,

f_y soit une fonction impaire,

f_z soit une fonction paire.

Or, pour un système qui possède les deux symétries, f_z ne peut être paire et impaire que si $f_z = 0$. On obtient donc bien une annulation du terme qui génère un gap autrement, et les points de Dirac sont ainsi protégés par la présence simultanée des symétries d'inversion du réseau et de renversement du temps.

Notons que si une de ces symétrie est brisée, un gap peut alors apparaître. C'est le cas du nitrure de bore (NB) [Fuc13], qui cristallise en un réseau hexagonal mais avec un atome d'azote sur un sous-réseau et un de bore sur l'autre sous-réseau. La symétrie d'inversion est alors perdue car les deux sous-réseaux ne sont plus équivalents. Or, le nitrure de bore possède bien un gap aux points \mathbf{K} et \mathbf{K}' de la première zone de Brillouin, en cohérence avec notre analyse.

2.2.3 Fusion $(+1) + (-1) \rightarrow (0)$

On discute maintenant la stabilité topologique des cônes de Dirac du graphène, en présence des deux symétries mentionnées plus haut, suivant la discussion de la section 2.1.4. Comme on l'a vu, les points de Dirac en \mathbf{K} et \mathbf{K}' possèdent des charges topologiques

opposées (± 1). Cette charge est additive et si on fait fusionner les deux points, on obtient un point de charge 0, ou une absence de point. L'annulation de la charge signifie que nous sommes en présence d'une bande à la topologie triviale. Même si le système respecte toutes les symétries possibles, un gap peut néanmoins s'ouvrir.

On précisera ici que, pour les systèmes qui respectent la symétrie de renversement du temps, le lieu de fusion des points de Dirac est nécessairement un des points invariants par renversement du temps. En effet, pour fusionner ces types de points, il est nécessaire que les positions \mathbf{k} et $-\mathbf{k}$ soient confondues, à un vecteur du réseau réciproque \mathbf{G} près. On obtient alors

$$\mathbf{k} = -\mathbf{k} + \mathbf{G} \Rightarrow \mathbf{k} = \frac{\mathbf{G}}{2}, \quad (2.17)$$

où \mathbf{G} est dans la première zone de Brillouin. Il existe ainsi quatre points non équivalents, pour un cristal bidimensionnel.

Dans le cas du graphène, les points de Dirac peuvent principalement converger vers un des points M de la première zone de Brillouin, si une contrainte suffisamment forte est appliquée dans une direction du cristal, [MPFG09a, MPFG09b]. Les différents sauts premiers voisins sont alors anisotropes, c'est à dire

$$f(\mathbf{k}) \rightarrow \frac{t'}{t} e^{i\mathbf{k}\cdot\delta_1} + e^{i\mathbf{k}\cdot\delta_2} + e^{i\mathbf{k}\cdot\delta_3} \quad (2.18)$$

Si $t = t'$, les points de Dirac se situent en K et K' . A l'inverse, si $t' \geq t$, les points de Dirac se rapprochent pour finalement fusionner au point M , pour $t' = 2t$. Le point M est bien un point $\mathbf{G}/2$. Une façon d'obtenir une anisotropie $t' \geq t$ est d'appliquer une contrainte à la feuille de graphène, par exemple

$$t \rightarrow t' = \frac{\partial t}{\partial a} \delta a, \quad (2.19)$$

où a représente la déformation. Une contrainte $\delta a/a \sim 20 - 30\%$ serait nécessaire pour observer la fusion, ce qui est ainsi hors de portée expérimentale dans les feuilles de graphène.

De manière générale, l'influence d'une déformation mécanique sur les propriétés électroniques du graphène a déjà été considérée dans [PCNP09]. Récemment, certaines expériences dans le domaine des atomes froids se sont attachées à reproduire la physique d'une monocouche de graphène, [TGU⁺12, WGS08]. Pour ce système modèle, il est alors possible

de manipuler le réseau optique pour faire converger les points de Dirac et atteindre la dispersion semi-Dirac [LFM12], introduite plus loin dans le chapitre. On citera aussi les récents travaux sur les résonateurs diélectriques sous champs micro-onde [BKMM13] qui permettent de sonder la même physique.

Afin d'étudier la fusion $(+1) + (-1) \rightarrow (0)$, on peut développer le hamiltonien du graphène autour du point M , cf. [MPFG09a, MPFG09b],

$$h(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} 0 & \frac{\hbar^2 q_x^2}{2m^*} + \Delta - i\hbar c_y q_y \\ \frac{\hbar^2 q_x^2}{2m^*} + \Delta + i\hbar c_y q_y & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.20)$$

avec

$$\begin{aligned} \Delta &= 2t - t' \\ m^* &= 2\hbar^2 / (3ta^2) \\ c_y &= 3t / (\hbar a) \end{aligned} \quad (2.21)$$

On peut comprendre la forme de ce hamiltonien effectif en se rappelant que, suivant l'invariance par inversion du réseau et renversement du temps, f_x doit être paire, d'où une constante puis une variation quadratique, alors que f_y doit être impaire, d'où une dispersion linéaire. Notons que ces symétries sont en effet pertinentes ici car \mathbf{q} est l'écart des vecteurs d'onde au point M , qui est invariant par renversement du temps. On est alors dans une situation similaire à la section précédente, où \mathbf{k} était le vecteur d'onde par rapport au point Γ , un autre point invariant par renversement du temps.

La dispersion du hamiltonien effectif (2.20), est présentée en Figure 2.5. L'application d'une contrainte s'interprète dans ce modèle par une variation de Δ (i.e. t').

- Si $\Delta \leq 0$, alors la dispersion présente deux cônes de Dirac, en $\mathbf{q}_D = \pm\sqrt{2m\Delta}/\hbar$, séparés par un point selle situé en M ($\mathbf{q} = 0$), figure 2.5(a). Ces cônes possèdent des nombres d'enroulement opposés, ± 1 , voir la figure 2.5(d), et cette situation est proche de celle rencontrée dans le graphène sans contrainte. A mesure que Δ diminue, les deux points de Dirac convergent vers l'origine (point M) voir figure 2.5(a).
- Lorsque $\Delta = 0$, figure 2.5(b), les deux cônes fusionnent au point M pour former un spectre dit *semi-Dirac*, ou hybride. En effet, suivant la direction q_x , la dispersion

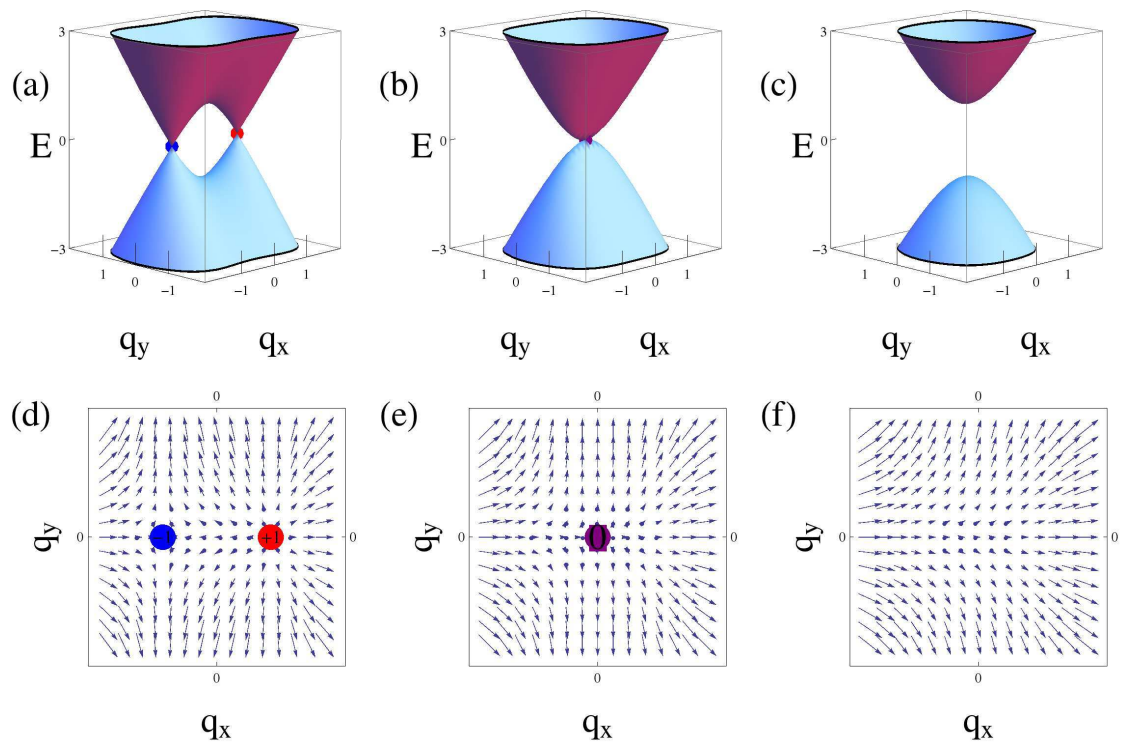


FIGURE 2.5 – Fusion $(+1) + (-1) \rightarrow (0)$

Sur la ligne du haut figure la dispersion de bande du modèle (2.20), et sur celle du bas la connexion de Berry correspondante. Sur la première colonne figure le système pour $\Delta \leq 0$, sur la deuxième la transition à $\Delta = 0$ et enfin sur la troisième, le système après la fusion des points de Dirac, $\Delta \geq 0$.

est quadratique alors qu'elle est linéaire suivant q_y . Par ailleurs, l'unique point semi-Dirac est caractérisé par un nombre d'enroulement nul, comme il s'agit de la somme de deux points de Dirac de nombres d'enroulement opposés, figure 2.5(e)

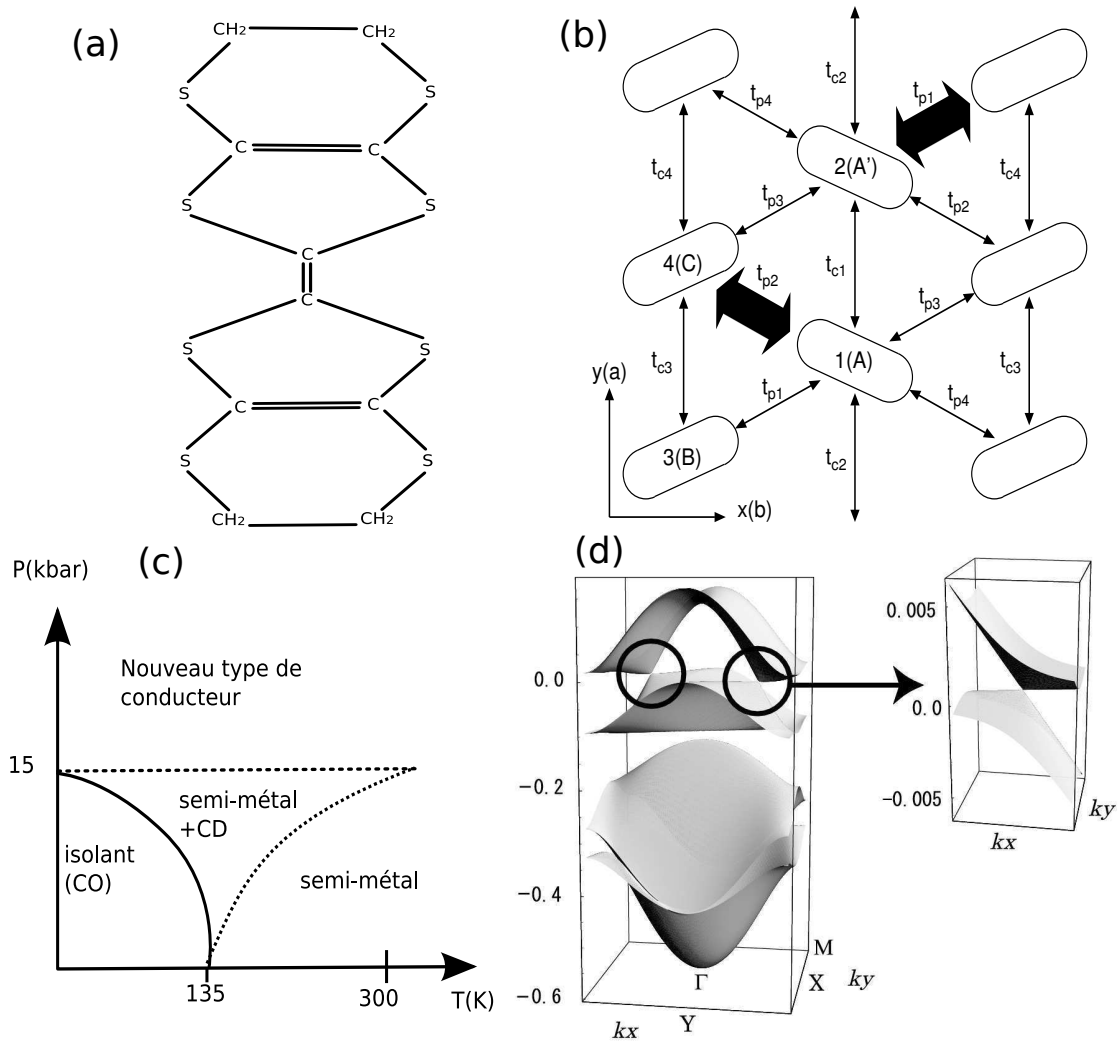
- Suite à l'annulation du nombre d'enroulement, on observe comme attendu la levée de dégénérescence si $\Delta \geq 0$. Le spectre présente alors un gap à l'origine, ancien lieu de fusion des cônes, figure 2.5(c) et même localement il n'y a plus de vorticit  dans la connexion de Berry, figure 2.5(f). A noter que l'apparition de ce gap est diff rente de celle discut e pr cedemment, pour le Nitrure de Bore, les bandes n' tant ici plus coupl es.

Nous soulignons que la transition d crite ici est topologique, contr l e par le param tre Δ , qui change de signe   la transition. Comme nous l'avons indiqu  plus haut, cette transition n'est accompagn e d'aucune brisure de sym trie, ni inversion du r seau, ni renversement du temps.

2.3 Le cristal mol culaire de α -(BEDT-TTF)₂I₃

Le cristal mol culaire de BEDT-TTF dans sa phase α , cf. [NTN⁺00, TTT⁺02, TST⁺06, TST⁺07], est un autre exemple de syst me qui pr sente une paire de points de Dirac dans le spectre  lectronique. Ces points sont reli s par la sym trie de renversement du temps. Ce mat riau est un compos  organique constitu  de feuillets de mol cules conductrices BEDT-TTF, intercal es entre des feuillets isolants de tri-iode. Le terme quasi-2D se justifie par la comparaison entre la conduction dans le plan [$60 - 259(\Omega.cm)^{-1}$] et hors du plan [$0.06(\Omega.cm)^{-1}$], la deuxi me  tant deux ordres de grandeur plus petite. Chaque maille  l mentaire contient quatre mol cules de BEDT-TTF, dont deux sont conjugu es l'une de l'autre par la sym trie d'inversion, cf. figure 2.6. Chaque mol cule contient une orbitale libre, et le spectre comporte donc quatre bandes. Le spectre est rempli aux trois-quart, si bien que seules les deux bandes les plus hautes, celles o  se trouvent les points de Dirac, participent au transport.

M me si tous les d tails du diagramme de phases  lectroniques ne sont pas encore compris, nous exposons dans ce paragraphe les principaux aspects de ce dernier. A pression


 FIGURE 2.6 – Le cristal moléculaire de α -BEDT

En (a), on donne la formule chimique de la molécule de BEDT-TTF, et en (b) la maille élémentaire du réseau, et les liens en liaisons fortes, avec quatre molécules, dont deux reliées par la symétrie d'inversion (A, A'). En (c) figure le diagramme de phase schématisé, en température et en pression : à $T = 300\text{K}$ et $P = 1\text{bar}$, le système est dans une phase semi-métallique. En dessous de $T = 135\text{K}$, le système devient isolant avec un ordre de charge (CO dans la figure). Au-delà de $P = 15\text{kbar}$, apparaît une nouvelle phase semi-métallique avec des fermions de Dirac (nouveau type de conducteur dans la figure) avec des cônes inclinés dans la structure de bandes. On notera aussi l'existence d'une phase intermédiaire avec disproportion de charge (CD dans la figure) pour des températures de l'ordre de $T = 135\text{K}$ et des pressions inférieures à $P = 15\text{kbar}$. Enfin, en (d) figure la dispersion des bandes pour la phase semi-métallique à haute pression [KKS06], où on observe bien la présence de deux cônes de Dirac inclinés, au niveau des deux bandes supérieures qui participent au transport.

et température ambiantes, α -(BEDT-TTF) est un métal à faible nombre de porteurs de charge, voir figure 2.6(c). En baissant la température, le système transite par une phase à recouvrement de bande avec une disproportion de charge, avant de devenir un isolant avec ordre de charge ($T = 135\text{K}$ et $P = 1\text{bar}$), ce qui indique l'importance des interactions électroniques dans ce matériau. Placé sous forte pression hydrostatique, environ 15kbar, les phases précédemment décrites laissent place à un nouvel état semi-métallique avec des cônes de Dirac inclinés proche du niveau de Fermi, figure 2.6(c) et (d). Récemment une autre branche massive a été identifiée, cf. [APC12, MGAS⁺13], décrite par une équation de Schrödinger avec une masse effective. Une pression supérieure à 15kbar n'induit pas de nouvelle phase, mais permet de déplacer les cônes vers un point de fusion (point Γ). Il s'agit, là encore, d'une fusion $(+1) + (-1) \rightarrow (0)$, du type graphène, mais les conditions expérimentales pour la réaliser sont déjà plus réalistes, de par la facile déformabilité du cristal. La valeur de la pression pour réaliser cette fusion est d'environ 40kbar, selon des estimations théoriques [KKSF07, MPFG09a, MPFG09b].

L'intérêt de ce cristal est, outre cette fusion, la présence de corrélations fortes. Expérimentalement, la présence de ces dernières est révélée par la phase ordre de charge isolante, comme indiquée plus haut, voir figure 2.6(c) et [KKS06, KKSF07]. Dans la phase avec cônes de Dirac, on peut comparer la force des corrélations en se référant à la valeur de la constante de structure fine effective. On rappelle que, dans le cadre de l'électrodynamique quantique, la force des interactions est régie par la constante $\alpha = e^2/(\epsilon_0\hbar c) \sim 1/137$, dans le vide. Dans le cas du graphène, c'est la vitesse de Fermi qui joue le rôle de vitesse de la lumière. Or $v_F \sim c/100 \sim 10^6\text{m/s}$, c'est à dire que $\alpha \sim 2/\epsilon$, en fonction du milieu diélectrique voisin (par exemple le substrat) caractérisé par la constante diélectrique ϵ .

La force des interactions est augmentée de par la faible vitesse des électrons. Cette augmentation est encore accentuée dans le cas du BEDT, car la vitesse de Fermi des électrons est encore réduite d'un facteur 10 ($v_F \sim 10^5\text{m/s}$), ce qui donne une constante de couplage $\alpha \sim 10/\epsilon$. Ainsi, on est en droit de considérer ce cristal comme le siège de fortes corrélations. L'étude des phases résultantes, et de l'écrantage, reste un problème ouvert. Rappelons enfin que le diagramme de phase, lui-même, est encore approximatif.

2.4 La bicouche de graphène

Isolée à la même époque que le graphène monocouche, la bicouche de graphène possède, elle aussi, des propriétés topologiques non-triviales. L'intérêt essentiel est qu'on ajoute des points de Dirac supplémentaires, deux par couche, qui ne sont pas reliés à ceux de l'autre couche par la symétrie de renversement du temps. Seule la géométrie du problème permet de déterminer la chiralité relative des points de Dirac.

La bicouche de graphène est un composé quasi-bidimensionnel constitué de deux feuillets de graphène arrangés suivant l'empilement dit *Bernal*, c'est à dire qu'un site A d'une couche est superposé au site B de l'autre couche, voir figure 2.7(a). Il existe un terme de saut t_{\perp} entre ces deux sites, si bien que le hamiltonien est une matrice 4×4 puisqu'il y a maintenant quatre atomes par maille élémentaire (deux par couche).

$$h(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} 0 & tf(\mathbf{k}) & 0 & 0 \\ tf^*(\mathbf{k}) & 0 & t_{\perp} & 0 \\ 0 & t_{\perp} & 0 & tf(\mathbf{k}) \\ 0 & 0 & tf^*(\mathbf{k}) & 0 \end{pmatrix} \quad (2.22)$$

avec toujours le même facteur de structure $f(\mathbf{k})$ défini en (2.5). La matrice est représentée dans la base $\{\phi_A, \phi_B, \phi_{A'}, \phi_{B'}\}$, ou les ($'$) différencient une couche de l'autre.

La première zone de Brillouin reste hexagonale et les deux bandes les plus proches du niveau de Fermi ($E = 0$) se touchent toujours au niveau des points K et K' , figure 2.7(b) et (c). Néanmoins, la dispersion autour de ces points est maintenant parabolique et non linéaire, comme dans le cas de la monocouche de graphène, figure 2.1.

Par ailleurs, si on trace la connexion de Berry, autour de \mathbf{K} ou \mathbf{K}' , on observe un nombre d'enroulement ± 2 [figure 2.7(d)] un (± 1) par nombre de cônes dans la vallée donnée, les points de Dirac d'une couche se superposant à ceux de l'autre couche.

2.4.1 Modèle effectif

On développe maintenant le hamiltonien (2.22) autour de \mathbf{K}/\mathbf{K}' avec toujours la même approximation $|\mathbf{q}|a \ll 1$, et $\mathbf{k} = \pm\mathbf{K} + \mathbf{q}$. Aux points \mathbf{K}/\mathbf{K}' , on trouve deux niveaux à énergie nulle, et respectivement un à $\pm t_{\perp}$. Ces états à énergie nulle ont pour vecteurs propres ϕ_A et $\phi_{B'}$. On souhaite projeter la physique sur ces deux états, autour de \mathbf{K}/\mathbf{K}' .

2.4. LA BICOUCHE DE GRAPHÈNE

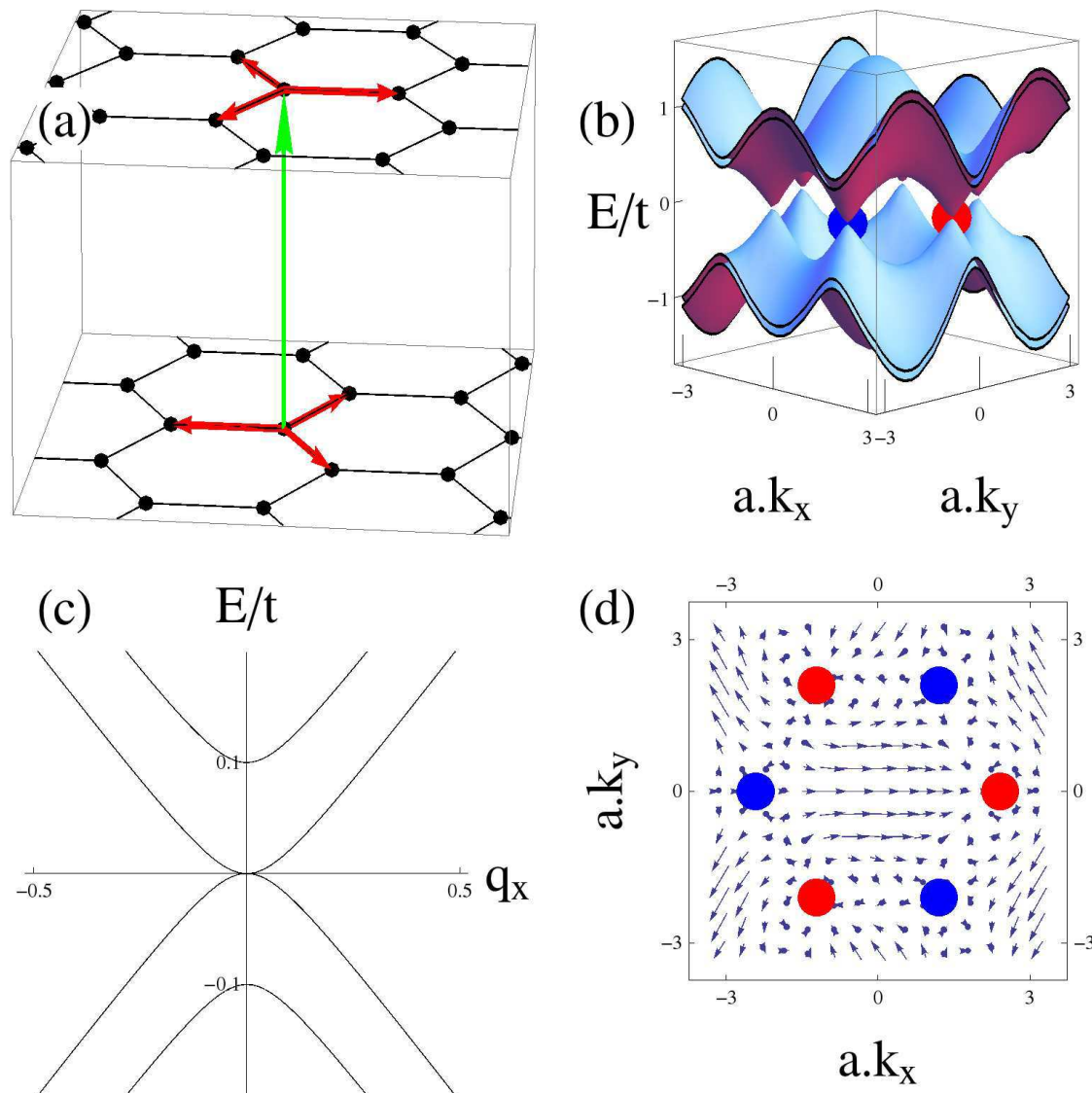


FIGURE 2.7 – La bicouche de graphène

En (a) figure le réseau des deux couches de graphène. Les sauts intra-couche (t) sont indiqués en rouge, et ceux inter-couche (t_{\perp}) en vert. La première zone de Brillouin n'est pas représentée car elle est identique à celle du graphène monocouche. En (b) on introduit la dispersion des quatre bandes (il y a quatre orbitales p_z par maille) correspondantes. On note encore la présence de points de Dirac en \mathbf{K} et \mathbf{K}' . La dispersion autour d'un de ces points est indiquée en (c). On observe une dispersion quadratique à basse énergie, caractéristique de la bicouche de graphène, alors qu'il y a deux bandes à haute énergie ($\pm t_{\perp}$). Enfin en (d), on présente la courbure de Berry, sur toute la première zone de Brillouin, d'une des deux bandes impliquées dans les points de Dirac. On notera un enroulement double pour tous les points \mathbf{K} et \mathbf{K}' , par opposition aux nombres d'enroulement de ± 1 de la monocouche de graphène.

2.4. LA BICOUCHE DE GRAPHÈNE

Pour cela, on va procéder à une élimination des composantes ϕ_B et $\phi_{A'}$.

On écrit d'abord l'équation aux valeurs propres

$$\begin{aligned}
 \hbar v_F \mathbf{q}^* \phi_B &= E \phi_{A'}, \\
 \hbar v_F \mathbf{q} \phi_A + t_\perp \phi_{A'} &= E \phi_B \sim 0, \\
 t_\perp \phi_B + \hbar v_F \mathbf{q}^* \phi_{B'} &= E \phi_{A'} \sim 0, \\
 \hbar v_f \mathbf{q} \phi_{A'} &= E \phi_{B'},
 \end{aligned} \tag{2.23}$$

où on a supposé que les contributions en ϕ_B et $\phi_{A'}$ sont négligeables pour les états de basse énergie. On simplifie le système d'équations en

$$\begin{aligned}
 \hbar v_F \mathbf{q}^* \phi_B &= E \phi_{A'}, \\
 -(\hbar v_F / t_\perp) \mathbf{q} \phi_A &= \phi_{A'}, \\
 -(\hbar v_F / t_\perp) \mathbf{q}^* \phi_{B'} &= E \phi_B, \\
 v_f \mathbf{q} \phi_{A'} &= E \phi_{B'},
 \end{aligned} \tag{2.24}$$

puis on élimine les *petites composantes* ϕ_B et $\phi_{A'}$, afin d'obtenir un système d'équations uniquement avec les *grandes composantes* ϕ_A et $\phi_{B'}$. On obtient alors le hamiltonien effectif

$$h_{eff}(\mathbf{q}) = -\frac{\hbar^2 v_F^2}{t_\perp} \begin{pmatrix} 0 & \mathbf{q}^{*2} \\ \mathbf{q}^2 & 0 \end{pmatrix}. \tag{2.25}$$

Par comparaison avec le hamiltonien (2.1), on a $\sin(\beta) = 1$ et $\phi = \pm 2\theta$, d'où un nombre d'enroulement

$$W = \pm \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} 2 \cdot d\theta = \pm 2. \tag{2.26}$$

Ce nombre d'enroulement double est le résultat d'une superposition Bernal de deux cônes de même chiralité, un pour chaque couche, au niveau d'une vallée \mathbf{K} ou \mathbf{K}' . Avec une superposition géométriquement différente, les nombres d'enroulement changent.

C'est à la lumière de cette remarque qu'on souhaite étudier les perturbations géométriques du réseau de la bicouche de graphène, dans la perspective d'induire des transitions topologiques. On va voir dans la suite de ce chapitre, que certaines modifications du hamiltonien de la bicouche peuvent déplacer/créer/supprimer les points de Dirac au niveau d'une vallée.

2.5 La bicouche de graphène désaxée

Le premier exemple de modification de la bicouche est l'ajout d'un défaut de rotation entre les deux feuillets de graphène, en comparaison avec l'empilement Bernal. On parlera de bicouche *désaxée* (*twisted bilayer* en anglais).

Cette étude est expérimentalement motivée, les désaccords de rotation entre différentes couches étant souvent observées pour le graphène épitaxié à partir de carbure de silicium (SiC) [HVMO⁺08], à la surface du graphite [RK93, PD05], ou encore pour le graphène en déposition par vapeur chimique (CVD) [LLR⁺11]. En cas de commensurabilité entre les deux réseaux, il existe une périodicité de l'empilement d'un réseau sur l'autre. Cette périodicité est responsable de l'apparition de figures, différentes de celles du réseau d'une couche, et appelées figures de *Moiré*, figure 2.8, avec un pas du réseau bien plus grand que la distance inter-atomique. Ces motifs de Moiré ont été mis en évidence directement par la microscopie tunnel, [TTIdH⁺12], figure 2.9. Le réseau dans le cas d'une rotation commensurable a été étudié par Shallcross *et al.* [SSP08]. On se concentrera ici sur de petits angles de rotation par rapport à l'empilement Bernal.

Notre modèle s'inspire des travaux de Lopes *et al.* et MacDonald *et al.*, [LdSPCN07, BM10]. Dans un modèle de liaisons fortes on peut calculer le terme de saut, $h_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\alpha\beta}$, d'un électron du sous-réseau β d'une couche, dans l'état \mathbf{k}' , vers le sous-réseau α de l'autre couche, et dans l'état \mathbf{k} :

$$h_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\alpha\beta} = \sum_{\mathbf{G}_1, \mathbf{G}'_2} \frac{t(\mathbf{k} + \mathbf{G}_1)}{V} e^{i[\mathbf{G}_1 \cdot \boldsymbol{\tau}_\alpha - \mathbf{G}'_2 \cdot \boldsymbol{\tau}_\beta]} \delta(\mathbf{k} + \mathbf{G}_1 - \mathbf{k}' - \mathbf{G}'_2), \quad (2.27)$$

où $\mathbf{G}_1, \mathbf{G}_2$ sont les vecteurs du réseau réciproque de la couche non-tournée, $\boldsymbol{\tau}_{\alpha/\beta}$ sont les vecteurs position des atomes d'un sous-réseau dans la maille élémentaire, V est le volume de la maille élémentaire, et $t(\mathbf{k})$ la transformée de Fourier du paramètre de saut. On peut simplifier l'équation (2.27) en faisant la remarque physique que $t(\mathbf{k})$ décroît exponentiellement avec \mathbf{k} [BM10]. Il est alors possible de se concentrer uniquement sur les harmoniques les plus grandes et qui se localisent au niveau d'un point de Dirac, et pour les points de Dirac équivalents de la première zone de Brillouin. Autrement dit, on ne considérera que les transitions avec des vecteurs d'ondes $0, \mathbf{G}_1$ et \mathbf{G}_2 , qui relient bien une vallée de la

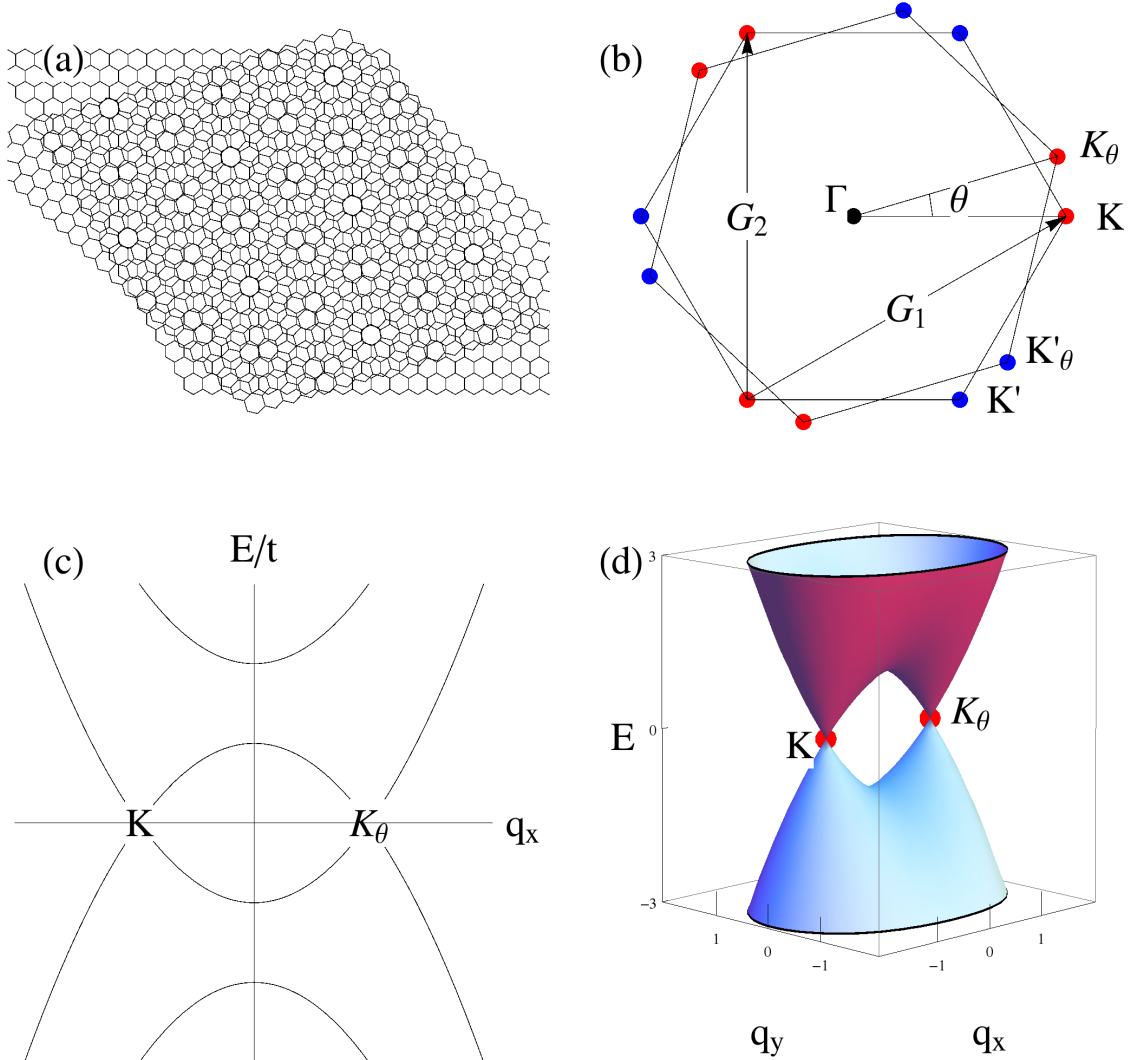


FIGURE 2.8 – La bicouche désaxée

On a représenté en (a) la superposition de deux feuilles de graphène avec un défaut de rotation entre les deux. On observe alors des figures géométriques, super-structures périodiques différentes de celles des deux couches. Il s'agit des figures dites de Moiré. La première zone de Brillouin des deux couches est indiquée en (b). A noter que la rotation d'une feuille par rapport à l'autre implique aussi un défaut de rotation entre les deux zones de Brillouin. Les points \mathbf{K} et \mathbf{K}' de la couche tournée sont indiqués par l'angle de rotation θ . La dispersion est essentiellement linéaire autour de chacun de ces points. En (c), on peut visualiser la dispersion des deux cônes, \mathbf{K} et \mathbf{K}_θ , d'une vallée, avec un point selle à hauteur de $\sim 100\text{meV}$. La même dispersion en trois dimensions est indiquées en (d). Notons que nous avons utilisé la couleur rouge pour les deux points de Dirac \mathbf{K} et \mathbf{K}_θ , car il sera démontré que les nombres d'enroulements respectifs sont identiques.

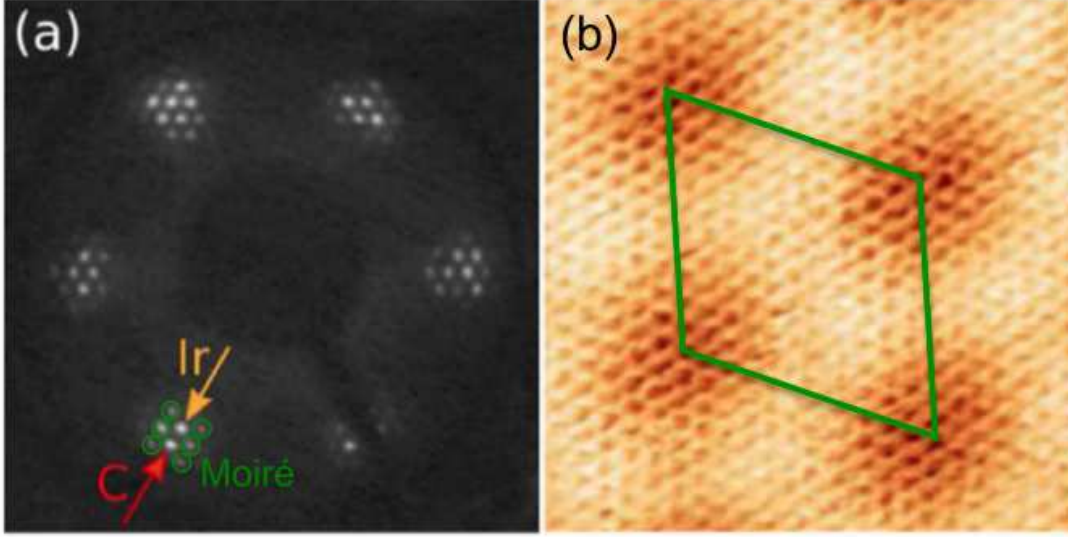


FIGURE 2.9 – Figures de Moiré de la bicouche de graphène désaxée
 D'après [TTIdH⁺12]. En (a) est représentée l'image d'une mesure LEED. En raison de la superstructure, chaque coin de la zone de Brillouin de la bicouche de graphène est scindé en plusieurs copies. Cette super-structure s'interprète comme l'existence d'un superréseau de Moiré. En (b), on présente une image obtenue par microscopie par effet tunnel. On peut ici directement visualiser la superstructure, dont la maille élémentaire est indiquée en vert.

zone de Brillouin à son équivalent. Suivant les trois vecteurs considérés, les termes de sauts correspondants s'écrivent h_{\perp}^0 et h_{\perp}^{\pm} , avec

$$h_{\perp}^0 = \tilde{t}_{\perp} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \quad (2.28a)$$

$$h_{\perp}^{\pm} = \tilde{t}_{\perp} \begin{pmatrix} e^{\mp i\psi} & 1 \\ e^{\pm i\psi} & e^{\mp i\psi} \end{pmatrix}, \quad (2.28b)$$

où $\psi = 2\pi/3$ et \tilde{t}_{\perp} est un paramètre qui dépend de l'angle de rotation de la bicouche.

On peut donc écrire le hamiltonien de basse énergie, dans le continu, et pour une vallée donnée

$$h(\mathbf{q}) = \begin{pmatrix} h_D(\mathbf{q} + \Delta\mathbf{K}/2) & h_{\perp}^{0,\pm} \\ h_{\perp}^{0,\pm\dagger} & h_D(\mathbf{q} - \Delta\mathbf{K}/2) \end{pmatrix}, \quad (2.29)$$

où la composante $h_D(\mathbf{q} + \Delta\mathbf{K}/2)$ représente les électrons dans la première couche de graphène avec

$$h_D(\mathbf{q}) = \hbar v_F \begin{pmatrix} 0 & \mathbf{q}^* \\ \mathbf{q} & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.30)$$

En raison du caractère désaxé, le point de Dirac est alors situé à la position $-\Delta\mathbf{K}/2$, où $\Delta\mathbf{K} = \mathbf{K} - \mathbf{K}_\theta$ est le désaccord de position entre les cônes de Dirac de la première couche ($\pm\mathbf{K}$), et ceux de la deuxième couche ($\pm\mathbf{K}_\theta$), pour une vallée, voir Figure 2.8(b). De même, la composante $h_D(\mathbf{q} - \Delta\mathbf{K}/2)$ représente les électrons dans la deuxième couche, avec un point de Dirac en $\Delta\mathbf{K}/2$.

Le hamiltonien de couplage est choisi parmi les trois possibles 2.28b,2.28a. Comme observé sur la Figure 2.8(c) et (d), le spectre de la bicouche désaxée est celui de deux cônes de Dirac, comme pour la bicouche standard, mais avec un vecteur $\Delta\mathbf{K}$ de décalage. En lieu et place de la dispersion quadratique, on observe deux cônes de Dirac reliés par une singularité de van Hove, à une centaine de meV, ce qui permet de les observer par STM [LLdS⁺09] (par comparaison avec les 3eV du graphène).

2.5.1 Symétrie des bandes et phases de Berry

Comme pour la monocouche de graphène sous contrainte, on doit alors se poser la question de la chiralité relative entre les deux points de Dirac séparés par $\Delta\mathbf{K}$. Notons tout d'abord que les deux cônes d'une vallée ne sont pas reliés par la symétrie de renversement du temps. Comme dans le cas de la bicouche non perturbée, c'est la géométrie du couplage qui va déterminer la vorticité relative des points de Dirac. En effet, en l'absence de tout couplage, $h_\perp^0 = h_\perp^\pm = 0$, la phase de Berry relative entre les deux cônes d'une vallée, est mal définie car le hamiltonien de l'équation (2.29) est invariant par la transformation qui change la phase d'un cône par rapport à celle de l'autre. Cette transformation (matrice 4×4) s'écrit

$$\begin{pmatrix} \mathbb{1} & 0 \\ 0 & \sigma_x \end{pmatrix}, \quad (2.31)$$

où $\mathbb{1}$ représente la matrice identité (2×2). Cette transformation, ou inversion, représente un simple échange entre l'indexation des sites A et B de l'une des couches de graphène (celle avec $'$), qui n'a pas de réalité physique. Comme vu précédemment, la conjugaison du hamiltonien $h(\mathbf{q})$ implique un nombre d'enroulement opposé, et on aurait ainsi changé ce dernier par un simple changement de notation.

Si on considère maintenant la transformation (2.31), c'est à dire le changement $h_D(\mathbf{k} - \Delta\mathbf{K}/2) \rightarrow h_D^*(\mathbf{k} - \Delta\mathbf{K}/2)$ dans la deuxième couche, en présence d'un couplage, on obtient

la condition sur les matrices de couplages

$$\sigma_x h_{\perp} = h_{\perp}, \quad (2.32)$$

pour que le hamiltonien total soit invariant. Or cette relation n'est pas vérifiée pour h_{\perp}^{\pm} , et le nombre d'enroulement d'un point de Dirac par rapport à l'autre est ainsi fixé par le couplage.

Comment déterminer le nombre d'enroulement relatif des deux cônes ? Dans le cas d'un hamiltonien sur réseau, on peut s'aider de symétries générales telles que l'inversion du réseau ou l'inversion du sens du temps. Dans notre cas, nous travaillons avec un hamiltonien dans la limite continue, équation (2.29). On peut néanmoins considérer les symétries des bandes elles-même. La structure de bande peut être considérée comme une figure géométrique qui possède dès lors des symétries. Un exemple qui se révèle utile est la symétrie d'inversion entre les deux cônes. Comme illustré sur la figure 2.10, cette symétrie consiste à envoyer le cône de $+\Delta\mathbf{K}/2$ en $-\Delta\mathbf{K}/2$, et réciproquement, tout en inversant les bandes haute et basse du point de Dirac. Il convient de noter que cette inversion des bandes est différente de l'inversion spatiale, qui relie les deux cônes de Dirac pour la monocouche de graphène par exemple. Ici il s'agit d'une transformation effective qui envoie un cône sur un autre au sein même d'une vallée. La symétrie entre les différentes bandes est l'équivalent, dans le continu, des symétries du réseau. Pour être complètes elles nécessitent de connaître la représentation de ces symétries dans le sous-espace des spineurs de bandes (i.e. les états propres). Considérons le hamiltonien

$$h(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} h_D(\mathbf{k} + \Delta\mathbf{K}/2) & h_{\perp} \\ h_{\perp}^{\dagger} & h_D(\mathbf{k} - \Delta\mathbf{K}/2) \end{pmatrix}. \quad (2.33)$$

La symétrie d'inversion s'écrit pour les énergies

$$E(\mathbf{k}) = -E(-\mathbf{k}), \quad (2.34)$$

ce qui implique deux transformations possibles pour le hamiltonien :

$$\phi_i^{\dagger}(\mathbf{k})h(\mathbf{k})\phi_j(\mathbf{k}) = -\phi_i^{\dagger}(-\mathbf{k})h(-\mathbf{k})\phi_j(-\mathbf{k}) \quad (2.35a)$$

$$\phi_i^{\dagger}(\mathbf{k})h(\mathbf{k})\phi_j(\mathbf{k}) = -\phi_i^{\dagger}(-\mathbf{k})h^*(-\mathbf{k})\phi_j(-\mathbf{k}) \quad (2.35b)$$

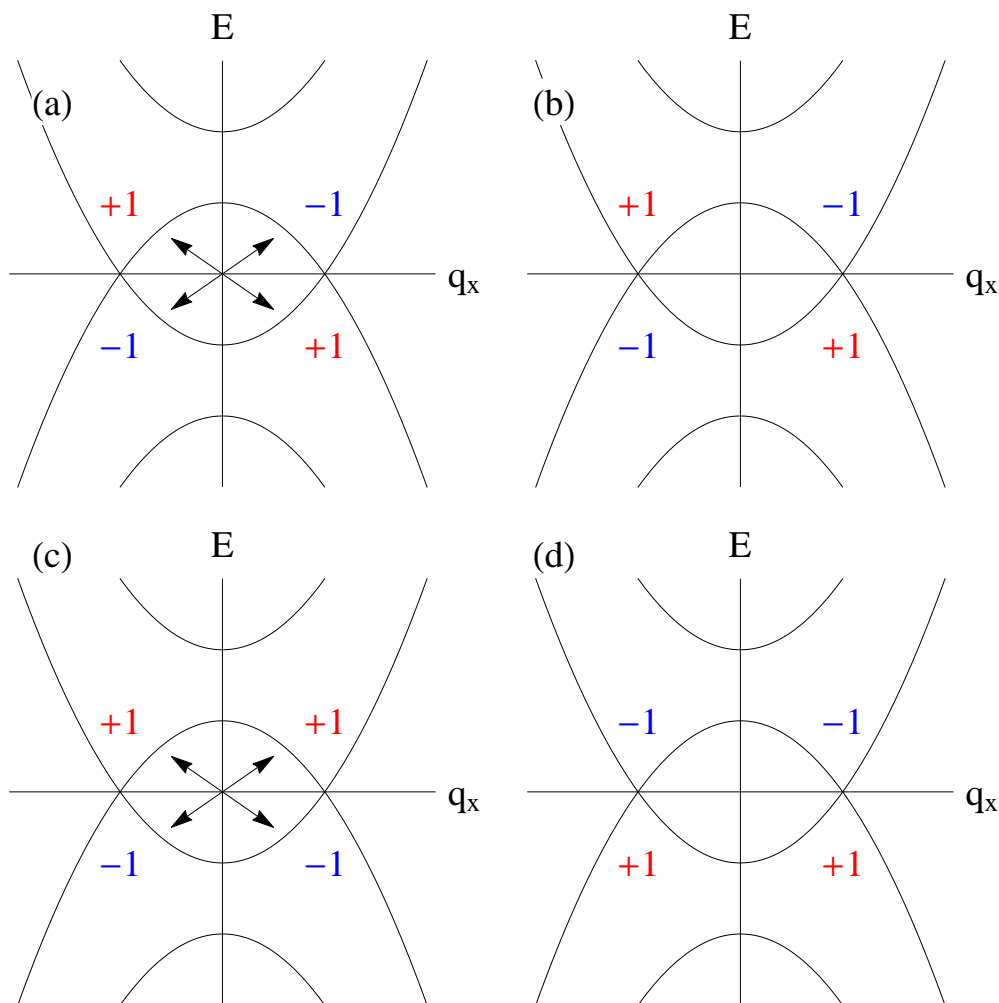


FIGURE 2.10 – La bicouche désaxée, symétries des bandes

Sur la colonne de gauche figure la dispersion énergétique de deux cônes de Dirac couplés, rattachés à leur nombre d'enroulement. Les doubles flèches symbolisent la symétrie d'inversion des bandes, différente de la symétrie d'inversion du réseau, qu'on applique à ces points de Dirac. Sur la colonne de droite, on observe le résultat de l'application de cette symétrie. Sur la première ligne figure le cas où les deux cônes supportent des nombres d'enroulements opposés à énergie constante, par exemple dans la bande de conduction (cas (a) dans le texte). La symétrie d'inversion des bandes laisse ces nombres d'enroulement inchangés dans la mesure où il y a toujours un nombre d'enroulement $+1$ et -1 dans la bande de conduction (de même pour la bande de valence). Sur la deuxième ligne figure le cas où les deux cônes supportent des nombres d'enroulement identiques (cas (b) dans le texte). La symétrie d'inversion des bandes change le nombre d'enroulement total de $+2$, dans la bande de conduction, en son opposé -2 . Dans le langage des opérateurs, cela est représenté par une conjugaison complexe du hamiltonien correspondant.

où $\phi_{i/j}(\mathbf{k})$ sont les vecteurs propres de $h(\mathbf{k})$. Le signe $(-)$ provient de l'inversion entre les bandes haute et basse, dans le cas où les deux points de Dirac ne résideraient pas à la même énergie. La conjugaison complexe, elle, ne modifie pas la structure de bande mais uniquement les nombres d'enroulement associés aux cônes. Dans la suite de cette section, on adoptera la convention d'utiliser l'indice (a) pour désigner le cas où les nombres d'enroulement des deux cônes sont opposés dans une même bande, et l'indice (b) pour le cas où les nombres d'enroulements des deux cônes sont identiques. En référence à la figure 2.10, on voit que (2.35a) implique que les nombres d'enroulement d'une bande soient opposés alors qu'ils sont identiques pour (2.35b). Par ailleurs, l'inversion sur les vecteurs propres se traduit par

$$\phi_i(-\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} 0 & -i\mathbb{1} \\ i\mathbb{1} & 0 \end{pmatrix} \phi_i(\mathbf{k}) = (\sigma_y \otimes \mathbb{1}) \phi_i(\mathbf{k}), \quad (2.36a)$$

$$\phi_i(-\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} 0 & -i\sigma_x \\ i\sigma_x & 0 \end{pmatrix} \phi_i(\mathbf{k}) = (\sigma_y \otimes \sigma_x) \phi_i(\mathbf{k}). \quad (2.36b)$$

où le σ_y , dans le produit tensoriel, garantit l'orthogonalité entre les vecteurs propres des deux différents cônes, notamment en $\mathbf{k} = 0$, et le σ_x impose une inversion du nombre d'enroulement.

En combinant les équations précédentes, on obtient

$$h(\mathbf{k}) = \sigma_y \otimes \mathbb{1} [-h(-\mathbf{k})] \sigma_y \otimes \mathbb{1}, \quad (2.37a)$$

$$h(\mathbf{k}) = \sigma_y \otimes \sigma_x [-h^*(-\mathbf{k})] \sigma_y \otimes \sigma_x, \quad (2.37b)$$

ce qui se traduit pour les matrices de couplages par

$$h_{\perp}^{\dagger} = h_{\perp}, \quad (2.38a)$$

$$\text{ou } \sigma_x h_{\perp}^{\dagger} \sigma_x = h_{\perp}^*. \quad (2.38b)$$

Il est alors facile de vérifier que les trois matrices de couplages h_{\perp}^0 et h_{\perp}^{\pm} vérifient seulement la transformation (2.38b). Cette transformation correspond à la situation où les deux cônes de Dirac possèdent la même chiralité, c'est à dire qu'à énergie fixée, les nombres d'enroulement sont les mêmes autour des deux singularités.

Comme indiqué dans [dGGG⁺11], on est en présence d'un modèle de basse énergie avec deux cônes de Dirac avec la même relation de dispersion que le modèle (2.20) pour

$\Delta \geq 0$ discuté dans la section 2.2.3, cf. [MPFG09a, MPFG09b], mais dont la topologie est radicalement différente. Les nombres d'enroulement ne sont pas opposés mais égaux, ce qui implique que si on les fait fusionner, on obtient un nombre d'enroulement de ± 2 , dû à l'additivité de ces invariants comme expliqué dans le chapitre précédent. Ceci garantit la stabilité d'un point de contact entre les deux bandes. Nous soulignons ici que cet exemple illustre bien que les aspects topologiques sont encodés dans le hamiltonien de bandes, et non dans le spectre qui peut, en effet, être sensiblement le même dans les deux cas.

Notons, par ailleurs, que ces résultats sont en accord avec la limite $\theta \rightarrow 0$, qui correspond à l'empilement Bernal. Pour cette configuration, le nombre d'enroulement attendu est bien ± 2 , avec un point de contact parabolique entre les bandes.

2.5.2 Modèle effectif – Fusion $(+1) + (+1) \rightarrow (+2)$

Afin d'étudier la physique à basse énergie, proche des singularités, on se propose de simplifier le modèle en suivant deux étapes :

1. D'abord on réduit les trois matrices de couplage à une seule matrice effective mais qui appartient à la même classe (2.38b), décrivant une fusion de points de Dirac de même nombre d'enroulement. On choisira dans ce but la matrice

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ \tilde{t}_\perp & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.39)$$

car elle représente le couplage réel de l'empilement Bernal de la bicouche. Comme on s'intéressera à la fusion des cônes de Dirac, pour laquelle l'angle de la bicouche désaxée tend vers 0, ce choix paraît raisonnable.

2. Ensuite on choisit de travailler dans la limite où \tilde{t}_\perp est l'échelle d'énergie la plus haute, si bien qu'on peut bien isoler les deux bandes de plus basse énergie des deux de plus haute énergie. Ici, $\tilde{t}_\perp \sim 100\text{meV}$ [LdSPCN07, BM10], valeur suffisamment grande pour justifier cette approximation.

En résumé, on choisit de modifier le hamiltonien pour le faire ressembler à celui de l'empilement Bernal. Même si cette simplification semble drastique d'un point de vue du spectre,

2.5. LA BICOUCHE DE GRAPHÈNE DÉSAJÉE

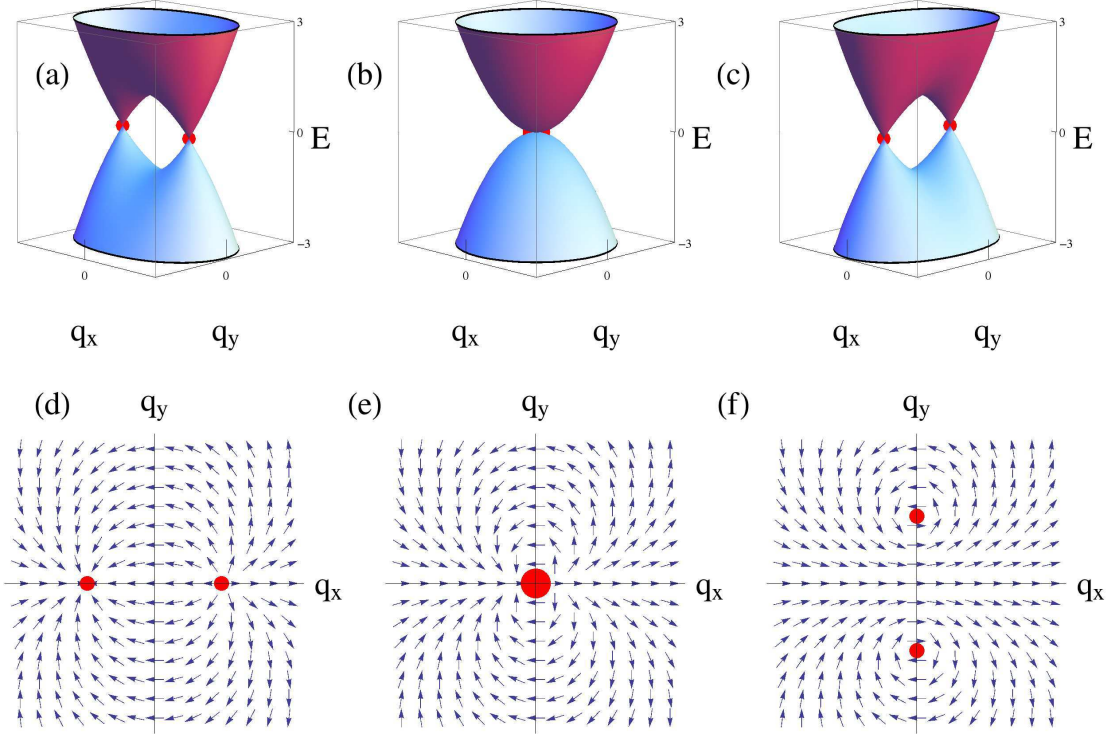


FIGURE 2.11 – Modèle effectif, à deux bandes, de la bicouche de graphène désaxée. Sur la première ligne est représentée la dispersion énergétique du modèle (2.43), en fonction de la valeur de $\Delta\mathbf{K}^2$. Le cas $\Delta\mathbf{K}^2 > 0$ est indiqué sur la première colonne, celui $\Delta\mathbf{K}^2 = 0$ sur la deuxième et $\Delta\mathbf{K}^2 < 0$ sur la troisième. La connexion de Berry associée est indiquée sur la deuxième ligne. Comme discuté dans le texte, on observe bien deux points de Dirac, de vorticités identiques, et ce quelque soit la valeur de $\Delta\mathbf{K}^2$.

elle se justifie par le fait qu'elle ne change pas les propriétés topologiques du problème initial, plus réaliste, Equation (2.29).

De manière similaire à la bicouche standard, on va maintenant simplifier le hamiltonien 4×4 en un hamiltonien effectif 2×2 . On présente ici la transition d'un modèle à quatre bandes à celui à deux bandes, suivant les approximations présentées. Soit $\{\phi_A, \phi_B, \phi_{A'}, \phi_{B'}\}$ un quadri-spineur attaché au hamiltonien effectif

$$h_{eff} = \begin{pmatrix} 0 & \hbar v_F(\mathbf{q} + \Delta\mathbf{K}/2)^* & 0 & 0 \\ \hbar v_F(\mathbf{q} + \Delta\mathbf{K}/2) & 0 & \tilde{t}_\perp & 0 \\ 0 & \tilde{t}_\perp & 0 & \hbar v_F(\mathbf{q} - \Delta\mathbf{K}/2)^* \\ 0 & 0 & \hbar v_F(\mathbf{q} - \Delta\mathbf{K}/2) & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.40)$$

Dans la limite où \tilde{t}_\perp est grand, les composantes ϕ_B et $\phi_{A'}$ sont fortement couplées entre elles et ne participent ainsi pas à la physique de basse énergie. On peut alors réécrire

2.5. LA BICOUCHE DE GRAPHÈNE DÉSAXÉE

l'équation aux valeurs propres pour les *grandes* composantes $(\phi_A, \phi_{B'})$, avec l'approximation $(\phi_B, \phi_{A'}) \rightarrow (0, 0)$ (on néglige ces *petites* composantes), comme dans le cas de la bicouche standard,

$$\begin{aligned} \hbar v_F(\mathbf{q} + \Delta\mathbf{K}/2)^* \phi_B &= E\phi_A, \\ \hbar v_F(\mathbf{q} + \Delta\mathbf{K}/2)\phi_A + \tilde{t}_\perp \phi_{A'} &= E\phi_B \simeq 0, \\ \tilde{t}_\perp \phi_B + \hbar v_F(\mathbf{q} + \Delta\mathbf{K}/2)^* \phi_{B'} &= E\phi_{A'} \simeq 0, \\ \hbar v_F(\mathbf{q} - \Delta\mathbf{K}/2)\phi_{A'} &= E\phi_{B'}, \end{aligned} \quad (2.41)$$

qui se simplifie en

$$\begin{aligned} \hbar v_F(\mathbf{q} + \Delta\mathbf{K}/2)\phi_B &= E\phi_A, \\ -\hbar \frac{v_F}{\tilde{t}_\perp}(\mathbf{q} + \Delta\mathbf{K}/2)^* \phi_A &= \phi_{A'}, \\ -\hbar \frac{v_F}{\tilde{t}_\perp}(\mathbf{q} + \Delta\mathbf{K}/2)\phi_{B'} &= \phi_B, \\ \hbar v_F(\mathbf{q} - \Delta\mathbf{K}/2)^* \phi_{A'} &= E\phi_{B'}. \end{aligned} \quad (2.42)$$

On obtient alors un hamiltonien effectif avec les deux grandes composantes ϕ_A et $\phi_{B'}$ (les petites composantes ont été éliminées)

$$h_{eff}^{2 \times 2}(\mathbf{k}) = -\frac{\hbar^2 v_F^2}{\tilde{t}_\perp} \begin{pmatrix} 0 & \mathbf{q}^{*2} - (\Delta\mathbf{K}^*/2)^2 \\ \mathbf{q}^2 - (\Delta\mathbf{K}/2)^2 & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.43)$$

qui vérifie

$$h_{eff}^{2 \times 2}(\mathbf{q}) \begin{pmatrix} \phi_A \\ \phi_{B'} \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \phi_A \\ \phi_{B'} \end{pmatrix}. \quad (2.44)$$

Examinons la structure de bande de ce hamiltonien effectif, en fonction du paramètre $\Delta\mathbf{K}$.

- Lorsque $\Delta\mathbf{K}$ est réel, deux cônes résident en $\pm\Delta\mathbf{K}/2$, alignés suivant l'axe k_x , voir figure 2.11(a). Comme précisé précédemment, les deux points de Dirac possèdent des nombres d'enroulement identiques. En effet, si on développe le hamiltonien (2.43) en $\Delta\mathbf{K}/2$, on obtient

$$h^{(\Delta\mathbf{k}/2)} = \frac{\hbar^2 v_F^2}{\tilde{t}_\perp} \begin{pmatrix} 0 & (\Delta\mathbf{K}^*)\mathbf{q}^* \\ (\Delta\mathbf{K})\mathbf{q} & 0 \end{pmatrix}, \quad (2.45)$$

alors qu'en $-\Delta\mathbf{K}/2$

$$h^{(-\Delta\mathbf{k}/2)} = -\frac{\hbar^2 v_F^2}{\tilde{t}_\perp} \begin{pmatrix} 0 & (\Delta\mathbf{K}^*)\mathbf{q}^* \\ (\Delta\mathbf{K})\mathbf{q} & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.46)$$

En référence aux discussions précédentes, on constate bien un nombre d'enroulement de +1 pour les deux cônes pour la bande de conduction.

- En conséquence, lorsque $\Delta\mathbf{K} = 0$, on obtient un seul point de contact entre les bandes, avec un nombre d'enroulement ± 2 . Cette situation correspond au cas de la bicouche Bernal et on observe bien une dispersion quadratique autour du point de Dirac, qui est une conséquence du double nombre d'enroulement, figure 2.11(b).
- L'invariant topologique ± 2 de la structure de bandes garantit l'existence d'un point de dégénérescence. Ainsi, si on considère un $\Delta\mathbf{K}$ imaginaire ($\Delta\mathbf{K}^2 \leq 0$), aucun gap n'apparaît. La dispersion parabolique se scinde en deux cônes, positionnés $\pm\Delta\mathbf{K}/2$, et maintenant alignés suivant l'axe k_y , figure 2.11(c).

Nos résultats indiquent donc que le système de la bicouche de graphène appartient à une classe topologique distincte de celle de la monocouche, en accord avec l'analyse des nombres d'enroulement relatifs des deux points de Dirac. Par ailleurs, on constate que, si les spectres énergétiques semblent relativement proches entre les modèles $(+1) + (-1) \rightarrow (0)$ et $(+1) + (+1) \rightarrow (+2)$, la physique, dirigée par les vecteurs propres, est radicalement différente, comme en atteste la connexion de Berry.

2.6 La bicouche de graphène avec correction trigonale

Le deuxième type de transformation concernant la bicouche sera l'étude de la correction trigonale, qui apparaît pour de faibles énergies, de l'ordre du meV. A ce système, on ajoutera aussi un défaut de translation entre les deux couches.

1. L'effet de la correction trigonale est d'ajouter des cônes de Dirac, tout en conservant le nombre d'enroulement total, W , dans chaque vallée.
2. L'effet des déformations est de mouvoir ces différents cônes dans la première zone de Brillouin ainsi que de les faire fusionner selon les deux scénarios développés dans les sections précédentes.

2.6. LA BICOUCHE DE GRAPHÈNE AVEC CORRECTION TRIGONALE

La correction trigonale de la bicouche s'obtient en ajoutant au hamiltonien (2.22) un terme de saut t' d'un atome A d'une couche à un atome B de l'autre couche,

$$h(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} 0 & tf(\mathbf{k}) & 0 & t'f^*(\mathbf{k}) \\ tf^*(\mathbf{k}) & 0 & t_{\perp} & 0 \\ 0 & t_{\perp} & 0 & tf(\mathbf{k}) \\ t'f(\mathbf{k}) & 0 & tf^*(\mathbf{k}) & 0 \end{pmatrix} \quad (2.47)$$

où $f(\mathbf{k})$ est défini dans l'équation (2.5). Ce nouveau terme est en effet présent dans la bicouche de graphène [MF06], de même que dans le graphite où on en tient compte dans le modèle de Slonczewski-Weiss-McClure [McC57, SW58] En terme d'amplitudes de saut, on a la hiérarchie suivante

$$t(\sim 3\text{eV}) \gg t_{\perp}(\sim 0.4\text{eV}) \geq t'(\sim 0.3\text{eV}), \quad (2.48)$$

où t est le terme de saut premier voisin sur une même couche et t_{\perp} le saut d'une couche à l'autre, pour les atomes en vis-à-vis. Bien que t' soit de l'ordre de grandeur de t_{\perp} , ce nouveau terme n'affecte la structure de bande qu'à basse énergie $\ll t_{\perp}$, comme on le verra dans la suite (Attention ici, à ne pas confondre le terme de saut t' de la bicouche avec le t' de la monocouche déformée).

Comme précédemment, on développe le spectre autour d'une vallée \mathbf{K} ou \mathbf{K}' , et on projette sur les deux bandes de plus basses énergies. Suivant la prescription $tf(\mathbf{K} + \mathbf{q}) \simeq v_F \mathbf{q}^*$, on obtient le hamiltonien suivant

$$h(\mathbf{K} + \mathbf{q}) = \hbar^2 b \begin{pmatrix} 0 & \mathbf{q}^{*2} \\ \mathbf{q}^2 & 0 \end{pmatrix} + \hbar c \begin{pmatrix} 0 & \mathbf{q} \\ \mathbf{q}^* & 0 \end{pmatrix} = h_b + h_c, \quad (2.49)$$

avec $b = v_F^2/t_{\perp} \simeq 14/m_0$ (m_0 étant la masse de l'électron nu), et $c = v_F t'/t \simeq 0.1 v_F \simeq 10^5 \text{m/s}$. Le terme h_b est dominant pour des énergies plus basses que t_{\perp} et plus hautes que 10 meV. Il génère une dispersion parabolique autour des points K et K' , avec un nombre d'enroulements ± 2 . Pour des énergies inférieures à ~ 10 meV, le terme h_c devient pertinent et déforme la structure de bandes de manière trigonale, avec un cône de Dirac au centre (point K ou K') et trois cônes satellites arrangés aux coins d'un triangle autour du cône central, figure 2.12, séparés par des points selle à environ 10meV.

Notons que les énergies de l'ordre 1 – 10meV commencent seulement à pouvoir être résolues dans les échantillons de haute qualité [MEMK⁺11, ONF⁺12]. Pour cette raison, le

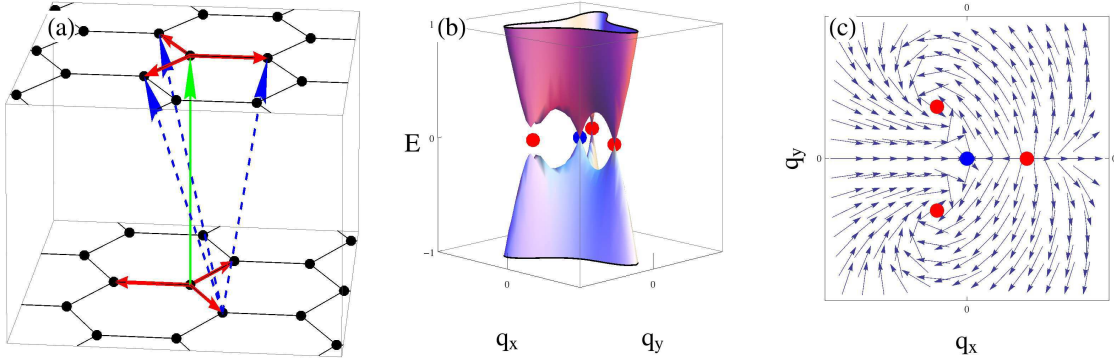


FIGURE 2.12 – La bicouche de graphène avec correction trigonale

En (a), on présente le réseau de la bicouche de graphène avec un terme de saut supplémentaire (t'), représenté en bleu pointillé, et qui est responsable de la correction trigonale à basse énergie. En (b) figure la dispersion *corrigée* avec un cône de Dirac central et trois autres périphériques. La connexion de Berry associée est représentée en (c). Le cône central possède un nombre d'enroulement -1 (bleu), alors que les trois autres ont un $+1$ (rouge).

terme en t' est souvent négligé dans les modèles dits *de basse énergie*, c'est à dire $c = 0$ dans le hamiltonien (2.49), ce qui génère une dispersion parabolique discutée précédemment, figure 2.1(b).

En terme de nombre d'enroulement, le cône central possède un invariant (-1) et les trois satellites ($+1$). Si on effectue la somme de ces invariants, on obtient ($+2$), en accord avec le nombre d'enroulement à plus haute énergie pour la dispersion parabolique (où h_b domine). Ceci illustre encore l'additivité des nombres d'enroulement, comme on s'y attend pour un invariant algébrique.

On considère maintenant une perturbation du hamiltonien, suite à une translation d'une feuille par rapport à l'autre ou d'une contrainte de déformation d'une couche. Comme nous l'avons discuté dans la section 2.2.2, la seule perturbation qui respecte la symétrie de renversement du temps et d'inversion du réseau, s'écrit ([MnGV07])

$$h_{\Delta} = \begin{pmatrix} 0 & -\Delta \\ -\Delta^* & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.50)$$

Nous nous restreignons à ce type de perturbation, afin de ne pas supprimer les points de Dirac par des brisures de symétries. Seules les transitions topologiques seront donc autorisées dans notre modèle. Par ailleurs, et contrairement au cas de la monocouche de graphène, on notera que la brisure de symétrie d'inversion du réseau est expérimentalement

2.6. LA BICOUCHE DE GRAPHÈNE AVEC CORRECTION TRIGONALE

facile à réaliser puisqu'il suffit d'appliquer une tension dans la direction perpendiculaire à la bicouche, ce qui résulte en une différence de potentiel entre la première et la deuxième couche. Cette dernière remarque souligne le lien entre la topologie de la bicouche et la géométrie du réseau sous-jacent.

On peut maintenant étudier les transformations de la structure de bande, en fonction du paramètre Δ .

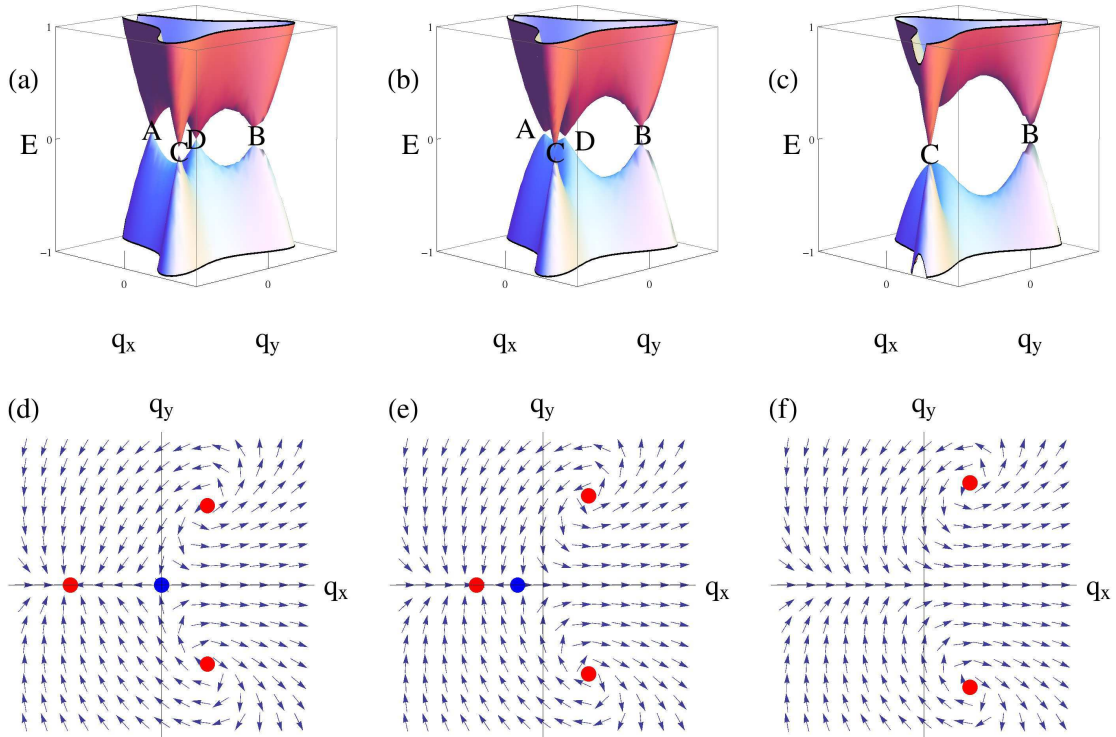


FIGURE 2.13 – Fusion $A - D$

De (a) à (c), on observe le spectre de la correction trigonale pour une déformation $\Delta \leq 0$, avec une fusion entre les cônes A et D . De (d) à (f), on observe la courbure de Berry correspondante. La fusion entre A et D entraîne la disparition des deux points de Dirac, chacun étant attaché à un nombre d'enroulement opposé, d'une manière similaire à la monocouche de graphène sous contrainte.

- En l'absence de toute déformation, $\Delta = 0$, la structure de bande possède une symétrie trigonale, avec des points de Dirac en

$$\begin{aligned} D &= (0, 0), & A &= (-c/b, 0), \\ B &= (c/2b, \sqrt{3}c/2b), & C &= (c/2b, -\sqrt{3}c/2b). \end{aligned} \quad (2.51)$$

2.6. LA BICOUCHE DE GRAPHÈNE AVEC CORRECTION TRIGONALE

Les nombres d'enroulement peuvent être déterminés par l'intégration de la connexion de Berry sur un chemin fermé autour d'un point unique, figure 2.13(a). Le cône D est

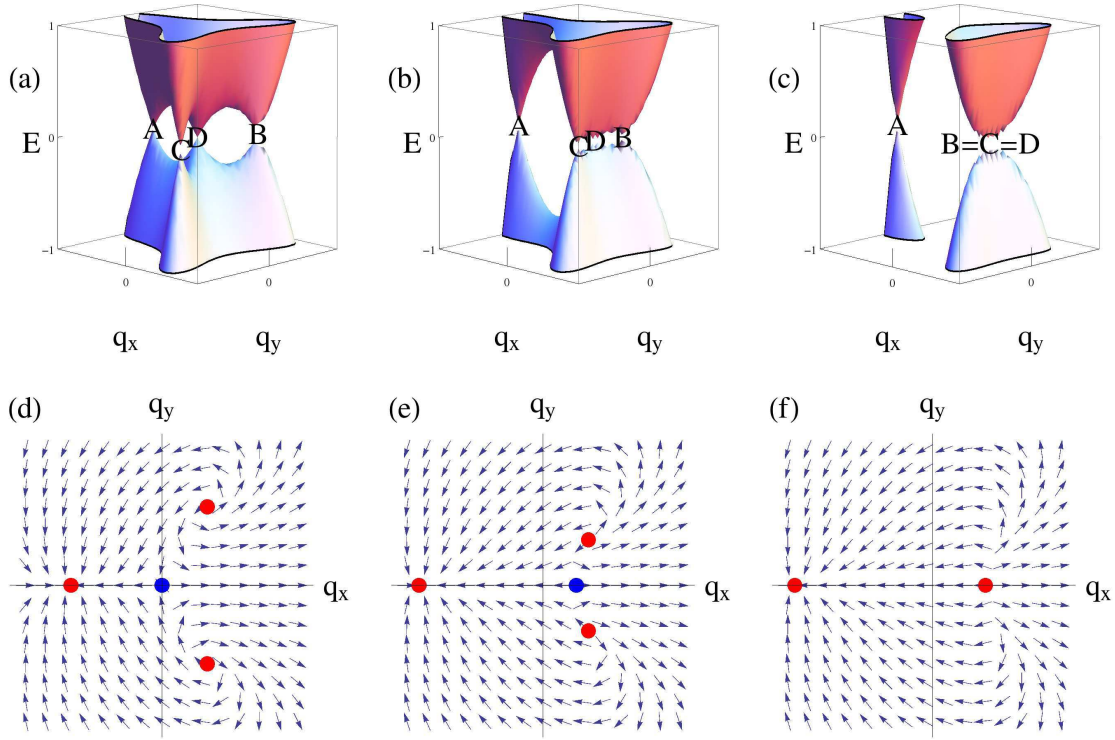


FIGURE 2.14 – Fusion triple $B - C - D$

De (a) à (c), on observe le spectre de la correction trigonale pour une déformation $\Delta \geq 0$, avec une fusion entre les cônes B , C et D . De (d) à (f), on observe la courbure de Berry correspondante. La fusion entre les trois cônes entraîne l'apparition d'un point de Dirac, de nombre d'enroulement $+1$, et une dispersion autour relativement complexe.

accompagné d'un invariant (-1) alors que A, B, C sont caractérisés par un invariant $(+1)$ [figure 2.13(d)].

- Si on considère une déformation suivant un axe de haute symétrie alors le paramètre Δ est réel (modulo un facteur de phase de $e^{2i\pi/3}$, transformation qui permute entre les trois axes de hautes symétries) cf. [dGGM12], et les points de Dirac se situent

maintenant

$$\begin{aligned}
 D &= \left(-\frac{c - \sqrt{c^2 + 4b\Delta}}{2b}, 0 \right), \\
 A &= \left(-\frac{c + \sqrt{c^2 + 4b\Delta}}{2b}, 0 \right), \\
 B/C &= \left(\frac{c}{2b}, \pm \sqrt{\frac{3c^2}{4b^2} - \frac{\Delta}{b}} \right).
 \end{aligned} \tag{2.52}$$

Si $\Delta \leq 0$, les cônes A et D se déplacent l'un vers l'autre pour finalement fusionner pour $\Delta = -c^2/4b$, voir figure 2.13(b) et (c). Cette fusion est du type $(+1) + (-1) \rightarrow (0)$, cf. le cas du graphène, et implique donc un spectre semi-Dirac pour les deux cônes fusionnés, ainsi que l'ouverture d'un gap si on continue à baisser Δ . Les deux cônes B et C restent à l'écart du processus, et gardent leur vorticité de $(+1)$ [figure 2.13(e) et (f)].

- A l'inverse, si $\Delta \geq 0$, les points de Dirac B, C et D convergent vers un vecteur d'onde commun et fusionnent pour $\Delta = 3c^2/4b$, voir figure 2.14. Au point de fusion, on obtient une dispersion complexe en forme de boomerang, figure 2.14(b), de nombre d'enroulement $+1$, issu de la somme algébrique de $W_D = -1$ et $W_B = W_C = +1$, figure 2.14(e). Ce nombre non nul empêche l'ouverture d'un gap, par opposition au cas précédent. En effet, si on continue à augmenter Δ , la dégénérescence de bande est préservée, figure 2.14(c). En référence aux trois cônes impliqués, on parle ici de fusion triple. Le point de Dirac A reste globalement inchangé avec $W_A = +1$, figure 2.14(f).
- Si la déformation appliquée est dirigée suivant un axe quelconque, Δ est complexe, on notera simplement que la fusion triple est évitée, c'est à dire que deux cônes fusionnent alors que le troisième est rejeté dans une autre direction. La fusion triple apparaît alors comme un cas limite, probablement difficilement observable ([dGGM12] pour plus de détails).

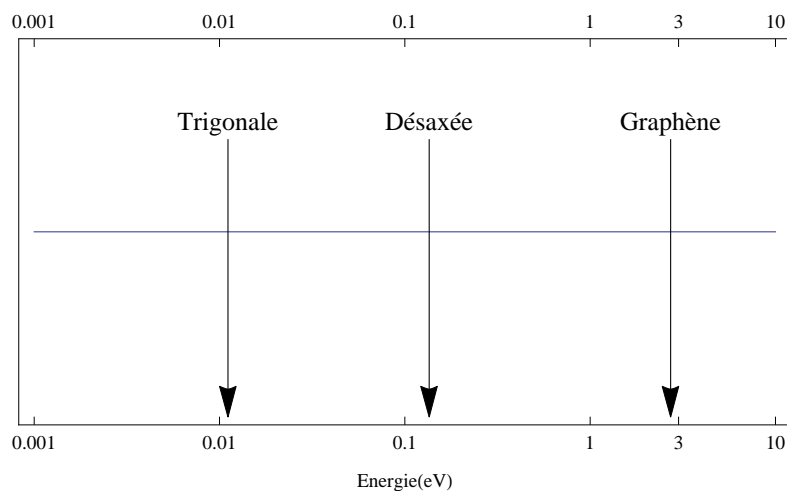


FIGURE 2.15 – Echelles d'énergie des différents exemples
L'échelle des énergies est logarithmique. Ces énergies correspondent à celles des points selles qui relient les différents points de Dirac. Au-delà de ces valeurs, il n'est plus possible de distinguer les différents points de Dirac, individuellement.

2.7 Conclusions

Dans ce chapitre, on s'est attaché à caractériser, de manière topologique, les structures de bandes à points de Dirac. Dans un grand nombre d'exemples, et pour de grandes différences d'énergies caractéristiques, résumées sur la figure 2.15, on a montré l'existence de phases topologiques de la matière, caractérisées par un nombre d'enroulement pour chaque point de Dirac. Notre approche permet aussi d'étudier les transitions entre les différentes phases topologiques, intervenant lors de la fusion de plusieurs points de Dirac.

On conclura ce chapitre sur plusieurs remarques générales.

- Tout d'abord il n'a été, dans ce chapitre, nulle part question de comment mesurer expérimentalement le nombre d'enroulement topologique ainsi que la phase de Berry associée. De manière générale, c'est un sujet actuel de la recherche en matière condensée. La conséquence la plus remarquable, à l'heure actuelle, de ces nombres d'enroulements se révèle sous l'effet d'un champ magnétique. En effet, le spectre des niveaux de Landau, notamment au voisinage de l'énergie nulle, dépend sensiblement des aspects topologiques établis dans ce chapitre. Dans le chapitre suivant, on s'intéressera donc à la physique des points de Dirac sous champ magnétique.

2.7. CONCLUSIONS

- Par ailleurs, l'introduction du champ magnétique nous permettra aussi de transiter des aspects locaux de la topologie vers ceux globaux. En effet, et suivant l'intensité du champ magnétique, ce sont les invariants topologiques locaux, la courbure de Berry, puis globaux, le premier nombre de Chern, qui dirigent la physique. La notion, que nous développerons, de *brouillage magnétique* permettra de faire le lien entre les deux invariants.

2.7. CONCLUSIONS

Chapitre 3

Topologie et magnétotransport

Comme précisé dans le chapitre précédent, la physique des points de Dirac peut s'apparenter à celle d'un spin *de bande* soumis à un champ magnétique dans l'espace réciproque. Une situation particulièrement propice pour révéler les effets de ce *champ magnétique effectif* est de faire décrire une orbite fermée, dans l'espace réciproque, à l'électron qui absorbe alors un flux fini de ce champ, c'est à dire une phase de Berry. Il existe une méthode simple pour réaliser une telle orbite. En effet, en appliquant un champ magnétique *réel* à l'électron, ce dernier adopte une orbite fermée, dite cyclotron. Cette orbite, dans l'espace réel, se traduit aussi par une orbite fermée dans l'espace réciproque, Figure 3.1. Si on considère la courbure de Berry comme le commutateur des opérateurs de position, alors l'application du champ magnétique a pour effet de créer des états semi-classiques (ou cohérents) qui vont donc s'adapter à cette courbure. A la lumière de cette remarque, le champ magnétique réel semble être un bon *Berry-mètre*.

On se propose d'illustrer cette affirmation par l'étude des différents modèles du chapitre précédent.

3.1 Un premier exemple : le graphène

En présence d'un champ magnétique, l'énergie des électrons bidimensionnels est quantifiée en niveaux discrets, dits *de Landau*. On rappelle ici le traitement quantique qui fait apparaître ces niveaux. En appliquant un champ magnétique perpendiculairement à un

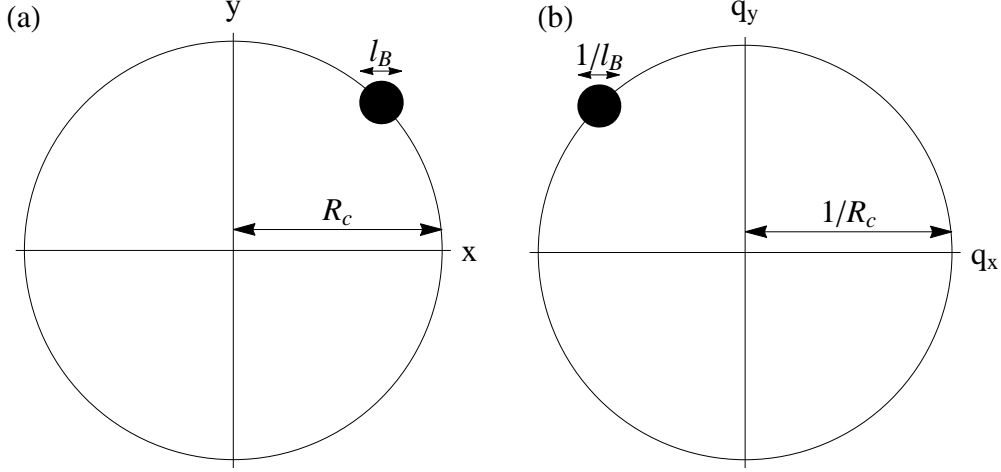


FIGURE 3.1 – Orbites cyclotron

Sur la figure (a) est représenté une orbite cyclotron dans l'espace réel (x, y) à un instant t , avec un rayon caractéristique R_C et un étalement de la fonction d'onde de l'électron de longueur typique l_B . Sur la figure (b) est représenté la trajectoire correspondante dans l'espace réciproque (q_x, q_y) avec un rayon $\sim 1/R_c$ et un étalement $\sim 1/l_B$, au même instant t .

système bidimensionnel, on modifie le moment

$$\vec{p} \rightarrow \vec{p} + e\vec{A}(\mathbf{r}) = \vec{\Pi}, \quad (3.1)$$

où $\vec{A}(\mathbf{r})$ est le potentiel vecteur associé au champ magnétique $\vec{\nabla} \times \vec{A}(\mathbf{r}) = B(\mathbf{r})\vec{e}_z$. Cette substitution, dite *de Peierls*, est une limite de l'effet du champ électromagnétique où on néglige les effets de commensurabilité entre le flux magnétique et le pas du réseau. L'argument \mathbf{r} dans $\vec{A}(\mathbf{r})$ est alors une position moyenne avec un écart typique $\Delta\mathbf{r} \gg a$ (a est ici le pas du réseau).

En raison de la non commutativité entre \mathbf{p} et \mathbf{r} , l'impulsion cesse d'être un bon nombre quantique et le moment invariant de jauge satisfait à la relation de commutation

$$[\Pi_x, \Pi_y] = -i\frac{\hbar^2}{l_B^2}, \quad (3.2)$$

où $l_B = \sqrt{\hbar/(eB)} \simeq 26\text{nm}/\sqrt{B[T]}$ est la longueur magnétique. En raison de cette relation, la trajectoire circulaire classique devient "floue", c'est à dire qu'à chaque instant l'électron est étalé sur une surface $\sim 1/l_B^2$ dans l'espace réciproque, figure 3.1(b), ce qui correspond à

3.1. UN PREMIER EXEMPLE : LE GRAPHÈNE

un étalement $\sim l_B^2$ dans l'espace direct, figure 3.1(a). Les composantes invariantes de jauge Π_x et Π_y sont ainsi conjuguées, ce qui nous permet de construire une algèbre de Dirac

$$\hat{a} = \frac{l_B}{\sqrt{2}}(\Pi_x - i\Pi_y), \quad \hat{a}^\dagger = \frac{l_B}{\sqrt{2}}(\Pi_x + i\Pi_y), \quad (3.3)$$

avec les opérateurs d'échelle qui satisfont $[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = \mathbb{1}$. Notons ici, qu'on doit supposer le champ magnétique uniforme ($l_B = \text{constante}$) pour retrouver cette algèbre.

On obtient donc la transformation, en présence d'un champ magnétique,

$$\mathbf{q} \rightarrow \frac{\sqrt{2}}{l_B}\hat{a}^\dagger, \quad \mathbf{q}^* \rightarrow \frac{\sqrt{2}}{l_B}\hat{a}. \quad (3.4)$$

Si on applique maintenant cette transformation au hamiltonien du graphène, pour une vallée (K ou K') de la première zone de Brillouin, on obtient :

$$h(\mathbf{q}) = \hbar v_F \begin{pmatrix} 0 & \mathbf{q}^* \\ \mathbf{q} & 0 \end{pmatrix} \longrightarrow h_B = \hbar v_F \frac{\sqrt{2}}{l_B} \begin{pmatrix} 0 & \hat{a} \\ \hat{a}^\dagger & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.5)$$

On peut diagonaliser ce dernier

$$h_B \begin{pmatrix} \Psi_A^{\lambda,n} \\ \Psi_B^{\lambda,n} \end{pmatrix} = E_{\lambda,n} \begin{pmatrix} \Psi_A^{\lambda,n} \\ \Psi_B^{\lambda,n} \end{pmatrix}, \quad (3.6)$$

avec ($\lambda = \pm 1$). On obtient alors les vecteurs propres, en terme d'états d'occupation $|n\rangle$: $a^\dagger a |n\rangle = n |n\rangle$.

$$\begin{pmatrix} \Psi_A^{\lambda,n} \\ \Psi_B^{\lambda,n} \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} |n-1\rangle \\ \lambda |n\rangle \end{pmatrix} \quad (3.7)$$

associés aux énergies propres

$$E_n = \lambda \frac{\sqrt{2}\hbar v_F}{l_B} \sqrt{n} = \lambda \hbar v_F \sqrt{2neB}, \quad (3.8)$$

où la présence du paramètre λ indique l'existence de deux familles d'états, une aux énergies positives, et l'autre, symétrique, aux énergies négatives. Ces niveaux sont tracés sur la figure (3.2). Dans les deux cas, on note une dispersion en $\sim \sqrt{nB}$, caractéristique des fermions ultra-relativistes, [GS05, PGN06].

La caractéristique principale, en ce qui concerne la topologie du système, est l'existence d'un niveau à énergie nulle

$$h_B \begin{pmatrix} 0 \\ |0\rangle \end{pmatrix} = 0. \quad (3.9)$$

3.1. UN PREMIER EXEMPLE : LE GRAPHÈNE

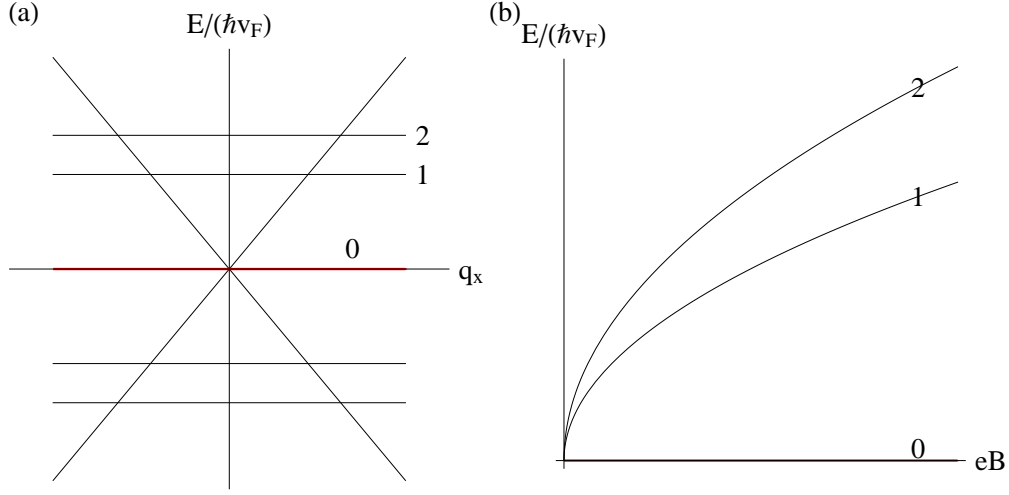


FIGURE 3.2 – Niveaux de Landau du graphène.

La dispersion du graphène $E = \hbar v_F \mathbf{q}$ est représenté en (a), avec les niveaux de Landau associés, pour $n = 0, 1, 2$, et un champ magnétique B fixé. L'espace entre les niveaux n'est pas équidistant, comme c'est le cas pour des fermions massifs, mais évolue en \sqrt{n} , en accord avec (3.8). Si on fait maintenant varier le champ B , les niveaux évoluent en énergie selon la figure (b), où seulement les niveaux d'énergie positive sont tracés (les niveaux à énergie négative s'obtiennent par une symétrie $E \rightarrow -E$). Le niveau à énergie nulle ne disperse pas, alors que (1) et (2) varient en \sqrt{B} (3.8.)

On notera que ce niveau ne disperse pas avec le champ magnétique, figure 3.2. Par ailleurs ce niveau ne s'étale pas non plus en présence d'un champ magnétique inhomogène [Kai09].

Une autre caractéristique des niveaux de Landau est la dégénérescence macroscopique de ces derniers. En effet, les orbites cyclotron peuvent se réaliser en tout point de l'espace réel et la dégénérescence est alors proportionnelle à la surface de l'échantillon. On peut aussi interpréter cette dernière comme l'attachement d'un électron à un quantum de flux h/e , et la dégénérescence est alors proportionnelle au nombre de quanta de flux dans l'échantillon, c'est-à-dire $(eB/h)S$ où S est la surface de l'échantillon. Outre cette dégénérescence macroscopique, il existe des degrés de liberté internes, le spin et l'indice de vallée pour le graphène, qui viennent augmenter le nombre d'états à énergie fixée.

3.1.1 Aspects expérimentaux

L'étude de l'effet Hall quantique entier (EHQE) est historiquement un des premiers tests qui a permis de caractériser la nature ultra-relativiste (i.e. une masse de bande nulle) des électrons dans le graphène [NGM⁺05]. L'effet Hall quantique entier (EHQE) se révèle

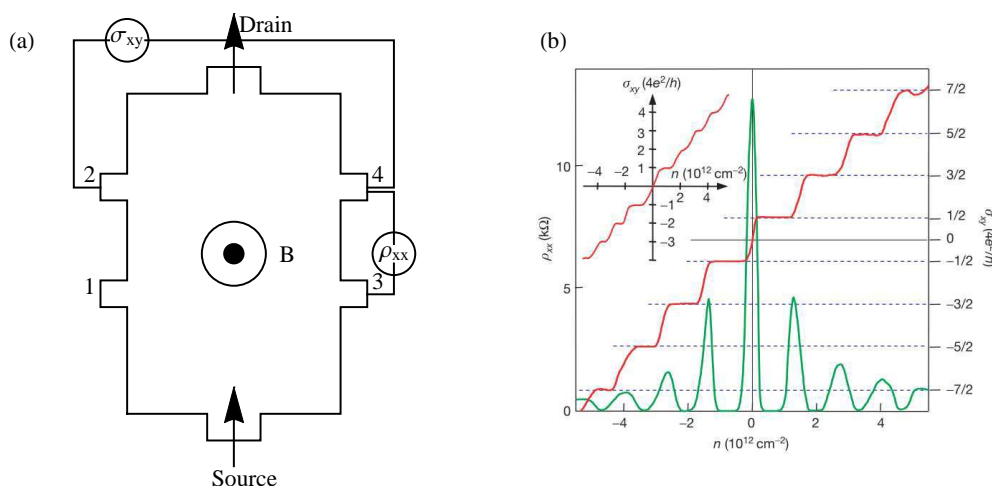


FIGURE 3.3 – Mesure de l'effet Hall quantique entier dans le graphène

Le schéma du montage typique de l'étude de l'effet Hall est présenté en (a). On observe, vu du dessus, un courant électronique en présence d'un champ magnétique B , orthogonal au plan de confinement des électrons. Sont mesurées, la résistance longitudinale ρ_{xx} et la conductivité transverse σ_{xy} . Le résultat des mesures pour ce montage, avec du graphène comme plan porteur d'électrons, est présenté en (b) (d'après [NGM⁺05]). On observe une annulation de ρ_{xx} et une saturation de σ_{xy} lorsque le niveau de Fermi, c'est à dire le dopage, se situe entre deux niveaux de Landau. La conductivité transverse σ_{xy} effectue des sauts quantifiés en $4e^2/\hbar$, entre les plateaux.

par une mesure de transport électronique, esquissée sur la figure 3.3. Une présentation détaillée du phénomène peut être trouvée dans [GL11], on se contentera ici de résumer les principaux aspects.

Dans l'expérience de la figure 3.3, on fait circuler un courant d'électrons de la source vers le drain, en présence d'un champ magnétique B , et on mesure la résistance longitudinale ρ_{xx} ainsi que la conductivité transverse σ_{xy} . Enfin, on peut faire varier le remplissage des niveaux de Landau par une tension de grille appliquée à l'échantillon. La signature de l'EHQE est double :

3.1. UN PREMIER EXEMPLE : LE GRAPHÈNE

- Lorsque le potentiel chimique est situé entre deux niveaux de Landau, la résistance longitudinale ρ_{xx} s'annule, indiquant que le transport s'effectue sans rétro-diffusion.
- Pour ce même remplissage, la conductance transverse σ_{xy} est quantifiée en multiples du quantum de conductance e^2/h . Chaque niveau de Landau entièrement rempli compte pour un quantum de conductance.

Ainsi la quantification de la conductivité transverse est une conséquence directe de la quantification des niveaux de Landau. On peut comprendre les résultats de cette expérience par l'image suivante. Lorsqu'un niveau de Landau est complètement rempli, le liquide électronique est incompressible. En effet, la dégénérescence de ces niveaux est directement proportionnelle à la surface du système et si on souhaite la réduire, un certain nombre d'électrons du niveau concerné deviennent excédentaires et doivent alors peupler le niveau de Landau suivant ce qui coûte une énergie finie, à savoir celle du gap entre les deux niveaux. Si on ajoute un électron au système, comme c'est le cas au niveau de la source de l'expérience 3.3, ce dernier ne peut donc pas pénétrer dans le volume, qui est alors isolant, et se retrouve confiné sur les bords de l'échantillon, qui sont donc eux conducteurs. Chaque niveau de Landau ajoutera un canal à cette conduction qu'on pourrait qualifier d'*holographique*, c'est à dire que l'information sur le volume est contenue dans la physique des états de bords. Par ailleurs, la présence du champ magnétique induit une chiralité dans le liquide électronique, et les électrons excédentaires ne peuvent ainsi tourner autour du volume que dans un sens précis. De cette manière, un bord de l'échantillon est associé à une direction de déplacement et l'autre bord à la direction inverse. La rétro-diffusion pour ces canaux est uniquement possible si un électron saute d'un bord à l'autre, ce qui est exclu pour les échantillons suffisamment grands. La résistance linéaire ρ_{xx} est alors nulle. La résistance transverse R_H , qui est elle proportionnelle à la différence de potentiels chimiques entre les deux bords, est alors non-nulle en présence d'un courant électrique.

Enfin, et c'est là l'apport essentiel de la topologie, le phénomène ne dépend pas des détails microscopiques de l'échantillon, comme l'arrangement ou la force des impuretés. Comme on l'a indiqué dans l'introduction, la quantification de la résistance (et conductance) de Hall est ainsi un phénomène de grande robustesse face aux perturbations. De

3.1. UN PREMIER EXEMPLE : LE GRAPHÈNE

même, cette image reste correcte en présence d'un potentiel périodique fort, à savoir celui du cristal sous-jacent, comme cela est expliqué dans l'article fondateur de Thouless *et al.* [TKNdN82]. C'est cette stabilité de l'effet qui est si remarquable et la conductivité transverse qui est directement proportionnelle à l'invariant topologique du système, le premier nombre de Chern, est ainsi utilisée comme outil de référence pour la détermination du quantum de conductance e^2/h [NIS95].

La présence de niveaux de Landau est donc fondamentale pour la compréhension des expériences de transport. La dégénérescence spatiale de ces derniers n'influe pas sur le système par contre la présence de degrés de liberté internes, comme le spin ou l'indice de vallée, se reflètent directement dans les mesures. Ainsi, sur la figure 3.3, chaque saut entre paliers de σ_{xy} est quantifié par $4e^2/h$ (un facteur 2 pour le spin, et un autre pour l'indice de vallée). La lecture de graphique 3.3(b) permet ainsi de déterminer le spectre des niveaux de Landau, qui se trouve être en accord avec 3.2.

Le spectre du graphène possède aussi une particularité, issue de la présence d'un niveau à énergie nulle. Ce niveau est caractérisé par l'*anomalie de parité* [Sem84], à savoir que les électrons ne résident que sur un sous-réseau triangulaire du graphène (A ou B), pour une vallée donnée. A dopage nul, le niveau de Landau $n = 0$ est donc à moitié rempli (les électrons occupent deux des quatre sous-branches de spin et de vallée), ce qui ne correspond généralement pas à une situation où l'on observe l'EHQE.¹ Le niveau $n = 0$ n'est, en effet rempli, ou vide, qu'en augmentant, ou en baissant, le dopage et induit ainsi un EHQE avec une conductance transverse de $\pm 2e^2/h$, le facteur 2 correspondant au nombre de sous-niveaux ajoutés ou soustraits par rapport au dopage nul. L'expérience est donc fortement influencée par la présence de ce niveau de Landau à énergie nulle.

3.1.2 Description semi-classique

On propose maintenant d'introduire l'approche semi-classique des niveaux de Landau, qui aide fortement à la compréhension du problème. Le formalisme est issu des travaux [Ons52, LK56]. La quantification en niveaux discrets peut en effet s'interpréter comme une

¹Afin d'observer un EHQE à zéro dopage [ZCZGK12] il faut évoquer une levée de dégénérescence, soit par des champs externes, comme l'effet Zeeman, soit par les interactions [Goe11].

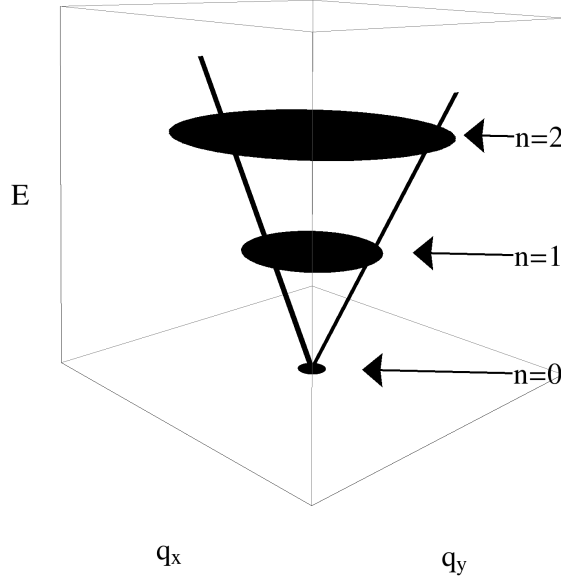


FIGURE 3.4 – La vision semi-classique

On a représenté ici, schématiquement les énergies E pour lesquelles l'orbite cyclotron, indiquée en noir, encercle une aire égale à $2\pi eBn$, comme cela est le cas pour le graphène. Les niveaux $n = 0, 1, 2$ sont ainsi indiqués.

conséquence de la dualité onde-corpuscule. Les orbites électroniques stationnaires, c'est à dire correspondant à une énergie propre, doivent ainsi décrire un multiple entier de la longueur d'onde de Broglie, $\lambda = h/p$, où p est le moment de l'électron. D'une manière équivalente, on peut aussi utiliser le critère de Bohr-Sommerfeld, à savoir que l'aire décrite par le mouvement dans l'espace des phases doit être un multiple entier de h .

Dans notre situation, l'argument impose que l'aire dans l'espace réciproque $A_C(E_n)$, enclose par le contour C d'une bande à énergie E_n doit satisfaire la condition de quantification

$$A_C(E_n) = \int_{E < E_n} d^2k = 2\pi eB/\hbar(n + \gamma), \quad (3.10)$$

où

$$\gamma = \frac{1}{2} - \gamma_B, \quad (3.11)$$

exhibe une contribution $1/2$ de l'indice de Maslov [MB72], et une contribution

$$\gamma_B = |W|/2, \quad (3.12)$$

issu du nombre d'enroulement W [FPGM10].

Afin de retrouver la relation $E_n = E(n)$, il faut inverser l'équation (3.10). Dans le cas du graphène, à basse énergie et autour d'un point de Dirac avec $W = \pm 1$, on trouve

$$A_C(E_n) = \pi \left(\frac{E_n}{\hbar v_f} \right)^2 = 2\pi eB/\hbar(n + 1/2 - 1/2) \quad (3.13)$$

soit

$$E_n = \hbar v_F \sqrt{2neB}, \quad (3.14)$$

en accord avec (3.8). Ici, nous avons utilisé la relation $E(\mathbf{q}) = \hbar v_F \mathbf{q}$ entre l'énergie et le vecteur d'onde. Pour des dispersions plus complexes, comme c'est le cas pour la bicouche avec correction trigonale, il n'est pas possible d'inverser l'équation (3.10) analytiquement. On peut néanmoins faire appel à un traitement numérique dans ces cas plus complexes. Ce calcul reste néanmoins semi-classique et ne doit pas être confondu avec la diagonalisation exacte du hamiltonien, à l'aide de l'algèbre des opérateurs \hat{a} et \hat{a}^\dagger .

On note ici l'importance du nombre d'enroulement ± 1 , qui permet de passer d'une relation en $(n + 1/2)$ à n . Dans la suite de ce chapitre, nous verrons plus en détail comment ce nombre d'enroulement assure que le niveau $n = 0$ est bien à énergie nulle. C'est aussi ce nombre d'enroulement qui est responsable expérimentalement de l'EHQE *anormal* (traduction de *anomalous*) du graphène, comme discuté dans la section précédente.

3.2 Le théorème de l'indice

La présence de ce niveau à énergie nulle peut aussi se comprendre comme le résultat du théorème de l'indice d'*Atiyah-Singer* [Fed96, EGH80, Nak03]. Ce théorème relie les propriétés algébriques d'un opérateur à celles topologiques de la variété qui l'abrite, et a déjà été appliqué avec succès dans différentes branches de la physique [Nak03, EGH80], notamment en matière condensée avec [AC79, KP08]. Ce théorème est particulièrement puissant de par sa grande généralité. Ainsi assure-t-il que la dégénérescence d'un niveau de Landau est donnée par le flux total (en unité de h/e) même pour le cas d'une répartition inhomogène du flux, c'est à dire un champ magnétique variable dans l'espace.

3.2.1 Une introduction au théorème

De notre point de vue, la quantité algébrique en question sera une partie, dite topologiquement protégée, de la dégénérescence du niveau à énergie nulle, et la quantité topologique le nombre d'enroulement. Plus précisément, si le hamiltonien s'écrit

$$h(\mathbf{q}) = \begin{pmatrix} 0 & f(\mathbf{q}) \\ f^*(\mathbf{q}) & 0 \end{pmatrix}, \quad (3.15)$$

alors la quantité algébrique $\text{Ind}[f]$ sera la dimension du noyau de $f(\Pi)$ moins celle de $f^\dagger(\Pi)$,

$$\text{Ind}[f] \equiv \dim(\text{Ker}[f]) - \dim(\text{Ker}[f^\dagger]). \quad (3.16)$$

On rappelle que le noyau d'un opérateur, $\text{Ker}(f)$, est le sous-espace des états annulés par l'action de f . La quantité topologique sera le nombre d'enroulement total W , introduit dans le premier chapitre de cette thèse. Le théorème de l'indice stipule alors,

$$\text{Ind}[f] = W. \quad (3.17)$$

Dans le cas du graphène à basse énergie, soit pour le hamiltonien (3.5), les opérateurs en question sont $\Pi = \Pi_x - i\Pi_y$ et $\Pi^\dagger = \Pi_x + i\Pi_y$. De par l'équation (3.3), on sait que $\text{Ker}[\Pi] = \text{Ker}[\hat{a}]$. Si on cherche les états qui annulent \hat{a} , on ne trouve que $|0\rangle$ car $\hat{a}|0\rangle = 0$. La dimension du noyau considéré est donc 1, $\dim(\text{Ker}[\Pi]) = 1$. De même $\text{Ker}[\Pi^\dagger] = \text{Ker}[\hat{a}^\dagger]$, mais pour cet opérateur $\hat{a}^\dagger|\psi\rangle = 0$ uniquement pour $|\psi\rangle = 0$ et ainsi la dimension du noyau de Π^\dagger est nulle, $\dim(\text{Ker}[\Pi^\dagger]) = 0$. l'indice de Π vaut donc

$$\text{Ind}[\Pi] = \dim(\text{Ker}[\Pi]) - \dim(\text{Ker}[\Pi^\dagger]) = 1. \quad (3.18)$$

Cette valeur unité est en accord avec le théorème (3.17) car le nombre d'enroulement est bien de 1 pour un cône de graphène. De même on trouve que

$$\text{Ind}[\Pi^\dagger] = \dim(\text{Ker}[\Pi^\dagger]) - \dim(\text{Ker}[\Pi]) = -1, \quad (3.19)$$

car dans ce cas le hamiltonien (3.15) possède bien un nombre d'enroulement de -1 .

A noter que le théorème fournit une information sur $\dim(\text{Ker}[f]) - \dim(\text{Ker}[f^\dagger])$, et non sur la dégénérescence totale du hamiltonien, c'est à dire $\dim(\text{Ker}[f]) + \dim(\text{Ker}[f^\dagger])$. Tous les niveaux à énergie nulle ne sont donc pas topologiquement protégés par le théorème

3.2. LE THÉORÈME DE L'INDICE

de l'indice. Néanmoins, dans le cas du graphène, on remarque que le noyau de Π^\dagger est vide ($\Pi^\dagger \rightarrow \sqrt{2}/l_B a^\dagger$), alors le théorème implique que la dégénérescence de l'état à énergie nulle du hamiltonien (3.5) est

$$\dim(\text{Ker}[h]) = \dim(\text{Ker}[\Pi^\dagger]) + \dim(\text{Ker}[\Pi]) = W + 0 = 1. \quad (3.20)$$

Le niveau à énergie nulle est donc dégénéré une fois, suite au nombre d'enroulement $W = 1$. Cette valeur ne tient pas compte de la dégénérescence macroscopique n_B des niveaux de Landau, car notre étude s'est concentrée sur l'espace réciproque. On peut considérer que notre résultat est valable pour une orbite cyclotron, et sommer sur le nombre d'orbites à la fin du calcul.

3.2.2 Propriétés mathématiques de l'indice

On souhaite maintenant appliquer le théorème de l'indice à des cas plus complexes analysés en détails dans la suite de ce chapitre. A cette fin, nous allons faire usage de deux propriétés essentielles de l'indice défini en (3.16), à savoir la *propriété logarithmique* et la *stabilité*, [Fed96, EGH80].

On s'intéresse d'abord à la propriété logarithmique. Pour cela on rappelle, que le logarithme vérifie

$$\ln(a \cdot b) = \ln(a) + \ln(b). \quad (3.21)$$

De manière similaire, l'indice de $f \cdot g$ vérifie

$$\text{Ind}[f \cdot g] = \text{Ind}[f] + \text{Ind}[g]. \quad (3.22)$$

On peut alors montrer par récurrence que

$$\text{Ind}[f^p] = p \cdot \text{Ind}[f]. \quad (3.23)$$

Ainsi

$$\text{Ind}[\Pi^{p\dagger}] = p \cdot \text{Ind}[\Pi^\dagger] = p \cdot W = p. \quad (3.24)$$

On peut maintenant utiliser l'additivité de l'indice pour résoudre des hamiltoniens d'ordres supérieurs. Considérons ici le cas suivant

$$h = \Lambda \begin{pmatrix} 0 & \Pi^{p\dagger} \\ \Pi^p & 0 \end{pmatrix}, \quad (3.25)$$

3.2. LE THÉORÈME DE L'INDICE

qui induit

$$\text{Ind}[\Pi^p] = p \cdot \text{Ind}[\Pi^\dagger] = p \cdot W = p, \quad (3.26)$$

qui peut aussi se vérifier si on précise que le hamiltonien (3.25) possède un nombre d'enroulement de $\pm p$ pour ses bandes. Dans le cas de la bicouche de graphène, équation (2.25), à basse énergie et pour une vallée, $p = 2$ et on s'attend ainsi à une dégénérescence double par rapport à celle de la monocouche, ce qui est effectivement le cas comme nous le verrons dans la section 3.4.

La deuxième propriété essentielle de l'indice est la stabilité. Cette dernière indique que si g est une fonction bornée par f , c'est à dire que $g \leq Cf$ pour des valeurs suffisamment grandes de \mathbf{q} et où C est une constante, alors

$$\text{Ind}[f + g] = \text{Ind}[f]. \quad (3.27)$$

L'indice est donc stable par rapport à toute une classe de perturbations (les fonctions g bornées par f).

Les deux propriétés précédentes permettent de calculer le nombre d'états topologiquement protégés pour toute une famille de hamiltoniens du type

$$h = \begin{pmatrix} 0 & f \\ f^\dagger & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.28)$$

Supposons que le hamiltonien (3.28) décrive la physique de N points de Dirac $+1$ et M points -1 , situés respectivement aux positions complexes α_i et β_j . Alors

$$f = \prod_{i=1}^N (\Pi - \alpha_i) \prod_{j=1}^M (\Pi^\dagger - \beta_j^*). \quad (3.29)$$

Ici, f est simplement le produit d'opérateurs qui génèrent les cônes de Dirac (Π ou Π^\dagger) en diverses positions. Notons que l'on peut créer des points de Dirac de nombre d'enroulement quelconque en fusionnant le nombre suffisant de points de Dirac à une position donnée.

On calcule l'indice de f . On utilise d'abord la propriété logarithmique

$$\text{Ind}[f] = \sum_{i=1}^N \text{Ind}[\Pi - \alpha_i] + \sum_{j=1}^M \text{Ind}[\Pi^\dagger - \beta_j^*], \quad (3.30)$$

puis la stabilité

$$\text{Ind}[f] = \sum_{i=1}^N \text{Ind}[\Pi] + \sum_{j=1}^M \text{Ind}[\Pi^\dagger] = N - M, \quad (3.31)$$

où on a utilisé les équations (3.18) et (3.19) dans la dernière ligne. On note alors que les $|N - M|$ états protégés correspondent bien au nombre d'enroulement total de (3.28).

3.2.3 Dégénérescence maximale et dégénérescence topologiquement protégée

Comme indiqué précédemment, le nombre maximal de niveaux à énergie nulle, pour un hamiltonien du type (3.28), est donné par

$$\dim(\text{Ker}[f]) + \dim(\text{Ker}[f^\dagger]) \neq \text{Ind}[f]. \quad (3.32)$$

En effet les vecteurs propres de (3.28) s'écrivent

$$\begin{pmatrix} |\psi^+\rangle \\ 0 \end{pmatrix} \quad \text{ou} \quad \begin{pmatrix} 0 \\ |\psi^-\rangle \end{pmatrix}. \quad (3.33)$$

où $|\psi^+\rangle$ et $|\psi^-\rangle$ font partis du noyau de $f(\Pi)$, et $f^\dagger(\Pi)$ respectivement. Afin d'illustrer ce point, considérons le nombre maximal d'états à énergie nulle d'un opérateur (3.29). Il est donné par

$$\dim(\text{Ker}[f]) + \dim(\text{Ker}[f^\dagger]) = N + M = \sum_i |W_i| = W_t, \quad (3.34)$$

à savoir le nombre total de points de Dirac, indépendamment de la valeur du nombre d'enroulement associé. Afin de se convaincre de l'équation (3.34), nous considérons que les positions des points de Dirac α_i et β_j de l'opérateur (3.29) sont bien séparées dans l'espace réciproque. On peut alors développer le hamiltonien autour de chacun de ces points, ce qui donne N hamiltoniens du type

$$h^i(\mathbf{q}) = \hbar v_F^i \begin{pmatrix} 0 & \mathbf{q} \\ \mathbf{q}^* & 0 \end{pmatrix}, \quad (3.35)$$

et M hamiltoniens du type

$$h^j(\mathbf{q}) = \hbar w_F^j \begin{pmatrix} 0 & \mathbf{q}^* \\ \mathbf{q} & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.36)$$

A basse énergie chaque hamiltonien possède ainsi un spectre du type (3.8), ce qui fournit $N + M$ niveaux de Landau à énergie nulle.

Par opposition, l'indice de f s'écrit

$$\dim(\text{Ker}[f]) - \dim(\text{Ker}[f^\dagger]) = \text{Ind}[f] = \sum_i W_i = W_p. \quad (3.37)$$

3.3. LE GRAPHÈNE SOUS CONTRAINTE

C'est cet indice qui est relié aux propriétés topologiques de f , à savoir le nombre d'enroulement total du hamiltonien, et c'est donc cet indice qui fournit le nombre d'états topologiquement protégés. Dans le modèle (3.29), ceci se voit directement si l'on considère la coïncidence de deux zéros de chiralité opposée. En effet, pour $\alpha_i = \beta_i$, on aura une forme $|\mathbf{q}|^2 \sim \Pi^\dagger \Pi$ qui ne supporte pas de niveaux à énergie nulle.

On verra, plus loin dans ce chapitre comment décrire la transition entre le nombre maximal de niveaux à énergie nulle et le nombre de niveaux topologiquement protégés, et on spécifiera les conditions concernant la séparation entre les points de Dirac et le champ magnétique qui permettent d'obtenir $N + M$ niveaux à énergie nulle.

3.3 Le graphène sous contrainte

Avant de discuter la bicouche sous champ magnétique, nous rappelons ici le spectre des niveaux de Landau d'une seule couche de graphène, sous contrainte uniaxiale, décrite par le hamiltonien effectif (2.20) discuté au chapitre 2,

$$h = \begin{pmatrix} 0 & \frac{\hbar^2 q_x^2}{2m} + \Delta - i\hbar c q_y \\ \frac{\hbar^2 q_x^2}{2m} + \Delta + i\hbar c q_y & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.38)$$

On rappelle que ce dernier représente la dispersion des deux cônes, plus ou moins proches suivant la valeur de $\Delta \leq 0$. Ces deux cônes possèdent des nombres d'enroulements opposés, $+1$ et -1 . Pour $\Delta = 0$, les deux cônes fusionnent, et un gap s'ouvre pour $\Delta \geq 0$.

Le spectre des niveaux de Landau a été calculé numériquement, dans [DPM08, MPFG09a, MPFG09b]. Ici, on se contentera de discuter les résultats de la figure 3.5, pour motiver l'analyse d'autres modèles faisant intervenir deux, ou plus, points de Dirac. Le paramètre adimensionné qui dirige la transition est

$$\delta = \frac{\Delta}{\left(\frac{m\omega_c c^2}{2}\right)^{1/3}}, \quad (3.39)$$

avec $\omega_c = eB/m$, la pulsation cyclotron.

Le spectre se lit ainsi

- Pour $\delta \ll -1$, on sonde la physique des cônes de Dirac indépendants, avec des niveaux qui dispersent en $\pm \hbar v \sqrt{2neB}$, [MPFG09a, MPFG09b], en accord avec notre modèle

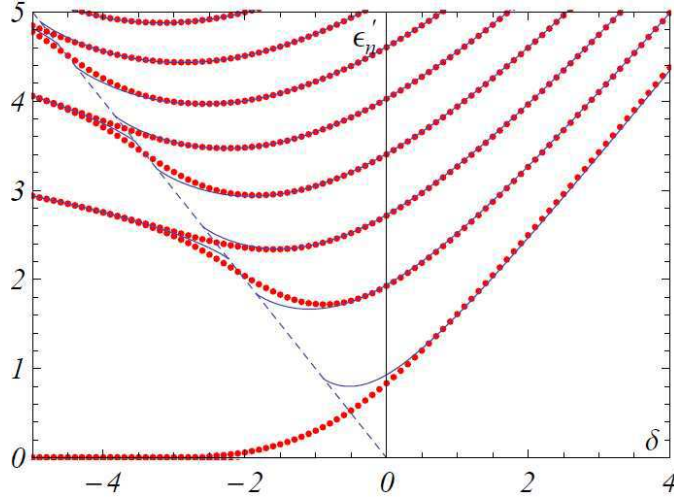


FIGURE 3.5 – Spectre des niveaux de Landau pour le hamiltonien effectif

On présente ici le spectre des niveaux de Landau pour le modèle (3.38). Seule la partie positive est visible, la partie négative étant strictement symétrique. Pour $\delta < 0$, le niveau à énergie nulle est doublement dégénéré, ainsi que les autres niveaux. Les lignes en pointillé ont été obtenues par la diagonalisation exacte du hamiltonien (3.38) sous champ magnétique, alors que les traits fins représentent les niveaux obtenus par l'analyse semi-classique [MPFG09a, MPFG09b]. En augmentant ce paramètre, les deux cônes de Dirac interagissant par le biais du champ magnétique et on observe une levée de dégénérescence pour les niveaux à énergie nulle, et les autres. Pour $\delta > 0$, il n'y a plus aucun niveau à énergie nulle, et le reste des niveaux dispersent selon une loi classique en $\propto (n + 1/2)B$.

jouet (3.29) pour $M = N = 1$. Ici, la vitesse v est la moyenne géométrique entre c et $c_x = \sqrt{-2\Delta/m}$: $v = \sqrt{c_x c}$. Les niveaux sont doublement dégénérés de par la présence de deux cônes. Ces résultats peuvent se redémontrer par un calcul semi-classique, si on développe le hamiltonien (3.38) autour de chacun des deux points de Dirac.

- En augmentant $\delta \leq 0$, les deux cônes commencent à se coupler par l'intermédiaire du champ magnétique, même s'ils restent séparés à basse énergie pour $B = 0$. La double dégénérescence des niveaux est progressivement levée. Suivant [MPFG09a, MPFG09b], on peut estimer cette levée de dégénérescence par une loi $e^{-\alpha|\Delta|^{3/2}/B}$, où α est une constante numérique. Cette transition, dite de *Lifshitz*, correspond, dans l'approche semi-classique à la différence entre une énergie où on observe deux orbites cyclotrons, une pour chaque cône, et une énergie où les deux orbites ont fusionné, au

niveau du point selle qui relie les deux cônes, voir figure 3.6. Cette transition est elle

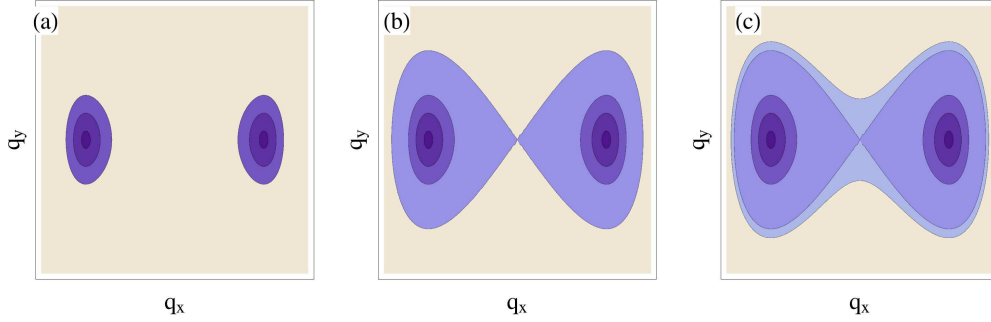


FIGURE 3.6 – Transition de Lifshitz

On a tracé les contours iso-énergétiques de (3.38) dans trois situations. En (a), l'énergie est inférieure à celle du point selle qui relie les deux cônes. On observe alors deux orbites séparées. En (b), l'énergie est exactement au niveau du point selle et les deux orbites précédentes fusionnent, en épousant une forme de lemniscate. C'est la transition de Lifshitz. Enfin, en (c), l'énergie est supérieure au point selle, et on observe une seule orbite.

aussi topologique, traitant de la nature connexe de la surface de Fermi, mais ne sera pas plus discutée dans cette thèse.

- A la transition, $\delta = 0$, les niveaux varient en $[(n + 1/2)\omega_c]^{2/3}$. Cette loi d'échelle, un peu particulière, se justifie par la forme hybride du spectre pour $\Delta = 0$. On rappelle, en effet, que ce dernier est linéaire suivant q_y , et quadratique suivant q_x , cf. [DPM08].
- Enfin, pour $\delta \geq 0$, on retrouve la dispersion classique des niveaux de Landau pour un hamiltonien quadratique, $\sim \pm(n + 1/2)\omega_c$. Encore une fois, l'approche semi-classique permet de retrouver ces résultats.

Intéressons nous maintenant aux niveaux zéros.

- Pour $\delta \ll 0$, les cônes de Dirac sont découplés et chacun abrite un niveau à énergie nulle, avec donc une dégénérescence double due à la paire de points de Dirac.
- Si on diminue $|\delta|$, alors les deux cônes se couplent par l'intermédiaire du champ magnétique et on observe une levée de dégénérescence des niveaux à énergie nulle, qui commencent à disperser avec le champ B .

- Pour $\delta \geq 0$, il ne reste plus aucun niveau zéro car le spectre possède un gap, même en l'absence de champ magnétique.

Ce résultat est à comparer avec la fusion $(+1) + (-1) \rightarrow (0)$ du modèle (3.38). La topologie du modèle sans champ permet de découpler les bandes par une variation de Δ . De manière similaire, la topologie sous champ permet de lever la dégénérescence du niveau à énergie nulle, par le biais de l'intensité du champ magnétique. En effet, comme les deux points de Dirac ont un nombre d'enroulement opposés, on a $M - N = 0$ niveaux topologiquement protégés.

3.3.1 Le théorème de l'indice

L'exemple de la monocouche de graphène sous contrainte est le premier où il est indispensable de distinguer entre le nombre maximum d'états à énergie nulle W_t , équation (3.34) et le nombre d'états topologiquement protégés W_p , équation (3.37). Nous nous proposons alors d'analyser cet exemple en détail à l'aide du théorème de l'indice.

Comme nous l'avons vu, on est confronté à une dégénérescence de $W_t = |-1| + |1| = 2$, à faible champ, et de $W_p = |-1 + 1| = 0$ à plus fort champ. Le processus physique à l'origine de cette transition entre W_t et W_p est celui du couplage magnétique entre les états de nombres d'enroulement positifs et ceux négatifs. D'après les discussions précédentes, on s'attend, pour le modèle (3.38), à un indice $\text{Ind}[f] = 0$. On peut redémontrer ce résultat comme suit.

On commence par récrire la dispersion

$$\frac{q_x^2}{2m} + \Delta - icq_y = \left(\frac{q_x}{\sqrt{2m}} - i \frac{c}{2\sqrt{-\Delta}} q_y - \sqrt{-\Delta} \right) \left(\frac{q_x}{\sqrt{2m}} + i \frac{c}{2\sqrt{-\Delta}} q_y + \sqrt{-\Delta} \right). \quad (3.40)$$

D'après la propriété logarithmique de l'indice, on obtient

$$\text{Ind}[f] = \text{Ind} \left[\frac{q_x}{\sqrt{2m}} - i \frac{c}{2\sqrt{-\Delta}} q_y - \sqrt{-\Delta} \right] + \text{Ind} \left[\frac{q_x}{\sqrt{2m}} + i \frac{c}{2\sqrt{-\Delta}} q_y + \sqrt{-\Delta} \right]. \quad (3.41)$$

On utilise maintenant la stabilité de l'indice,

$$\text{Ind} \left[\frac{q_x}{\sqrt{2m}} - i \frac{c}{2\sqrt{-\Delta}} q_y - \sqrt{-\Delta} \right] = \text{Ind} \left[\frac{q_x}{\sqrt{2m}} - i \frac{c}{2\sqrt{-\Delta}} q_y \right] = -1, \quad (3.42a)$$

$$\text{Ind} \left[\frac{q_x}{\sqrt{2m}} + i \frac{c}{2\sqrt{-\Delta}} q_y + \sqrt{-\Delta} \right] = \text{Ind} \left[\frac{q_x}{\sqrt{2m}} + i \frac{c}{2\sqrt{-\Delta}} q_y \right] = +1, \quad (3.42b)$$

où dans les dernières égalités on a utilisé $\text{Ind}[q] = -\text{Ind}[q^*] = 1$, à un changement d'échelle près. Suite à l'utilisation de la stabilité de l'indice, on obtient

$$\text{Ind}[f] = \text{Ind} \left[\frac{q_x}{\sqrt{2m}} - i \frac{c}{2\sqrt{-\Delta}} q_y \right] + \text{Ind} \left[\frac{q_x}{\sqrt{2m}} + i \frac{c}{2\sqrt{-\Delta}} q_y \right] = 0, \quad (3.43)$$

en accord avec notre prédiction.

3.3.2 Une approche heuristique

Comment comprendre l'évolution des niveaux zéros dans ce modèle ?

Dans une approche qui sera formalisée plus loin dans ce chapitre, on peut apprécier l'effet du champ magnétique B comme un flou (brouillage des moments) qui s'installe sur la première zone de Brillouin. On rappelle pour cela que les opérateurs de moments sous champ magnétique vérifient

$$[\Pi_x, \Pi_y] = -i \frac{\hbar^2}{l_B^2}, \quad (3.44)$$

transformant ainsi l'espace réciproque en une version non commutative, cf. [Con95]. On insiste sur le fait que même si l'invariance par translation est perdue en présence d'un champ magnétique, il est toujours possible de considérer une première zone de Brillouin pour les centres de guidage des orbites cyclotron [GL11]. Comme pour l'espace des phases (x, p) d'une particule uni-dimensionnelle, où l'espace est pavé par des surfaces de l'ordre de la constante de Planck, la notion de points est mise à mal, et par la même, celle de courbe.

On peut retrouver des notions proches en s'inspirant de l'optique quantique. Les points sont remplacés par des tâches de taille $\hbar^2/l_B^2 \propto B$, à la manière des états cohérents, et les courbes par les surfaces tracées par ces tâches. On parlera de *brouillage magnétique*. Si le champ magnétique est faible, alors la *tâche* sera petite et il sera, par exemple, toujours possible de distinguer un point de Dirac d'un autre, comme sur la figure 3.7. A l'inverse, si le champ est fort, le brouillage magnétique empêche de résoudre séparément les deux points de Dirac du modèle. Cette transition est proche de la transition de Lifshitz, décrite précédemment, où des bouts déconnectés de la surface de Fermi fusionnent en une seule surface. Le champ magnétique induit une incertitude sur l'énergie par le biais du principe de Heisenberg pour une pulsation cyclotron ω_C .

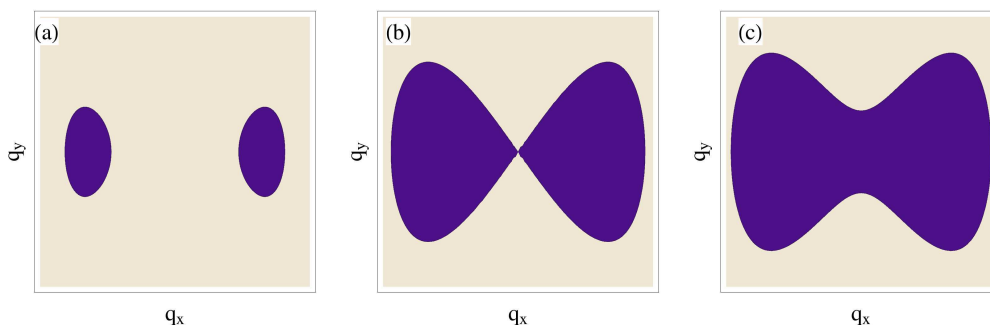


FIGURE 3.7 – Illustration du brouillage magnétique

On a représenté en (a), les deux "tâches" magnétiques, de taille l_B^{-1} , qui correspondent aux deux points de Dirac. En (b), l'étalement des tâches est juste suffisant pour coupler les deux points. En (c), on ne peut plus distinguer les deux points séparément. Cette transition est à comparer avec la transition de Lifshitz, Figure 3.6.

Peut-on alors comprendre l'évolution des niveaux zéros à l'aide du brouillage magnétique? Dans le cas d'un brouillage faible, c'est à dire pour un champ magnétique faible, où il est encore possible de distinguer un point de Dirac d'un autre, on pourra étudier le système avec deux hamiltoniens du type (3.5). Chaque hamiltonien possédant un nombre d'enroulement de ± 1 , on observe une dégénérescence double du niveau zéro, un pour chaque point de Dirac. Si on s'intéresse aux trajectoires iso-énergétiques, pour un faible brouillage à basse énergie, on peut distinguer deux trajectoires, une autour de chaque cône, figure 3.7(a), alors que pour un brouillage fort, figure 3.7(c), il ne sera plus possible de distinguer une trajectoire de l'autre. Il faut alors faire appel au modèle (3.38). Ce dernier exhibe un nombre d'enroulement total de zéro, les deux points de Dirac ayant des nombres d'enroulements opposés (± 1). La conséquence de ce nombre topologique nul est l'absence de niveau à énergie zéro protégé. En effet, si $W = 0$, l'équation (3.11) vérifie $\gamma = 1/2$ et non plus $\gamma = 0$, ce qui implique que $E_n \sim (n + 1/2)$ soit toujours à énergie finie.

Essayons d'estimer la valeur du champ magnétique nécessaire pour observer la levée de dégénérescence des niveaux zéros dans le graphène. Pour cela, on considère que le brouillage magnétique devient efficace dès lors que l'inverse de la longueur magnétique l_B^{-1} est de l'ordre de la distance entre les deux cônes de Dirac, soit $\sim 1/a$, où a est la constante du réseau nid d'abeille. Pour un cas sans contrainte, on peut estimer numériquement que le

3.4. LA BICOUCHE DE GRAPHÈNE

champ magnétique critique devrait être de l'ordre de 10^4T . Cette valeur étant irréaliste expérimentalement parlant, on est en droit de considérer les deux cônes de Dirac du graphène comme indépendants.

Si on souhaite néanmoins observer cette physique de levée de dégénérescence, on pourrait envisager l'étude du graphène sous contrainte, ou mieux du cristal moléculaire plus mou de $\alpha - \text{BEDT}$, où les points de Dirac peuvent se déplacer plus facilement sous l'effet d'une pression.

3.4 La bicouche de graphène

Si on suit le résultat du théorème de l'indice, on devrait pouvoir observer une différence entre la monocouche et la bicouche de graphène. En effet, pour cette dernière le hamiltonien

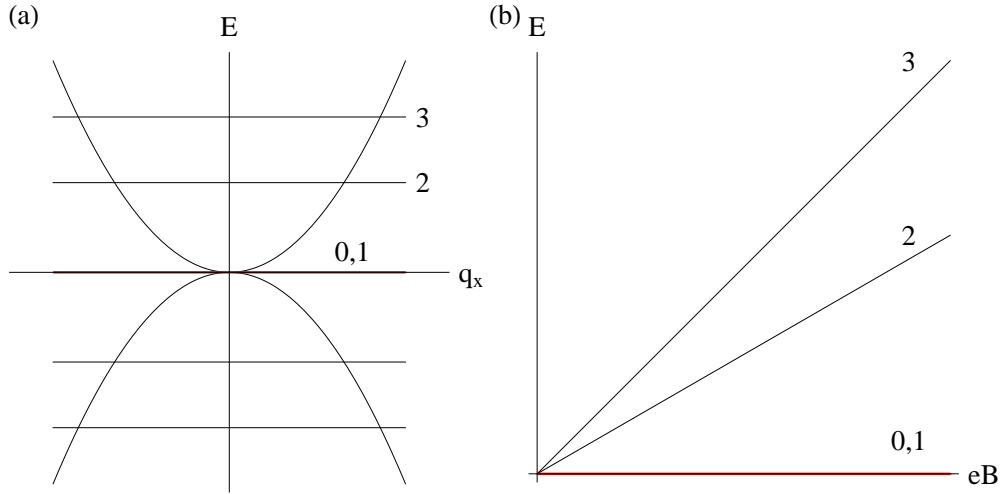


FIGURE 3.8 – Niveaux de Landau de la bicouche de graphène

La dispersion de la bicouche de graphène est représentée en (a), avec les niveaux de Landau associés, pour $n = 0, 1, 2, 3$, et un champ B fixé. On observe une loi en $\sqrt{n(n-1)}$. La dispersion suivant le champ magnétique est indiquée en (b), pour les énergies positives, où on peut constater une loi linéaire pour $n = 2, 3$, et une absence de dispersion pour les niveaux à énergie nulle $n = 0, 1$.

$$h = \frac{\hbar^2}{2m^*} \begin{pmatrix} 0 & q^{*2} \\ q^2 & 0 \end{pmatrix}, \quad (3.45)$$

induit un nombre d'enroulement $W = \pm 2$. On obtient alors la relation suivante

$$\dim(\text{Ker}[h]) = \text{Ind}[h] = \dim(\text{Ker}[\Pi^{2\dagger}]) = W = 2, \quad (3.46)$$

3.4. LA BICOUCHE DE GRAPHÈNE

qui peut facilement être vérifiée par une diagonalisation exacte du hamiltonien (3.45), après la substitution (3.63). En effet, on trouve pour le spectre des niveaux de Landau

$$E_{\lambda,n} = \lambda \hbar \omega_C \sqrt{n(n-1)}, \quad (3.47)$$

avec $\omega_C = eB/m^*$. On note alors la présence d'un niveau à énergie nulle doublement dégénéré pour $n = 0$ et $n = 1$, les états propres correspondants étant

$$\begin{pmatrix} 0 \\ |0\rangle \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} 0 \\ |1\rangle \end{pmatrix}, \quad (3.48)$$

qui engendrent le sous-espace $\text{Ker}[h]$. Remarquons que l'équation (3.46) peut aussi s'obtenir en faisant appel à la propriété logarithmique de l'indice.

3.4.1 Aspects expérimentaux

De la même manière que pour la monocouche de graphène, la bicouche de graphène est un système électronique bidimensionnel qui observe un EHQE lorsqu'on effectue une mesure de transport sous champ magnétique. Les résultats de la mesure originale du groupe de Manchester [NMM⁺06] sont représentés sur la figure 3.9. On observe, à champ magnétique fixé et en faisant varier la densité électronique pour une tension de grille, des sauts de $4e^2/h$, figure 3.9, en accord avec la quadruple dégénérescence de spin et de vallée, pertinente autant pour la bicouche que pour la monocouche de graphène. La seule exception à cette règle s'observe au point de neutralité de charge où se trouve le niveau à énergie nulle. On y remarque un saut de $8e^2/h$, c'est à dire double par rapport aux sauts à dopage non-nul. Ceci s'explique par la présence simultanée des niveaux $n = 0$ et $n = 1$ à énergie nulle, ce qui donne une dégénérescence supplémentaire double, en accord avec le théorème de l'indice et le traitement quantique de la section précédente.

3.4.2 Approche semi-classique

Dans un soucis de complétude, on présente ici aussi un argument semi-classique entre les modes zéros et les nombres d'enroulement [dGGM12]. Si on considère les états propres du hamiltonien

$$h = \Lambda \begin{pmatrix} 0 & q^{*p} \\ q^p & 0 \end{pmatrix}, \quad (3.49)$$

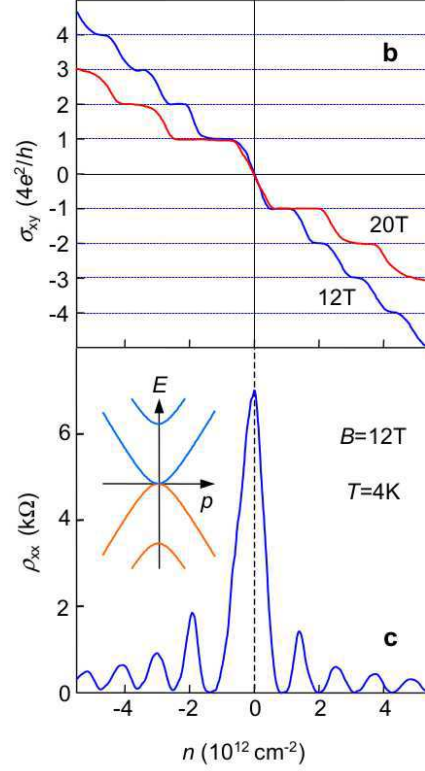


FIGURE 3.9 – Effet Hall quantique entier pour la bicouche de graphène d’après [NMM⁺06]. On observe des sauts de la conductance transverse σ_{xy} de $4e^2/h$, sauf pour le niveau à énergie nulle qui est doublement dégénéré, d’où un saut de $8e^2/h$.

où Λ est une constante de dimension énergie \times longueur ^{p} , on obtient le spectre

$$E_n(B) = \pm \Lambda (2eB)^{p/2} \sqrt{n(n-1) \dots (n-p+1)}. \quad (3.50)$$

En accord avec les discussion précédentes, on trouve ainsi p niveaux à énergie nulle $n = 0 \dots p-1$, avec les états propres

$$\begin{pmatrix} 0 \\ |n\rangle \end{pmatrix}. \quad (3.51)$$

Si on développe cette formule, là où le formalisme semi-classique fonctionne, c’est à dire pour des énergies non nulles, on obtient les niveaux

$$E_n(B) \simeq \pm \Lambda \left[2eB \left(n + \frac{1}{2} - \frac{p}{2} \right) \right]^{p/2}. \quad (3.52)$$

Cela correspond exactement à la quantification semi-classique de (3.10) si on identifie p avec le nombre d’enroulement W dans (3.11), de même qu’avec le théorème de l’indice

$\text{Ind}[\Pi^p] = p$, équation (3.24).

3.5 La bicouche de graphène désaxée

Si c'est le nombre d'enroulement total des cônes de Dirac qui détermine la présence, ou l'absence, d'un niveau de Landau à énergie nulle alors le modèle effectif de la bicouche de graphène désaxée doit être radicalement différent du graphène sous contrainte, même si leurs spectres se ressemblent énormément à champ nul. En effet, on rappelle que dans ce modèle on trouve deux cônes mais de nombres d'enroulements identiques, et non opposés.

Si on se réfère au hamiltonien de basse énergie, introduit au chapitre précédent, équation (2.43)

$$h = -\frac{\hbar^2 v_F^2}{\tilde{t}_\perp} \begin{pmatrix} 0 & q^{*2} - (\Delta K^*/2)^2 \\ q^2 - (\Delta K/2)^2 & 0 \end{pmatrix}, \quad (3.53)$$

alors le hamiltonien sous champ s'écrit

$$h_B = \omega_c \begin{pmatrix} 0 & a^2 - \alpha^{*2} \\ a^{\dagger 2} - \alpha^2 & 0 \end{pmatrix}, \quad (3.54)$$

avec $\omega_c = 2\hbar^2 v_F^2 eB/\tilde{t}_\perp$ et $\alpha = \Delta K l_B/(2\sqrt{2})$. Ici, il n'y a pas d'ambiguïté sur l'écriture en terme d'opérateurs de création et d'annihilation. De par le théorème de l'indice on s'attend à

$$\text{Ker}[h_B] = \text{Ind}[a^2 - \alpha^{*2}] = 2, \quad (3.55)$$

et donc à un niveau à énergie nulle doublement dégénéré (en omettant la dégénérescence de spin et de vallée), comme pour la bicouche de graphène avec empilement Bernal. Par cet exemple, on comprend l'importance physique de la stabilité de l'indice. En effet, et d'après le hamiltonien (3.54), le seul effet du défaut d'empilement est l'apparition d'un terme constant α^2 . Ce terme étant borné par \mathbf{q}^2 , l'indice reste donc inchangé et ce quelque soit la déformation α^2 . Comme ces perturbations sont topologiquement triviales on obtient bien, pour la bicouche désaxée, la même dégénérescence du niveau de Landau à énergie nulle que pour la bicouche Bernal.

La hamiltonien (3.54) a été diagonalisé numériquement, et on présente le spectre des niveaux de Landau sur la figure 3.10.

Le spectre se lit ainsi :

3.5. LA BICOUCHE DE GRAPHÈNE DÉSAITÉE

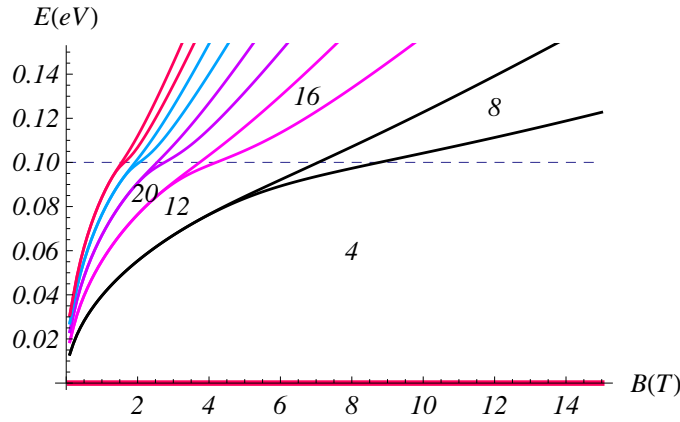


FIGURE 3.10 – Spectre des niveaux de Landau pour le hamiltonien effectif de la bicouche désaxée

On observe sur la figure la présence d'un niveau à énergie nulle, doublement dégénéré, et qui ne disperse pas avec le champ magnétique. Les autres niveaux dispersent en \sqrt{nB} pour des énergies inférieures au point selle (ici fixé à 0.1eV), puis en nB au-dessus du point selle. On observe alors une levée de la double dégénérescence de ces niveaux par une transition de Lifshitz.

- Pour de faibles champs, les points de Dirac restent bien séparés et on observe bien une dispersion en $\sim \sqrt{nB}$, caractéristique des cônes de Dirac. Ces niveaux sont ainsi huit fois dégénérés, de par les indices bivalués de couche, spin et vallée. Pour les hautes énergies (n grand), on aperçoit une levée de dégénérescence lorsque les niveaux de Landau sont environ à la même énergie que le point selle reliant les deux points de Dirac (à 0.1eV sur la figure 3.10). Le spectre est ainsi identique à celui de la monocouche de graphène sous contrainte.
- La différence entre la monocouche de graphène sous contrainte et la bicouche désaxée se révèle lorsqu'on augmente le champ magnétique. Les deux cônes se parlent via le couplage magnétique, et on assiste à une levée de dégénérescence des niveaux de Landau avec n petit. De plus, la dispersion est en $\sim nB$, au-dessus du point selle (à environ 100meV sur la figure 3.10), en accord avec la dispersion parabolique à plus haute énergie du modèle (3.54). Autant que ceci est semblable à la monocouche graphène sous contrainte, on remarque que le niveau à énergie nulle ne disperse pas avec le champ magnétique et garde sa double dégénérescence, pour toutes les valeurs de B .

On insistera bien sur le fait que, mēme si les spectres à champ nul entre le graphène sous contrainte et la bicouche désaxée sont relativement semblables, les spectres sous champ magnétique, beaucoup plus sensible aux propriétés topologiques, sont radicalement différents.

D'après le spectre (3.10), on observe deux états à énergie zéro, quelque soit la valeur du champ magnétique. Ces états peuvent être calculés exactement [dGGG⁺11],

$$\Psi_0 = N_0 \cosh(\alpha^* a^\dagger) \begin{pmatrix} 0 \\ |n=0\rangle \end{pmatrix}, \quad (3.56)$$

$$\Psi_1 = N_1 \frac{\sinh(\alpha^* a^\dagger)}{\alpha^*} \begin{pmatrix} 0 \\ |n=0\rangle \end{pmatrix}, \quad (3.57)$$

à une normalisation $N_{0/1}$ près, et on peut également comprendre la persistance des états d'énergie nulle en appliquant le théorème de l'indice.

- A bas champ, les deux cônes de Dirac sont découplés, chacun avec un nombre d'enroulement +1, et fournissent ainsi chacun un niveau à énergie nulle.
- A plus fort champ, seul le nombre d'enroulement global des deux cônes est pertinent, mais ici ce nombre d'enroulement est +2, en opposition avec le 0 du modèle de la monocouche de graphène sous contrainte. Ce nombre d'enroulement double garantit encore, et même à champ fort, l'existence d'un état à énergie nulle avec une dégénérescence double.

Comme attendu, les résultats de ce modèle sont fondamentalement différents du précédent, en terme de niveaux à énergie nulle. Notons enfin qu'aux deux cônes de même nombre d'enroulement +1 d'une vallée de la bicouche désaxée, correspond deux cônes de même nombre d'enroulement -1 dans la vallée opposée. En théorie on pourrait donc observer la levée de dégénérescence du niveau de Landau à énergie nulle d'une vallée pour un champ suffisamment fort. Néanmoins, et en répétant le raisonnement de la monocouche sous contrainte, l'intensité minimale du champ reste hors de portée expérimentalement.

3.5.1 Aspects expérimentaux

Suite à nos travaux théoriques, la bicouche de graphène désaxée, sous champ magnétique, a aussi été étudié expérimentalement [LRB⁺11, SYTW⁺12]. Pour le système com-

3.5. LA BICOUCHE DE GRAPHÈNE DÉSAJAXÉE

posé d'une bicouche de graphène avec un angle de désaccord entre les deux feuillets, on se place dans le régime de l'effet Hall quantique entier, en appliquant un champ magnétique, de l'ordre de quelques Tesla, perpendiculairement aux feuillets. Comme expliqué précédemment, cette expérience de transport permet de sonder les niveaux de Landau.

Le résultat de l'expérience de [LRB⁺11] est présenté sur la figure 3.11. A dopage nul,

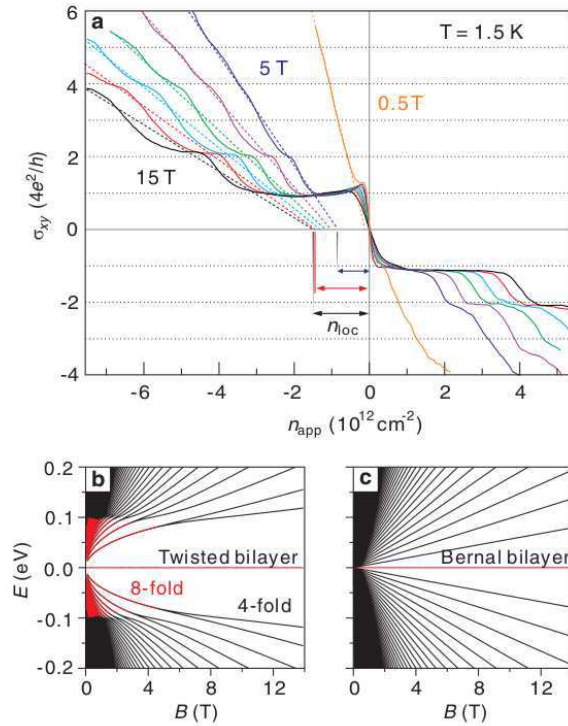


FIGURE 3.11 – Résultats de l'expérience d'effet Hall pour la bicouche de graphène désaxée D'après [LRB⁺11]. On observe des sauts de la conductance transverse σ_{xy} de $4e^2/h$, sauf pour le niveau à énergie nulle qui est doublement dégénéré, d'où un saut de $8e^2/h$. Ce niveau est aussi présent quelque soit la valeur du champ magnétique, comme attendu théoriquement. Le reste des niveaux ont aussi la forme attendue en 3.10. On note particulièrement une levée de dégénérescence de 8 à 4 (8-fold et 4-fold sur la figure (b)), pour des énergies supérieures à 100meV qui correspond à l'énergie du point selle. Cette levée de dégénérescence est le résultat d'une transition de Lifshitz du type 3.6.

c'est à dire pour une tension de grille qui assure la neutralité de charge, on observe un saut dans la conductivité transverse σ_{xy} de $8e^2/h$, de manière similaire à la bicouche de graphène avec empilement Bernal. Ce saut correspond au remplissage d'un niveau de Landau, à énergie nulle, et doublement dégénéré (mise à part la quadruple dégénérescence

de spin et de vallée). On observe ce saut de conductivité quel que soit le champ magnétique appliqué, ce qui traduit la non-dispersion du niveau à énergie nulle.

Ces résultats sont en parfait accord avec nos prédictions [dGGG⁺11], à savoir un niveau zéro doublement dégénéré, suite à la présence de deux cônes, et insensible à la force de champ. La protection topologique de ces niveaux est bien illustrée par cette expérience.

Par ailleurs, le reste du spectre peut aussi être interprété à l'aide de notre modèle (3.54). Comme il est indiqué sur la figure 3.11(b), reprise de notre figure 3.10, on s'attend, pour de faibles champs magnétiques, à des sauts de conductivité de $8e^2/h$, en raison de la double dégénérescence en-dessous du point selle, alors qu'ils devraient être de $4e^2/h$ au-dessus. Pour de faibles champs, on observe bien des niveaux qui dispersent en \sqrt{neB} et doublement dégénérés. A l'approche de la singularité de van Hove, cette dégénérescence est levée et la dispersion suit alors une loi en neB . Ces observations à la singularité de van Hove nous indiquent que les deux cônes à l'étude sont bien couplés électroniquement. Il n'est donc pas possible de considérer que la double dégénérescence du niveau zéro puisse s'interpréter par la présence de deux cônes de Dirac indépendants.

L'étude de la bicouche ne s'arrête pas là. En référence au chapitre précédent, il existe une limite, à basse énergie, où le spectre se complexifie. C'est le domaine de la correction trigonale. Afin de conclure sur l'étude des modèles du chapitre 2, on s'intéresse maintenant à cette structure fine.

3.6 La bicouche avec correction trigonale

On termine notre revue des modèles de points de Dirac du chapitre précédent par le plus complexe, à savoir la bicouche de graphène avec correction trigonale. On rappelle ici que la structure de la bicouche est constituée, pour des énergies inférieures à 10meV, de quatre cônes de Dirac, l'un central et de nombre d'enroulement -1 , et les trois autres arrangés en triangle, et de nombres d'enroulement $+1$. On devrait donc observer, à bas champ, un niveau à énergie nulle dégénéré $W_t = |-1| + | +1| + | +1| + | +1| = 4$ fois, de par la présence de quatre cônes de Dirac. Par contre, à plus fort champ, le nombre d'enroulement est $W_p = |-1 + 1 + 1 + 1| = 2$ et donc la dégénérescence de l'état n'est plus que double.

Sur la base du théorème de l'indice, et pour l'opérateur $b\Pi^{*2} + c\Pi - \Delta$, on obtient

$$\text{Ind} [b\Pi^{*2} + c\Pi - \Delta] = \text{Ind} [b\Pi^{*2}] = \text{Ind} [\Pi^{*2}] = 2, \quad (3.58)$$

où on a utilisé la stabilité de l'indice, puis la propriété logarithmique. On devrait alors observer un spectre à mi-chemin entre les deux précédents modèles. On garderait une levée de dégénérescence de deux des niveaux, avec l'amplitude du champ magnétique, comme pour le graphène sous contrainte. Mais on conserverait aussi deux niveaux à énergie nulle, quelque soit l'amplitude du champ, de manière similaire à la bicouche désaxée.

Fort de cette prédiction, intéressons-nous aux résultats de notre article [dGGM12], qui traite de ce modèle en détail. Le hamiltonien,

$$h(\mathbf{K} + \mathbf{q}) = \hbar^2 b \begin{pmatrix} 0 & \mathbf{q}^{*2} \\ \mathbf{q}^2 & 0 \end{pmatrix} + \hbar c \begin{pmatrix} 0 & \mathbf{q} \\ \mathbf{q}^* & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & -\Delta \\ -\Delta^* & 0 \end{pmatrix}, \quad (3.59)$$

en présence d'un champ magnétique, et suivant la prescription (3.4), s'écrit

$$h_B = \frac{c}{l_B} \begin{pmatrix} 0 & 2\beta a^2 - \sqrt{2}a^\dagger - \delta \\ 2\beta a^{\dagger 2} - \sqrt{2}a - \delta & 0 \end{pmatrix}, \quad (3.60)$$

avec les quantités renormalisées $\beta = b\sqrt{eB}/c$ et $\delta = \Delta/(c\sqrt{eB})$. Bien que les aspects topologiques s'observent dans la dégénérescence des niveaux de Landau à énergie nulle, on présente ici aussi une description des autres niveaux, cette étude faisant aussi partie du travail de thèse.

3.6.1 Spectre sans distortion $\delta = 0$

On débute notre étude du spectre des niveaux de Landau par le cas où aucune déformation n'est introduite, c'est à dire $\Delta = 0$ et donc $\delta = 0$. Seul reste alors le paramètre β , et la figure 3.12 présente la dispersion des niveaux de Landau en fonction de ce dernier. On observe bien ici un état à énergie nulle dégénéré quatre fois, à faible champ ($\beta \lesssim 0.18$), ainsi qu'une levée partielle de cette dégénérescence, à plus fort champ ($\beta \gtrsim 0.18$), avec deux niveaux qui dispersent de manière symétrique (l'un vers les énergies positives, l'autre vers les négatives). Les deux autres niveaux restants ne sont pas perturbés. Ces résultats sont donc en accord avec la prédiction basée sur des considérations topologiques.

Le reste du spectre s'interprète ainsi :

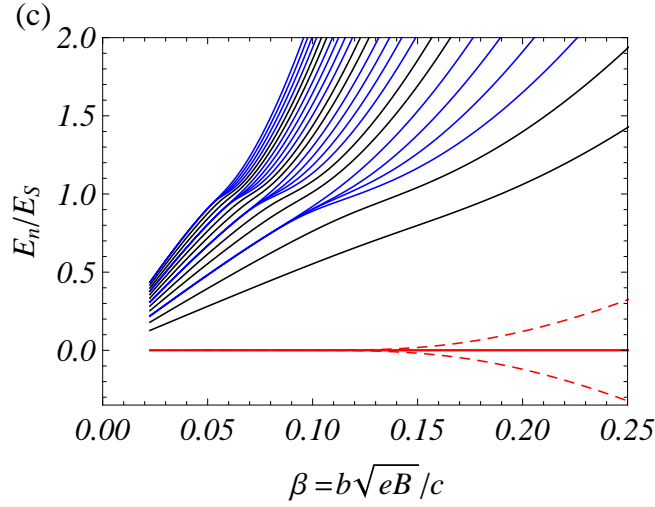


FIGURE 3.12 – Spectre des niveaux de Landau pour la bicouche de graphène avec correction trigonale et $\delta = 0$

L'énergie est représentée en unités de E_S , énergie des points selles entre le cône central D et les trois satellites A, B, C . On observe sur la figure la présence d'un niveau à énergie nulle, quadruplement dégénéré à bas champ, et une levée partielle de la dégénérescence à champ plus fort. La dégénérescence n'est alors plus que double, en accord avec le théorème de l'indice. Les autres niveaux sont discutés dans [dGGM12].

- Pour des énergies inférieures à l'énergie du point selle E_s on observe, outre les niveaux zéros, des états qui dispersent en $\beta = b\sqrt{eB}/c$.
- A hauteur du point selle E_s , les quadruples dégénérescences, dues à l'existence de plusieurs poches dans la surface de Fermi, sont levées. C'est la transition de Lifshitz.
- Enfin, au-dessus du point selle E_s , les niveaux sont tous non-dégénérés et dispersent en $\beta^2 \sim eB$. On retrouve pour $E \geq E_S$ le spectre (3.47) de la bicouche dans le modèle simple 3.45

On interprète maintenant ce spectre à l'aide de l'analyse semi-classique. Pour des énergies inférieures à celle du point selle, la dispersion électronique sans champ est constituée de quatre cônes, A à D , voir chapitre précédent. Ces quatre cônes engendrent quatre poches de Fermi déconnectées dont l'aire est

$$A_D = \pi \frac{\varepsilon^2}{c^2}, \quad A_{A/B/C} = \pi \frac{\varepsilon^2}{3c^2}. \quad (3.61)$$

3.6. LA BICOUCHE AVEC CORRECTION TRIGONALE

Chaque cône possède un nombre d'enroulement ± 1 , si bien que l'argument semi-classique se lit

$$\begin{aligned} 2\pi \left(n + \frac{1}{2} - \frac{|W|}{2} \right) eB &= 2\pi n eB = A(E) \\ \Rightarrow E_D(n) &= c\sqrt{2neB}, \quad E_{A/B/C} = c\sqrt{6neB}. \end{aligned} \quad (3.62)$$

A zéro énergie, et pour des champs faibles $\beta \ll 1$, on obtient ainsi une dégénérescence quadruple du niveau de Landau correspondant. La dégénérescence totale est alors de 16 si on tient compte des degrés de liberté de spin et de vallée. Concernant les niveaux à énergie non nulle, on trouve trois fois plus de niveaux pour le cône central car $A_D = 3A_{A/B/C}$. Ceci explique la dégénérescence quadruple tous les trois niveaux. En effet, tous les trois niveaux il faut compter, en plus du cône central D , les trois cônes périphériques $A/B/C$, d'où une dégénérescence de quatre. Les autres niveaux ne sont pas dégénérés car ils sont associés au seul cône central D . Cette différence de dégénérescence est donc liée au fait que le cône central est trois fois plus évasé que les cônes périphériques.

Lorsqu'on dépasse l'énergie du point selle les trois poches de Fermi périphériques fusionnent avec celle centrale. La quantification semi-classique nous indique alors que les niveaux résultants sont non dégénérés. La quadruple dégénérescence de chaque troisième niveau est ainsi levée, comme on peut le voir sur la figure 3.12. De plus, la dispersion quasi-parabolique engendre un spectre proche de celle de la bicouche de graphène sans correction trigonale, à savoir $\sqrt{n(n-1)} \sim n - 1/2$.

3.6.2 Spectre avec une faible déformation $0 \neq |\delta| \ll 1$

On s'intéresse maintenant au cas des faibles déformations, $|\delta| \ll 1$. Comme dans le chapitre 2, on considère ici des valeurs réelles de δ . Les différents points selle s'alignent pour deux énergies différentes $E_S \neq E_{S'}$, et on doit ainsi découper le spectre en différents secteurs L , M et H pour $\delta \leq 0$, et L , M' et H pour $\delta \geq 0$, voir figure 3.13. Pour des énergies inférieures à celle des deux points selle, ε_S et $\varepsilon_{S'}$, la structure de bande est constituée de quatre cônes de Dirac mais la symétrie trigonale est perdue, du fait de la distortion $\delta \neq 0$. Si β est petit, la description pour $\delta = 0$ reste valable pour le niveau à énergie nulle. La présence de quatre cônes distincts entraîne une quadruple dégénérescence insensible aux

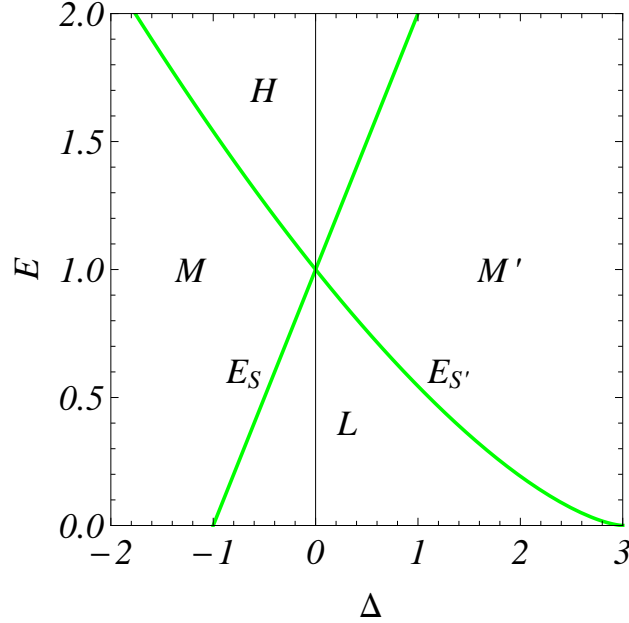


FIGURE 3.13 – Les différents secteurs du spectre de la bicouche de graphène avec correction trigonale

Suivant l'énergie des points selle E_S et $E_{S'}$, indiquée en vert, on peut distinguer quatre secteurs. L pour *low-energy* (énergies inférieures à $E_S, E_{S'}$), H pour *high-energy* (énergies supérieures à $E_S, E_{S'}$) et M ($E_S \leq E \leq E_{S'}$) et M' ($E_S \geq E \geq E_{S'}$) pour les zones de fusion $A - D$ et fusion triple $B - C - D$.

faibles déformations géométriques. Ceci est encore une illustration de l'importance de la *stabilité* de l'indice et des niveaux de Landau concernés. On obtient en conséquence un niveau à énergie nulle quadruplement dégénéré pour un grand intervalle de δ autour de 0.

Pour les niveaux à plus haute énergie, la brisure de symétrie trigonale entraîne immédiatement une levée de dégénérescence des niveaux précédemment quadruplement dégénérés, voir les croisements autour de $\delta = 0$ sur la figure 3.14. Nous raisonnons ici sur le cas où Δ est réel, ce qui entraîne l'existence d'une symétrie miroir entre les cônes B et C . Les niveaux de Landau correspondants sont alors doublement dégénérés et subissent une décroissance en énergie pour $\delta \geq 0$, du fait de la modification des poches de Fermi pour $\delta \neq 0$. Les autres niveaux correspondant aux cônes A et D ne sont, eux, pas dégénérés. On peut observer une décroissance quadratique en δ pour le cône D , et une augmentation linéaire en δ pour le cône A . On peut comprendre qualitativement ce comportement des niveaux associés aux

points A à D par l'évolution de la relation de dispersion en fonction de Δ , figures 2.13 et 2.14. En effet, par une augmentation de Δ , on remarque que le cône de Dirac autour de A devient plus fins, une trajectoire semi-classique qui entoure ce point doit alors être située à plus haute énergie afin d'enclorre la même surface, d'où l'augmentation en énergie du niveau de Landau. On observe l'effet inverse pour les cônes B et C , qui s'évasent plus pour un Δ croissant. Enfin, le cône D , lui, s'évase pour des Δ positifs ou négatifs, est les niveaux de Landau correspondant décroissent ainsi toujours en énergie.

Au-dessus des deux points selle, c'est à dire dans le secteur H , les niveaux sont tous non dégénérés car la surface de Fermi est connexe et croissent quadratiquement avec δ , du fait de la décroissance de la surface de Fermi correspondante.

3.6.3 Fusion $\delta \ll -1$

Si la description du niveau à énergie nulle n'est pas influencée pour de faibles déformations, elle doit être repensée lorsque les points A et D sont proches de la fusion, c'est à dire E_S est proche de 0. Si les poches de Fermi A et D fusionnent, on observe une levée partielle de la dégénérescence du niveau à énergie nulle. A la transition, et pour les autres niveaux, on observe une loi en $(n + 1/2)^{2/3}$, en accord avec le modèle de fusion pour deux cônes de nombres d'enroulement opposés. Si on continue de diminuer δ , les niveaux $A - D$ augmentent en énergie et suivent une loi linéaire en n , en accord avec un dispersion parabolique des bandes. Les niveaux correspondant à B et C ne sont pas affectés par cette fusion et continuent à disperser en \sqrt{nB} , comme on peut le constater sur la figure 3.14, dans la région qui correspond au secteur M de la figure 3.13.

3.6.4 Fusion triple $\delta \gg 1$

Pour la limite opposée, $\delta \geq 0$, le cône A n'est pas affecté et continue à disperser en \sqrt{nB} , dans le secteur M' de la figure 3.13. Les points B , C et D , eux, fusionnent pour former une surface de Fermi en forme de boomerang. La dégénérescence du niveau à énergie nulle est seulement double en raison du nombre d'enroulement de $+1$ respectivement de la poche en boomerang et du cône A . Au niveau du point de fusion triple, c'est à dire pour l'énergie du point selle $E_{S'} = 0$, les niveaux restants semblent disperser en $n^{3/4}$ d'après

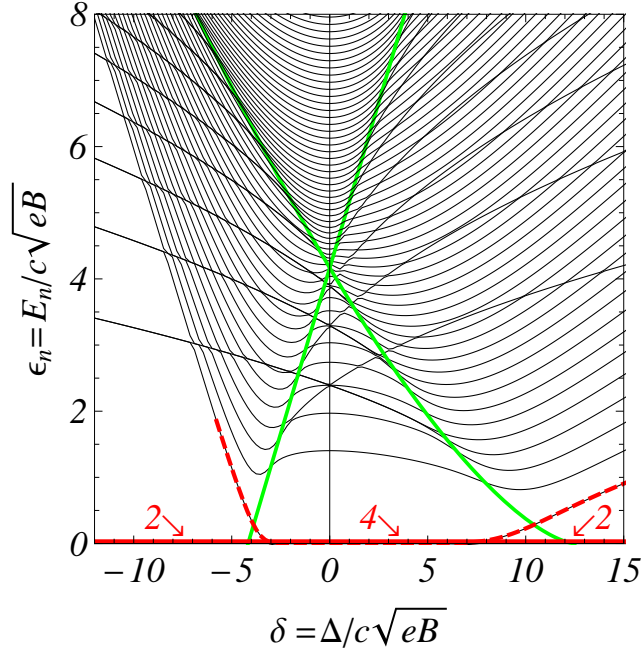


FIGURE 3.14 – Spectre des niveaux de Landau de la bicouche de graphène avec correction trigonale

On reconnaît les secteurs définis précédemment, en vert. Pour $\delta \leq 0$, on sonde la physique de la fusion $A - D$ (zone M). Pour $\delta \geq 0$, on sonde la physique de la fusion triple $B - C - D$ (zone M').

nos résultats numériques. Après la fusion des poches B , C et D , les niveaux dispersent de manière quasi linéaire en n et augmentent en énergie avec δ , du fait de la décroissance en taille de la poche de Fermi complexe en forme de boomerang.

En conclusion de cette section, on insistera sur le bon accord entre la théorie et les calculs numériques à la fois pour la dégénérescence du niveau à énergie nulle, et pour la dispersion des autres niveaux de Landau. On notera enfin que les expériences n'ont pas encore pu confirmer ou infirmer nos résultats théoriques, les échelles d'énergie pour observer la correction trigonale restant encore difficilement accessibles expérimentalement. De plus, l'application d'une déformation à la bicouche peut être elle aussi compliquée.

Ainsi s'achève l'étude des spectres de Landau pour les modèles du chapitre 2. On notera donc ici l'accord entre les résultats numériques, voire expérimentaux, et la théorie des indices introduites au cours de ce chapitre. Avant de clore ce dernier, on souhaite traiter

d'un sujet plus abstrait, mais toujours en relation avec le sujet, à savoir la formalisation du *brouillage magnétique* discuté précédemment.

3.7 Espace réciproque sous champ magnétique et niveaux de Landau

Dans ce chapitre, on a pu mettre en évidence la force du théorème de l'indice dans le problème des niveaux de Landau à énergie nulle. Néanmoins, dans quasiment tous les exemples discutés, il a été nécessaire de distinguer la limite à bas champ, où le nombre de points de Dirac W_t fournit la dégénérescence de ces niveaux, de la limite à fort champ, où c'est le nombre d'enroulement total W_p qui importe. Suivant la force du champ, on a pu discuter différentes limites grâce au théorème de l'indice, et pour faire le lien entre ces différentes limites, il a fallu faire appel à ce que nous avons appelé le *brouillage magnétique*. Cette notion est essentielle pour décrire les transitions entre les différentes limites. En effet, aussi puissant soit-il, le théorème de l'indice est incapable de décrire le passage de W_t à W_p niveaux zéros. Seuls les états topologiquement protégés sont admis dans ce théorème, mais physiquement il est des situations où on observe bien W_t niveaux zéros, et pas uniquement W_p . On citera ici le cas du graphène où aucun niveau zéro n'est topologiquement protégé mais où il faudrait un champ de 10^4 Tesla pour effectivement lever la dégénérescence observée. Pratiquement, il nous manque un concept qui puisse rendre compte des transitions possibles. C'est ce que le brouillage magnétique se propose de faire.

On rappelle ici que le brouillage magnétique consiste à tenir compte de la non commutativité de la zone de Brillouin magnétique, en remplaçant les points de cette espace en des tâches de taille l_B^{-1} . Si la tâche, qui ressemble à un état cohérent de l'optique quantique, est suffisamment localisée dans l'espace réciproque alors on peut encore distinguer un point de Dirac d'un autre. Dès que la taille de la tâche est de l'ordre de la distance entre ces points, il n'est alors plus possible de les considérer séparément.

Dans cette dernière partie du présent chapitre, on souhaite formaliser la notion de brouillage magnétique par la méthode mathématique de la quantification par déformation, [BFF⁺78a, BFF⁺78b]. Néanmoins on se concentrera sur des modèles développés autour d'un point de la première zone de Brillouin, laissant de côté l'étude complète du tore non

commutatif [Fau93].

3.7.1 L'espace réciproque non commutatif

Comme nous l'avons vu au début de ce chapitre, l'application d'un champ magnétique transverse à un échantillon bi-dimensionnel peut se traduire dans les équations du mouvement par la substitution de Peierls

$$\vec{p} \rightarrow \vec{p} + e\vec{A}(\mathbf{r}) = \vec{\Pi}, \quad (3.63)$$

où $\vec{A}(\mathbf{r})$ est le potentiel vecteur associé au champ magnétique $\vec{\nabla} \times \vec{A}(\mathbf{r}) = B(\mathbf{r})\vec{e}_z$. Suivant l'approche du chapitre précédent, on se placera dans l'approximation du continu pour le hamiltonien à plusieurs bandes, la première zone de Brillouin se réduisant alors à un plan bidimensionnel.

D'un point de vue mathématique, la transformation (3.63) génère un espace non commutatif soutenu par (Π_x, Π_y) . En effet on peut vérifier la non commutativité des générateurs

$$\begin{aligned} [\Pi_x, \Pi_y] &= [p_x + eA_x, p_y + eA_y] \\ &= [p_x, eA_y] + [eA_x, p_y] \\ &= -i\hbar e\partial_x A_y + i\hbar e\partial_y A_x \\ &= -i\hbar eB(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (3.64)$$

On retrouve ainsi, pour un champ homogène, le résultat (3.6) Physiquement on peut comprendre ce résultat en considérant qu'il existe une orbite cyclotron minimale, dans l'espace réel, en-dessous de laquelle il est impossible de résoudre l'électron. Le principe d'incertitude de Heisenberg ne permet pas, en effet, de localiser exactement un électron, sans quoi l'incertitude sur le moment serait infinie. Cette longueur minimale de localisation est précisément la longueur magnétique

$$l_B(\mathbf{r}) = \sqrt{\frac{\hbar}{eB(\mathbf{r})}}, \quad (3.65)$$

qui vient paver la zone de Brillouin, rendant *flou* tous les détails de l'ordre de l_B dans l'espace réel, et de l'ordre de l_B^{-1} dans l'espace réciproque.

Dans un souci de décrire la physique en fonction du paramètre B , le champ magnétique, on tentera une approche par perturbation de la géométrie noncommutative, que nous invitons le lecteur à découvrir dans la section qui suit. Les aspects topologiques des bandes électroniques sous champ magnétique ont déjà fait l'objet d'études par des méthodes semi-classiques [BF92, Fau93]. Il s'agit alors essentiellement d'étudier les états cohérents du système, équivalent semi-classique des états de "l'espace des phases". Cette approche de l'espace des états quantiques porte le nom de *quantification géométrique*.

Dans notre étude, nous choisirons de travailler avec une approche parallèle, celle de la *quantification par déformation*, qui traite de la transformation de l'algèbre des opérateurs, qui agissent sur l'espace des états, du classique vers le quantique [BFF⁺78a, BFF⁺78b].

3.7.2 La quantification par déformation

Afin d'introduire la quantification par déformation, on rappellera au lecteur qu'il connaît très certainement un espace noncommutatif, à savoir l'espace des phases en mécanique quantique. On fournit ici quelques rappels.

3.7.2.1 Rappels de mécanique classique/quantique

A une dimension, l'état d'une particule classique est complètement déterminé par la connaissance de sa position x et de son impulsion p . L'espace (x, p) est appelé espace des phases et il possède une structure symplectique (issue de la forme symplectique $\omega_{ij} = \epsilon_{ij}$ où ϵ_{ij} est le tenseur complètement anti-symétrique à deux indices) par l'intermédiaire du crochet de Poisson

$$\{A, B\} = \omega_{ij} \partial_i A \partial_j B = \partial_x A \partial_p B - \partial_p A \partial_x B. \quad (3.66)$$

Les objets physiques à considérer sont les fonctions à valeurs complexes, $f(x, p)$, qui forment une algèbre commutative. Les fonctions x et p vérifient

$$\{x, p\} = 1, \quad (3.67)$$

et les équations du mouvement sont déterminées par le hamiltonien ainsi que le crochet de Poisson

$$\dot{x} = \{x, H\} = \frac{\partial H}{\partial p} \quad \dot{p} = \{p, H\} = -\frac{\partial H}{\partial x} \quad (3.68)$$

3.7. ESPACE RÉCIPROQUE SOUS CHAMP MAGNÉTIQUE ET NIVEAUX DE LANDAU

En mécanique quantique, l'espace des phases devient noncommutatif suivant la prescription

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar, \quad (3.69)$$

c'est à dire en remplaçant les crochets de Poisson par le commutateur $i\hbar[\cdot, \cdot]$ entre les opérateurs associés. Comme la noncommutativité entre deux opérateurs entraîne une relation d'incertitude, du type Heisenberg, sur la mesure des observables, on peut alors considérer que l'espace des phases est *découpé* en cellules de taille $\sim \hbar$. La géométrie, et par la même la topologie, sont floues au niveau d'une cellule. Les objets à considérer sont maintenant les opérateurs, fonctions de \hat{x} et \hat{p} qui forment une algèbre noncommutative.

Pour passer de la multiplication commutative des fonctions à celle non commutative des opérateurs, on introduit un produit dit étoilé (\star) ou de Moyal, cf. [BFF⁺78a, BFF⁺78b]. Ce produit se développe en puissance de \hbar de telle sorte qu'on retrouve un produit commutatif dans la limite $\hbar \rightarrow 0$. Mathématiquement on demande à ce produit d'obéir à deux règles

$$f \star g \xrightarrow{\hbar \rightarrow 0} f \cdot g, \quad (3.70a)$$

$$\frac{1}{i\hbar}(f \star g - g \star f) \xrightarrow{\hbar \rightarrow 0} \{f, g\}. \quad (3.70b)$$

La règle (3.70a) impose que la limite $\hbar \rightarrow 0$ soit bien une multiplication commutative, à l'ordre \hbar^0 . La règle (3.70b) impose une règle de correspondance *semi-classique* entre le crochet de Poisson et le commutateur quantique, à l'ordre \hbar^1 . On précise bien ici que f et g sont des fonctions de (x, p) , mais qui agissent comme des opérateurs par le biais de la multiplication (\star).

Avec ces prescriptions, le produit Moyal est entièrement caractérisé par une série, cf. [BFF⁺78a, BFF⁺78b],

$$f \star g = fg + \frac{i\hbar}{2}\{f, g\} + \left(\frac{i\hbar}{2}\right)^2 \frac{1}{2!}\epsilon_{\mu\nu}\{\partial_\mu f, \partial_\nu g\} + O(\hbar^2), \quad (3.71)$$

où $\epsilon_{\mu\nu}$ est le tenseur complètement anti-symétrique à deux indices, et où on a tronqué les puissances de \hbar supérieures à 2, qui ne nous seront pas utiles pour la suite de cette thèse. Retenons ici que le produit Moyal a l'avantage d'introduire la mécanique quantique en perturbation (puissances de \hbar).

3.7.2.2 Retour à l'espace réciproque

L'approche perturbative du produit (\star) est particulièrement utile si le paramètre \hbar peut varier. Pour la mécanique quantique, soit pour l'espace des phases (x, p) , \hbar est une constante universelle. En revanche, dans notre problème de la zone de Brillouin sous champ magnétique, on est confronté à un paramètre perturbatif qui dépend du champ magnétique. L'intensité de ce champ magnétique permettra de balayer toutes les valeurs du paramètre.

Notre approche repose sur la correspondance entre la zone de Brillouin sous champ magnétique, sous-tendue par les générateurs (Π_x, Π_y) , et l'espace des phases (x, p) . En effet, les générateurs vérifient la même algèbre

$$[\hat{x}, \hat{p}] = i\hbar \rightarrow [\Pi_x, \Pi_y] = i\hbar eB, \quad (3.72)$$

avec, comme paramètre perturbatif $i\hbar eB$ pour la zone de Brillouin sous champ magnétique. On notera que le champ magnétique B peut varier en intensité ainsi qu'être modulé dans l'espace réel $B = B(\mathbf{r})$. Un autre avantage de la quantification par déformation sera donc de pouvoir traiter les champs magnétiques homogènes et inhomogènes sur un pied d'égalité.

Dans la suite de cette thèse, on considérera le produit (\star) comme étant le produit Moyal issu de la zone de Brillouin magnétique, avec comme paramètre de perturbation $\hbar eB$. Grâce à cette approche variationnelle, on pourra étudier différentes limites.

3.7.3 Applications à la physique des points de Dirac

Suite à l'étude de différents modèles de points de Dirac au chapitre précédent, on considérera un hamiltonien 2×2 de la forme

$$H(\mathbf{q}) = \begin{pmatrix} 0 & f(\mathbf{q}) \\ f^*(\mathbf{q}) & 0 \end{pmatrix}, \quad (3.73)$$

Associés à un opérateur hamiltonien, les vecteurs propres et énergies propres vérifient

$$H(\mathbf{q}) \cdot P(\mathbf{q}) = EP(\mathbf{q}), \quad (3.74)$$

où $P(\mathbf{q})$ est le projecteur $[P(\mathbf{q})^2 = P(\mathbf{q})]$ sur le sous-espace de la valeur propre E , c'est à dire les contours iso-énergétiques dans la première zone de Brillouin.

3.7. ESPACE RÉCIPROQUE SOUS CHAMP MAGNÉTIQUE ET NIVEAUX DE LANDAU

Comment cette équation évolue-t-elle en présence d'un champ magnétique ? On a vu dans la section précédente que l'effet d'un tel champ est de transformer le produit ponctuel d'observables classiques, en un produit noncommutatif des observables quantiques correspondantes. Dans notre cas, les énergies et projecteurs du hamiltonien (3.73) vérifient la nouvelle équation

$$H(\vec{\Pi}) \star P(\vec{\Pi}) = E \cdot P(\vec{\Pi}), \quad (3.75a)$$

$$P(\vec{\Pi}) \star P(\vec{\Pi}) = P(\vec{\Pi}), \quad (3.75b)$$

et on utilise le produit standard (\cdot) dans (3.75a) car l'énergie E ne dépend pas de Π . La formule (3.75a) n'est rien d'autre que l'équation aux valeurs propres du hamiltonien et (3.75b) traduit la normalisation des états propres par le biais des projecteurs.

On se concentre désormais sur les éventuels états à énergie nulle, l'équation aux valeurs propres se réduisant alors à

$$H \star P = 0, \quad (3.76)$$

c'est à dire

$$f \star P^- = 0, \quad (3.77a)$$

$$f^* \star P^+ = 0, \quad (3.77b)$$

où on a décomposé P en

$$P = \begin{pmatrix} P^+ \\ P^- \end{pmatrix}. \quad (3.78)$$

Notons ici que cette décomposition n'est possible que pour un niveau d'énergie nulle. Le couple d'équations (3.77a,3.77b) nous indique que pour résoudre pour les niveaux d'énergie nulle, il suffit de connaître le noyau des opérateurs f et f^* , en particulier, la dégénérescence de ces niveaux est fournie par la dimension de ces noyaux.

Précédemment dans ce chapitre, on a pu constater que la dégénérescence du niveau de Landau à énergie nulle varie entre une dégénérescence maximale, à faible champ magnétique, et une topologiquement protégée, qui persiste même à fort champ. Notamment, pour un hamiltonien du type

$$h(\mathbf{q}) = \begin{pmatrix} 0 & f(\mathbf{q}) \\ f^*(\mathbf{q}) & 0 \end{pmatrix}, \quad (3.79)$$

on sait que (voir les arguments développés dans les parties antérieures de ce chapitre)

3.7. ESPACE RÉCIPROQUE SOUS CHAMP MAGNÉTIQUE ET NIVEAUX DE LANDAU

le nombre de niveaux à énergie nulle, à faible champ est donné par

$$\dim(\text{Ker}[f]) + \dim(\text{Ker}[f^*]) = \sum_i |W_i| = W_t, \quad (3.80)$$

et à fort champ par

$$|\dim(\text{Ker}[f]) - \dim(\text{Ker}[f^*])| = \left| \sum_i W_i \right| = |W_p|. \quad (3.81)$$

où les W_i sont les différents nombres d'enroulement des points de Dirac, indexés par i .

Dans cette dernière section, nous souhaitons fournir une description physique qui rend plausible ce résultat.

Notons dès maintenant que la notion de champ faible ou fort est extrêmement dépendante du modèle. En effet, on observera une transition entre W_t et W_p si l'inverse de la longueur magnétique est de l'ordre de la distance, dans l'espace réciproque, entre les différents points de Dirac.

3.7.4 Une approche perturbative

On se propose maintenant de formaliser la discussion précédente, à l'aide de la quantification par déformation. Comme indiqué dans [BFF⁺78a, BFF⁺78b], la dimension du sous-espace de la valeur propre E est donné par la trace de P

$$\text{Tr}(P) = \int \frac{d^2 q l_B^2}{2\pi} P(\mathbf{q}), \quad (3.82)$$

où P est le projecteur sur le sous-espace d'énergie E . Notons ici que $P(\mathbf{q}) = \langle \mathbf{q} | \hat{P} | \mathbf{q} \rangle$, où \hat{P} est le projecteur en mécanique quantique traditionnelle. La formule (3.82) est donc bien celle d'une trace $\sum_{\mathbf{q}} \langle \mathbf{q} | \hat{P} | \mathbf{q} \rangle = \text{Tr}(P)$.

On calcule d'abord le projecteur P pour la fonction $f(\mathbf{q}) = \mathbf{q}$. Les équations (3.77a) et (3.77b) s'écrivent alors à l'aide de l'équation (3.71)

$$\mathbf{q}^* \star P^+(\mathbf{q}) = \mathbf{q}^* \cdot P^+(\mathbf{q}) + \frac{i\hbar e B}{2} (\partial_{q_y} P^+(\mathbf{q}) + i\partial_{q_x} P^+(\mathbf{q})) = 0, \quad (3.83a)$$

$$\mathbf{q} \star P^-(\mathbf{q}) = \mathbf{q} \cdot P^-(\mathbf{q}) + \frac{i\hbar e B}{2} (\partial_{q_y} P^-(\mathbf{q}) - i\partial_{q_x} P^-(\mathbf{q})) = 0. \quad (3.83b)$$

3.7. ESPACE RÉCIPROQUE SOUS CHAMP MAGNÉTIQUE ET NIVEAUX DE LANDAU

En décomposant les équations en parties réelles et imaginaires, on peut résoudre (3.83a) et (3.83b) :

$$P^+(\mathbf{q}) = N^+ e^{|\mathbf{q}|^2 l_B^2}, \quad (3.84a)$$

$$P^-(\mathbf{q}) = N^- e^{-|\mathbf{q}|^2 l_B^2}. \quad (3.84b)$$

On note alors que P^+ n'est pas normalisable, c'est à dire que $\int P^+$ diverge. La seule solution physiquement correcte est $P^+ = N^+ = 0$. Concernant, P^- , il s'agit d'une Gaussienne (normalisable), et en se référant à [BFF⁺78a, BFF⁺78b], on admettra que

$$P^- = 2e^{-|\mathbf{q}|^2 l_B^2}, \quad (3.85)$$

alors vérifie la relation structurelle des projecteurs, à savoir $P^- \star P^- = P^-$. A l'inverse, si on avait choisi la fonction $f(\mathbf{q}) = \mathbf{q}^*$, les rôles de P^+ et P^- auraient été inversés.

Comme on peut le constater sur les équations précédentes, les projecteurs sont fonctions de l_B et s'étalent dans l'espace réciproque d'autant plus que l'intensité du champ magnétique est forte. C'est la propriété essentielle du *brouillage magnétique*.

Considérons maintenant un exemple plus complexe, défini avec la fonction $f(\mathbf{q}) = (\mathbf{q} - \alpha_1)(\mathbf{q} - \alpha_2)$. Soient P_1 et P_2 les projecteurs associés à $(\mathbf{q} - \alpha_1)$ et $(\mathbf{q} - \alpha_2)$ respectivement. On a alors

$$\begin{aligned} f(\mathbf{q}) \star (P_1 + P_2)(\mathbf{q}) &= (\mathbf{q} - \alpha_1)(\mathbf{q} - \alpha_2)(P_1 + P_2), \\ &+ \hbar e B [(\mathbf{q} - \alpha_1) + (\mathbf{q} - \alpha_2)] \partial_{q^*} (P_1 + P_2), \\ &+ \frac{(\hbar e B)^2}{2} 2 \partial_{q^* q^*} (P_1 + P_2). \end{aligned} \quad (3.86)$$

Dans l'équation ci-dessus on a utilisé la formule

$$\frac{i\hbar e B}{2} (\partial_{q_x} A \partial_{q_y} B - \partial_{q_y} A \partial_{q_x} B) = \hbar e B (\partial_q A \partial_{q^*} B - \partial_{q^*} A \partial_q B), \quad (3.87)$$

pour deux opérateurs quelconques A et B , et où ∂_q et ∂_{q^*} sont des dérivées complexes :

$$\partial_q = \partial_{q_x} - i \partial_{q_y} \quad \partial_{q^*} = \partial_{q_x} + i \partial_{q_y}. \quad (3.88)$$

Si on introduit les formes explicites pour les points de Dirac (3.85) de $P_{1/2}$ dans l'équation

3.7. ESPACE RÉCIPROQUE SOUS CHAMP MAGNÉTIQUE ET NIVEAUX DE LANDAU

(3.86), on obtient au premier ordre en l_B^{-1}

$$\begin{aligned}
 f(\mathbf{q}) \star (P_1 + P_2)(\mathbf{q}) &= (\mathbf{q} - \alpha_1)(\mathbf{q} - \alpha_2)(P_1 + P_2) \\
 &+ ((\mathbf{q} - \alpha_1) + (\mathbf{q} - \alpha_2))(-(\mathbf{q} - \alpha_1)P_1 - (\mathbf{q} - \alpha_2)P_2) \\
 &+ ((\mathbf{q} - \alpha_1)^2 P_1 + (\mathbf{q} - \alpha_2)^2 P_2) \\
 &\sim 0.
 \end{aligned} \tag{3.89}$$

Autrement dit, si le brouillage est faible, le projecteur pour l'énergie nulle s'écrit comme la somme de deux gaussiennes, piquées en deux points bien distincts, voir figure 3.15. Par

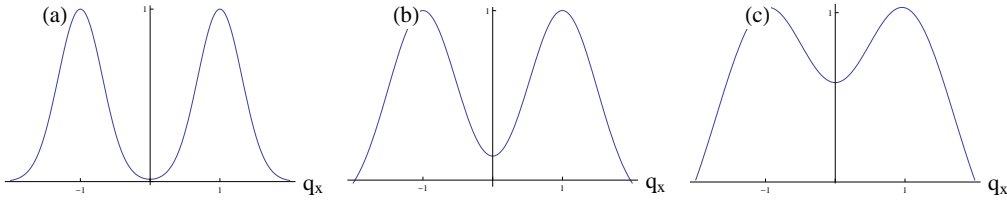


FIGURE 3.15 – Brouillage magnétique pour deux points de Dirac

En (a) on a représenté l'allure des projecteurs pour deux points de Dirac, avec un brouillage magnétique faible. En augmentant ce brouillage, voir (b) et (c), la dispersion des niveaux est de plus en plus grande et il n'est plus possible de distinguer un point de Dirac d'un autre. Les deux points sont brouillés

réurrence, la fonction $f(\mathbf{q}) = \prod_{i=1}^N (\mathbf{q} - \alpha_i)$ sera associée à une somme de N gaussiennes $P = \sum_{i=1}^N P_i$, chaque P_i vérifiant $\text{Tr}(P_i) = 1$, d'où $\text{Tr}(P) = N$. Ce N correspond à la somme des points de Dirac de nombres d'enroulement positifs. Par ailleurs, et de manière symétrique, la trace de P^- sera la somme des points de Dirac de nombres d'enroulements négatifs. On résume ce résultat par les formules suivantes

$$\text{Tr}(P^+(\mathbf{q})) = \sum_{i_+} W_{i_+}, \tag{3.90a}$$

$$\text{Tr}(P^-(\mathbf{q})) = \sum_{i_-} |W_{i_-}|, \tag{3.90b}$$

où i_+ indique les points de Dirac de vorticité positive et i_- ce de vorticité négative.

A faible champ, P^+ et P^- sont découplés, si bien que la dégénérescence totale du niveau à énergie nulle est donnée par

$$\text{Tr}(P^+) + \text{Tr}(P^-) = \sum_i |W_i| = W_t, \tag{3.91}$$

3.7. ESPACE RÉCIPROQUE SOUS CHAMP MAGNÉTIQUE ET NIVEAUX DE LANDAU

où cette fois la somme se conduit sur tous les points de Dirac.

Néanmoins, ce résultat n'est valable qu'à faible champ. Si on augmente le champ magnétique, les différents états vont se coupler afin de lever la dégénérescence du niveau zéro.

Suivant les techniques standard, la perturbation au premier ordre s'écrit

$$(P^+ \ 0) H \begin{pmatrix} P^+ \\ 0 \end{pmatrix} = 0 \quad (3.92)$$

car le hamiltonien H est hors diagonal. Le résultat est identique pour P^- . Autrement dit, les points de Dirac de vorticité identique ne se couplent pas, au premier ordre. La force du théorème de l'indice est d'affirmer qu'en fait ils ne se couplent à aucun ordre.

Au deuxième ordre, par contre, la correction à l'énergie fait intervenir les produits

$$(P^+ \ 0) H \begin{pmatrix} 0 \\ P^- \end{pmatrix} \neq 0, \quad (3.93)$$

c'est à dire les états de vorticité positive se couplent aux états de vorticité négative afin de lever la dégénérescence du niveau à énergie nulle.

Chaque point de Dirac de vorticité (+) se couple à un autre point de Dirac de vorticité (-). Ce couplage rappelle la notion de fusion des points de Dirac où les vortex se sommaient lorsque deux points se rencontraient. Ici la "fusion" est générée par le brouillage magnétique, c'est à dire l'étalement des projecteurs associés. S'il existe N vortex (+) et M vortex (-), $N \leq M$, N états (+) vont se coupler à M états (-), si bien qu'il reste $M - N$ états non perturbés. Ce nombre $M - N$, est bien égal au nombre d'enroulement total de la fonction $f(\mathbf{q})$ considérée, c'est à dire $W_p = |\sum_i W_i|$. Le cas $N \geq M$ se traite de la même manière.

En résumé, la quantification par déformation nous fournit bien une preuve de ce que nous avons déjà constaté :

le nombre maximal de niveaux zéros est fourni par $Tr(P^+(\mathbf{q})) + Tr(P^-(\mathbf{q})) = \sum_i |W_i|$, et celui minimal par $|Tr(P^+(\mathbf{q})) - Tr(P^-(\mathbf{q}))| = |\sum_i W_i|$. La levée de dégénérescence potentielle s'interprète comme un couplage entre les niveaux zéros ($i+$) et ($i-$).

3.7.5 Le graphène sous contrainte

On propose maintenant d'illustrer la formalisation du brouillage magnétique par l'étude du graphène sous contrainte. Ce système a été introduit au chapitre précédent, et on se contentera ici de réutiliser le hamiltonien de basse énergie, équation (2.20).

Comme discuté plus haut, ce modèle représente la physique de deux cônes de Dirac, de nombres d'enroulement inversés, (+1) et (-1). D'après la section précédente, on est donc confronté à l'existence de deux niveaux ($|+1| + |-1| = 2$) de Landau à énergie nulle, à faible champ, et à une absence de tels niveaux ($|+1 - 1| = 0$) à champ plus fort.

Afin de quantifier ce résultat, on propose ici un calcul de la levée de dégénérescence, en perturbation et à travers la quantification par déformation. Comme précisé précédemment, les projecteurs sur un sous-espace d'énergie donnée évoluent essentiellement comme une gaussienne de forme

$$P \sim e^{-\frac{\alpha(\mathbf{q})}{eB}}, \quad (3.94)$$

où $\alpha(\mathbf{q})$ est une fonction qui ne dépend pas de eB , en première approximation, et on a posé $\hbar = 1$. Le calcul qu'on propose de réaliser relève d'une approche variationnelle où on va utiliser l'ansatz (3.94), pour la forme de P . Cet ansatz doit vérifier

$$f(\mathbf{q}) \star P^+ \xrightarrow{eB \rightarrow 0} 0, \quad (3.95)$$

et la levée de dégénérescence (ΔE) est donnée, au deuxième ordre, par le couplage entre P^+ et P^- .

$$f(\mathbf{q}) \star P^+ = (\Delta E) P^-, \quad (3.96)$$

soit

$$\Delta E = \frac{\int \frac{d^2 q_B^2}{2\pi} f(\mathbf{q}) P^+}{\int \frac{d^2 q_B^2}{2\pi} P^-} = \int \frac{d^2 q_B^2}{2\pi} f(\mathbf{q}) P^+, \quad (3.97)$$

où on a utilisé la formule $\int d^2 q A \star B = \int d^2 q AB$, valable pour le produit Moyal, cf. [BFF⁺78a, BFF⁺78b], ainsi que la normalisation $\int \frac{d^2 q_B^2}{2\pi} P^- = 1$.

Si on développe l'équation (3.95), on obtient

$$f P^+ + \frac{ieB}{2} \{f, P^+\} - \frac{(eB)^2}{8} \epsilon_{\mu\nu} \{\partial_\mu f, \partial_\nu P^+\} = 0. \quad (3.98)$$

3.7. ESPACE RÉCIPROQUE SOUS CHAMP MAGNÉTIQUE ET NIVEAUX DE LANDAU

On introduit maintenant l'ansatz (3.94) dans l'équation précédente, et on obtient, à l'ordre le plus bas

$$\left(\frac{q_x^2}{2m} - \Delta + 2icq_y\right) + i\left(-\frac{q_x}{m}\partial_{q_y}\alpha + ic\partial_{q_x}\alpha\right) - \frac{1}{8m}\partial_{q_y, q_y}\alpha = 0. \quad (3.99)$$

Cette équation différentielle se résoud en précisant que α doit être réel (pour un projecteur P^+ hermitien)

$$\frac{q_x^2}{2m} - \Delta - c\partial_{q_x}\alpha - \frac{1}{8m}(\partial_{q_y}\alpha)^2 = 0 \quad (3.100a)$$

$$2cq_y - \frac{q_x}{m}\partial_{q_y}\alpha = 0 \quad (3.100b)$$

Un calcul de la levée de dégénérescence dans ce modèle a déjà été effectuée dans [ESKH09], par une approche WKB. Ici nous proposons une autre dérivation du même résultat qui, outre l'avantage de présenter une image du couplage magnétique par la quantification par déformation, inscrit aussi le calcul dans un développement en puissances de l_B qui pourrait donc être, théoriquement, poussé aux ordres supérieurs. Afin de comparer notre calcul avec celui de [ESKH09], on choisit de travailler dans les unités telles que $\hbar = 1$, $m = 1/2$ et $c = 2$, ainsi que $\Delta \rightarrow \Delta^2$. La solution des équations différentielles (3.100a) et (3.100b) donne

$$\alpha(\mathbf{q}) = \frac{q_y^2}{q_x} + \frac{q_x^3}{3} - \Delta^2 q_x, \quad (3.101)$$

et on obtient alors pour le projecteur

$$P^+ = C e^{-\frac{1}{eB}\left(\frac{q_y^2}{q_x} + \frac{q_x^3}{3} - \Delta^2 q_x\right)}, \quad (3.102)$$

qui est intégrable uniquement sur le demi-espace $q_x \geq 0$. Pour le demi-espace restant, on peut poser $P^+ = 0$ et le projecteur est encore continu en \mathbf{q} grâce au terme $e^{\frac{q_y^2}{q_x}} \rightarrow 0$. On obtient le projecteur complet

$$P^+ = C e^{-\frac{1}{eB}\left(\frac{q_y^2}{q_x} + \frac{q_x^3}{3} - \Delta^2 q_x\right)} \Theta(q_x), \quad (3.103)$$

où Θ est la fonction de Heaviside. Par ailleurs, C est une constante de normalisation, telle que $\int d^2q/(2\pi eB)P^+ = 1$. On applique la méthode du col pour le calcul de cette intégrale,

c'est à dire qu'on utilise la limite ($eB \rightarrow 0$)

$$\begin{aligned} \int \frac{d^2 q l_B^2}{2\pi} P^+ &= \int \frac{d^2 q l_B^2}{2\pi} C e^{-\frac{1}{eB} \left(\frac{q_y^2}{q_x} + \frac{q_x^3}{3} - \Delta^2 q_x \right)} \Theta(q_x) \\ &= \int \frac{d^2 q l_B^2}{2\pi} C e^{-\frac{1}{eB} \left(\frac{q_y^2}{\Delta} + \Delta q_x^2 - \frac{2\Delta^3}{3} \right)} \Theta(q_x) = C e^{\frac{2\Delta^3}{3eB}} \frac{1}{2} \\ &= 1, \end{aligned} \tag{3.104}$$

$$\tag{3.105}$$

d'où on déduit que

$$C = 2e^{-\frac{2\Delta^3}{3eB}}. \tag{3.106}$$

On réinjecte maintenant cette solution dans (3.97) soit

$$\Delta E = \int \frac{d^2 q l_B^2}{2\pi} f(\mathbf{q}) P_+, \tag{3.107}$$

$$\Delta E = \frac{eB}{\pi} e^{-\frac{2\Delta^3}{3eB}}. \tag{3.108}$$

Si on compare ce résultat avec le celui de [ESKH09], qui a recours à l'approximation WKB, la loi exponentielle est identique, ce qui valide l'approche utilisée ici. Le préfacteur est cependant différent, ce qui peut s'expliquer par notre approche variationnelle qui impose une certaine forme au projecteur. L'avantage du calcul présenté ici, néanmoins, est qu'il peut être facilement étendu aux ordres supérieurs et ainsi dépasser le formalisme WKB. On ne présentera pas ici de tels calculs qui, s'ils améliorent l'accord avec les simulations numériques, ne modifient pas drastiquement l'aspect topologique du problème, ce dernier apparaissant déjà à l'ordre le plus bas (à savoir la levée de dégénérescence dans cet exemple).

3.8 Conclusions

Comme annoncé dans le chapitre précédent, l'étude des points de Dirac sous champ magnétique est un bon test expérimental de la topologie, lorsque ce dernier est physiquement réalisable. La présence, ou l'absence, de niveaux à énergie nulle est en effet directement liée aux propriétés topologiques des bandes concernées et introduites précédemment.

On a ainsi introduit deux concepts essentiels concernant cette physique

3.8. CONCLUSIONS

- Tout d'abord le théorème de l'indice qui permet d'indiquer, dans une très large classe de systèmes, quelle est la dégénérescence topologiquement protégée des niveaux de Landau à énergie nulle.
- Ensuite, le brouillage magnétique, moins rigoureux que le dernier mais qui permet d'effectuer la transition entre une dégénérescence maximale, donnée par le nombre total de points de Dirac, et une topologiquement stable.

On peut considérer le brouillage magnétique comme décrivant la transition entre le local, où tous les points de Dirac sont découplés, et le global, où seul le nombre de Chern, soit le nombre d'enroulement total, compte.

C'est sur cette notion d'invariants topologiques globaux qu'on souhaite conclure cette thèse.

3.8. CONCLUSIONS

Conclusion et perspectives

Nous arrivons donc à terme de ce manuscrit de thèse. En cohérence avec notre introduction, il a été question d'illustrer l'utilisation de la topologie pour l'étude de variantes du graphène où la physique des électrons bidimensionnels est gouvernée par des points de Dirac. Comme discuté alors, ces deux domaines ont beaucoup à offrir l'un à l'autre. Du point de vue physique, la topologie se trouve être un outil efficace pour classifier certaines phases de la matière, de la même manière que la théorie de Landau permet d'étudier des transitions entre phases de différentes symétries.

Lors de cette étude, il a effectivement été question de classes topologiques et des transitions associées, et ce sous diverses formes. Dans un premier temps, nous avons considéré la topologie locale, c'est à dire pour une zone restreinte de la première zone de Brillouin. Il a alors été question d'un invariant topologique local, à savoir la courbure de Berry. Cette notion introduite, il a été possible de discuter la physique des points de Dirac, lieu de rencontre ponctuel entre deux bandes. Ces points peuvent s'interpréter comme des monopôles magnétiques dans l'espace réciproque, de la même manière que la courbure de Berry joue le rôle de champ magnétique dans cet espace. Fort de cette comparaison, il a été possible de discuter plusieurs modèles impliquant des points de Dirac. C'est alors la charge des monopôles magnétiques qui dirige la physique. Ces charges sont des nombres d'enroulement. Par exemple, dans le cas du graphène, les deux cônes de Dirac possèdent des nombres d'enroulement opposés. L'additivité de ces charges permet de faire fusionner les différents points de Dirac en sommant les dites charges. Pour le graphène, on obtient alors une charge totale nulle, c'est à dire topologiquement triviale. Mais il existe d'autres systèmes, comme la bicouche de graphène désaxée, où les nombres d'enroulement de cônes sont identiques. On observe alors une fusion radicalement différente. De manière générale,

notre méthode permet de classer n'importe quelle situation impliquant un nombre de points de Dirac quelconque avec des charges quelconques. De cette manière, la topologie nous a donc permis de classer les différentes sortes de semi-métaux, c'est à dire des matériaux à points de Dirac.

Suite à cette première utilisation de la topologie, nous avons souhaité discuter du problème de la mesure physique des propriétés mathématiques de cette théorie. La question des *observables topologiques* est cruciale, car s'il se révélait impossible de mesurer les effets de cette théorie mathématique, la pertinence de notre étude en serait gravement affectée. Nous n'avons pas souhaité discuter de toutes les observables topologiques possibles, mais seulement d'une, à savoir le transport dans les niveaux de Landau. Le résultat essentiel de cette partie est le lien étroit qui existe entre la présence de points de Dirac et la présence de niveaux de Landau à énergie nulle. Ce résultat s'appuie sur le théorème de l'indice, dit *d'Atiyah-Singer*, ainsi que sur la notion de brouillage magnétique, qui permet de relier la physique à faible champ magnétique de celle à fort champ magnétique. Ces deux outils permettent de traiter correctement l'observable *niveau de Landau à énergie nulle*. Cette observable se mesure par le transport électronique sous fort champ magnétique, c'est à dire par l'effet Hall quantique entier qui est sensible à la dégénérescence des niveaux. Dans le cas de la discussion de la bicouche de graphène désaxée, nos résultats concernant cette observable ont été entièrement vérifiés, cf. [LRB⁺11, SYTW⁺12], illustrant ainsi le fort pouvoir prédictif de notre méthode. Notons que cette dernière repose sur l'utilisation de la courbure de Berry, pour de faibles champs, et sur l'intégrale de cette courbure, à savoir le premier nombre de Chern, pour de plus forts champs. Suivant la notion développée de *brouillage magnétique*, le champ magnétique permet de relier ces deux invariants topologiques continuellement. Ce champ peut donc être vu comme un *bouton* permettant de transiter entre les deux limites physiques.

Nos travaux nous amènent donc, naturellement, vers la physique topologique sous sa version globale.

Physique du nombre de Chern

Afin de replacer cette thèse dans son contexte scientifique, il convient de noter que la topologie globale, et son invariant associé, le premier nombre de Chern, est à l'origine de phénomènes riches et originaux. Dans ces études, la vision locale est oubliée, si bien que l'essentiel de la physique se joue sur les bords d'un échantillon, ou à l'interface de systèmes de nombres de Chern distincts. C'est effectivement le cas pour l'effet Hall quantique entier [GL11], et les isolants topologiques [HK10], tous deux exhibant des états de bords conducteurs et robustes.

Une perspective pour un travail futur serait de généraliser l'analyse des isolants topologiques à des semi-métaux. Une première approche du problème, [SP13], souligne que la bicouche de graphène désaxée pourrait être le siège de telles interfaces, la super-structure des motifs de Moiré induisant une alternance entre des couplages de nature différente, c'est à dire induisant des points de Dirac avec des nombres d'enroulement différents. Nous avons effectivement pu noter dans notre étude sur la bicouche de graphène désaxée, que suivant la géométrie du couplage, on induit des nombres d'enroulement pour les cônes de Dirac identiques ou opposés (nombres d'enroulement $(+1) + (+1)$ ou $(+1) + (-1)$ pour les deux cônes d'une vallée). Si on étudie la super-structure de Moiré, on note une alternance entre les deux types de couplages, ce qui laisse penser qu'à l'interface entre les deux, des états de bords robustes se développent. La nature précise de ces états de bords n'est pas encore connue. En effet, il ne s'agit pas ici de l'interface entre deux isolants, mais entre deux semi-métaux à points de Dirac. Dans une perspective holographique, c'est à dire qui relie la physique du volume à celle des bords, on est en droit d'attendre un résultat original.

Enfin, on soulignera qu'un immense pan de la physique a été négligé dans notre étude, à savoir celui des interactions électroniques. A l'image de l'effet Hall quantique fractionnaire (EHQF) [GL11], la physique des interactions combinée à la topologie peut être à l'origine des phases les plus exotiques de la matière. Une orientation vers laquelle notre travail pourrait nous mener est l'étude des isolants de Chern fractionnaires, [PRS13]. Ces derniers présentent une bande, bien isolée et de nombre de Chern non-nul, la plus plate possible afin de la faire ressembler à un niveau de Landau. En induisant des corrélations entre les

électrons, on peut développer une physique proche de l'EHQF, avec une fractionnalisation des électrons, [NSCM11, SGSS11, WYG⁺12]. Les isolants de Chern fractionnaires possèdent quelques avantages par rapport aux systèmes d'EHQF. Tout d'abord le gap entre les bandes n'est pas fourni par le champ magnétique et peut correspondre à l'équivalent de plusieurs milliers de Tesla. Ni le champ magnétique, ni les basses températures ne sont donc nécessaires. Néanmoins ces isolants présentent aussi des caractéristiques nouvelles, et on citera notamment que la courbure de Berry, qui induit le nombre de Chern, n'est pas homogène dans l'espace réciproque. Cette situation est effectivement différente de l'EHQF car le champ magnétique appliqué est alors constant dans l'espace réel. Un traitement de ces inhomogénéités serait possible par la méthode de quantification par déformation ce qui est en cours de développement à l'heure actuelle.

Ouverture

Afin de clore cette thèse on souhaite discuter, de manière générale, de l'importance de la topologie en physique.

Tout d'abord, on citera la dimensionalité du problème comme critique pour la topologie. Nous nous sommes ici restreints à des configurations bidimensionnelles mais il se révélerait très intéressants d'exporter nos travaux vers des modèles tridimensionnels. La topologie se révèle particulièrement sensible à la parité de la dimension des espaces. Il est alors fort probable que la physique d'un espace de dimension impaire soit suffisamment différente de celle présentée ici. On notera, par exemple, que les niveaux de Landau n'existent pas en dimension trois, ce qui nécessite d'avoir recours à d'autres observables topologiques

Au cœur de notre recherche se trouve donc la notion déjà introduite d'*observables topologiques*. Et c'est par cette notion que nous achèverons notre discussion. On pourrait interpréter cette dernière par une comparaison avec la théorie des catégories. Cette théorie permet de dresser des ponts entre différents domaines des mathématiques, à l'image de la *topologie algébrique* qui relie la topologie à l'algèbre. Dans cette perspective, les observables topologiques dresseraient un pont entre la topologie et la physique. Dans cette thèse, il a été question uniquement d'une seule observable, les niveaux de Landau à énergie nulle,

mais à mesure que la théorie topologique se développera en matière condensée, il sera probablement nécessaire d'en trouver d'autres, toutes plus adaptées à certaines situations que d'autres.

Mais ce n'est pas tout !

On souhaite ici insister sur la réciprocité de cette notion d'observable topologique. La topologie algébrique se comprend souvent comme l'algèbre au service de la topologie, mais il est parfois possible d'inverser les rôles et la topologie permet, par exemple, de démontrer facilement le théorème centrale de l'algèbre sur la clôture algébrique du corps des complexes [Hat01]. De cette manière, les observables topologiques peuvent aussi s'interpéter comme la physique au service des mathématiques. On pourrait alors imaginer mesurer certains effets physiques afin de confirmer des résultats de mathématiques. Il est alors ici utile de revenir à l'introduction de cette thèse :

Les avancées en physique et mathématiques vont souvent de pair.

Que ces deux sciences marchent de pair est sûrement le mieux qu'on puisse leur souhaiter.

Bibliographie

- [AC79] Y. Aharonov and A. Casher. Ground state of a spin- $\frac{1}{2}$ charged particle in a two-dimensional magnetic field. *Phys. Rev. A*, 19 :2461–2462, Jun 1979. 87
- [AM02] N.W. Ashcroft and N-D. Mermin. *Physique des solides*. EDP Sciences, 2002. 29, 32
- [APC12] P. Alemany, J.-P. Pouget, and E. Canadell. Essential role of anions in the charge ordering transition of $\alpha - (bedt - ttf)_2i_3$. *Phys. Rev. B*, 85 :195118, May 2012. 56
- [Ber84] M.Û. Berry. Quantal phase factors accompanying adiabatic changes. *Proc. R. Soc. Lond. A*, 392 :45–57, Mar 1984. 29, 34
- [BF92] Armelle Barelli and Robert Fleckinger. Semiclassical analysis of harper-like models. *Phys. Rev. B*, 46 :11559–11569, Nov 1992. 114
- [BFF⁺78a] F. Bayen, M. Flato, C. Fronsdal, A. Lichnerowicz, and D. Sternheimer. Deformation theory and quantization. i. deformations of symplectic structures. *Annals of Physics*, 111(1) :61 – 110, 1978. 112, 114, 115, 118, 119, 122
- [BFF⁺78b] F. Bayen, M. Flato, C. Fronsdal, A. Lichnerowicz, and D. Sternheimer. Deformation theory and quantization. ii. physical applications. *Annals of Physics*, 111(1) :111 – 151, 1978. 112, 114, 115, 118, 119, 122
- [BKMM13] M. Bellec, U. Kuhl, G. Montambaux, and F. Mortessagne. Tight-binding couplings in microwave artificial graphene. *Phys. Rev. B*, 88 :115437, Sep 2013. 52

BIBLIOGRAPHIE

- [BM09] C. Bena and G. Montambaux. Remarks on the tight-binding model of graphene. *New Journal of Physics*, 11(9) :095003, 2009. 35, 47, 48
- [BM10] R. Bistritzer and A. H. MacDonald. Moire bands in twisted double-layer graphene. *ArXiv e-prints*, September 2010. 60, 67
- [BPST75] A.A. Belavin, A.M. Polyakov, A.S. Schwartz, and Yu.S. Tyupkin. Pseudo-particle solutions of the yang-mills equations. *Physics Letters B*, 59(1) :85 – 87, 1975. 23
- [Cay13] J. Cayssol. Introduction to Dirac materials and topological insulators. *ArXiv e-prints*, October 2013. 25
- [Con95] A. Connes. *Noncommutative Geometry*. Academic Press Inc, London, 1995. 96
- [dFG⁺12] R. de Gail, J.-N. Fuchs, M. O. Goerbig, F. Piéchon, and G. Montambaux. Manipulation of Dirac points in graphene-like crystals. *Physica B Condensed Matter*, 407 :1948–1952, June 2012. 27
- [dGGG⁺11] R. de Gail, M. O. Goerbig, F. Guinea, G. Montambaux, and A. H. Castro Neto. Topologically protected zero modes in twisted bilayer graphene. *Phys. Rev. B*, 84 :045436, Jul 2011. 27, 66, 103, 105
- [dGGM12] R. de Gail, M. O. Goerbig, and G. Montambaux. Magnetic spectrum of trigonally warped bilayer graphene : Semiclassical analysis, zero modes, and topological winding numbers. *Phys. Rev. B*, 86 :045407, Jul 2012. 27, 74, 75, 99, 106, 107
- [Dir30] P.A.M. Dirac. *The Principles of Quantum Mechanics*. Oxford University Press, 1930. 20
- [Dir31] P.A.M. Dirac. Quantised singularities in the electromagnetic field. *Proc. Roy. Soc.*, 133 :60–72, 1931. 23

BIBLIOGRAPHIE

- [DPM08] P. Dietl, F. Piéchon, and G. Montambaux. New magnetic field dependence of Landau levels in a graphene-like structure. *Phys. Rev. Lett.*, 100 :236405, Jun 2008. 92, 94
- [EGH80] T. Eguchi, P.B. Gilkey, and A.J. Hanson. Gravitation, gauge theories and differential geometry. *Physics Reports*, 66(6) :213 – 393, 1980. 19, 32, 35, 36, 38, 43, 87, 89
- [ESKH09] K. Esaki, M. Sato, M. Kohmoto, and B. I. Halperin. Zero modes, energy gap, and edge states of anisotropic honeycomb lattice in a magnetic field. *Phys. Rev. B*, 80 :125405, Sep 2009. 123, 124
- [Fau93] F. Faure. Approche géométrique de la limite semi-classique par les états cohérents et mécanique quantique sur le tore. *PhD Thesis*, 1993. 113, 114
- [FC13] M. Fruchart and D. Carpentier. An Introduction to Topological Insulators. *ArXiv e-prints*, October 2013. 25, 34, 35
- [Fed96] B. Fedosov. *Deformation Quantization and Index Theory*. Wiley-VCH Verlag GmbH, 1996. 32, 35, 87, 89
- [FPGM10] J.-N. Fuchs, F. Piéchon, M.Ö. Goerbig, and G. Montambaux. Topological Berry phase and semiclassical quantization of cyclotron orbits for two dimensional electrons in coupled band models. *Eur. Phys. J. B*, 77 :351, 2010. 34, 38, 86
- [Fuc13] J.-N. Fuchs. Dirac fermions in graphene and analogues : magnetic field and topological properties. *ArXiv e-prints*, June 2013. 45, 50
- [Gal23] G. Galilei. *L'Essayeur*. Les Belles Lettres, 1623. 19
- [GL50] V.L. Ginzburg and L.D. Landau. On the theory of superconductivity. *Zh. Eksp. Teor. Fiz.*, 20(1064), 1950. 24
- [GL11] M. O. Goerbig and Pascal Lederer. *La physique des effets Hall quantiques*. <http://chercheurs.lps.u-psud.fr/GOERBIG/>, 2011. 24, 83, 96, 129

BIBLIOGRAPHIE

- [Goe11] M. O. Goerbig. Electronic properties of graphene in a strong magnetic field. *Rev. Mod. Phys.*, 83 :1193–1243, Nov 2011. 85
- [GS05] V. P. Gusynin and S. G. Sharapov. Unconventional integer quantum hall effect in graphene. *Phys. Rev. Lett.*, 95 :146801, Sep 2005. 81
- [Hat01] A. Hatcher. *Algebraic Topology*. Cambridge University Press, Cambridge, 2001. 22, 131
- [Hei25] W. Heisenberg. Über quantentheoretische umdeutung kinematischer und mechanischer beziehungen. *Zeitschrift für Physik*, 33(1) :879–893, 1925. 19
- [Hil02] D. Hilbert. Mathematical problems. *Bull. Amer. Math. Soc.*, 8 :437–479, 1902. 20
- [HK10] M. Z. Hasan and C. L. Kane. Colloquium : Topological insulators. *Rev. Mod. Phys.*, 82(4) :3045–3067, Nov 2010. 25, 129
- [Hor05] P. Horava. Stability of fermi surfaces and k theory. *Phys. Rev. Lett.*, 95 :016405, Jun 2005. 44
- [HVMO⁺08] J. Hass, F. Varchon, J. E. Millán-Otoya, M. Sprinkle, N. Sharma, W. A. de Heer, C. Berger, P. N. First, L. Magaud, and E. H. Conrad. Why multilayer graphene on $4h$ -SiC(000 $\bar{1}$) behaves like a single sheet of graphene. *Phys. Rev. Lett.*, 100 :125504, Mar 2008. 60
- [Ins00] Clay Mathematics Institute. The millennium prize problems. May 2000. 20
- [Kai09] J. Kailasvuori. Pedestrian index theorem à la aharonov-casher for bulk threshold modes in corrugated multilayer graphene. *EPL (Europhysics Letters)*, 87(4) :47008, 2009. 82
- [KDP80] K. v. Klitzing, G. Dorda, and M. Pepper. New method for high-accuracy determination of the fine-structure constant based on quantized hall resistance. *Phys. Rev. Lett.*, 45 :494–497, Aug 1980. 24

BIBLIOGRAPHIE

- [KKS06] S. Katayama, A. Kobayashi, and Y. Suzumura. Pressure-induced zero-gap semiconducting state in organic conductor α -(bedt-ttf)₂i₃ salt. *Journal of the Physical Society of Japan*, 75(5) :054705, 2006. 55, 56
- [KKS07] A. Kobayashi, S. Katayama, Y. Suzumura, and H. Fukuyama. Massless fermions in organic conductor. *Journal of the Physical Society of Japan*, 76(3) :034711, 2007. 56
- [KP08] M. I. Katsnelson and M. F. Prokhorova. Zero-energy states in corrugated bilayer graphene. *Phys. Rev. B*, 77 :205424, May 2008. 87
- [Lan37] L.D. Landau. Theory of phase transformations. *Phys. Z. Sowjetunion*, 11, 1937. 24
- [Lau83] R. B. Laughlin. Anomalous quantum hall effect : An incompressible quantum fluid with fractionally charged excitations. *Phys. Rev. Lett.*, 50 :1395–1398, May 1983. 24
- [LdSPCN07] J. M. B. Lopes dos Santos, N. M. R. Peres, and A. H. Castro Neto. Graphene bilayer with a twist : Electronic structure. *Phys. Rev. Lett.*, 99(25) :256802, Dec 2007. 60, 67
- [LFM12] L.-K. Lim, J.-N. Fuchs, and G. Montambaux. Bloch-zener oscillations across a merging transition of dirac points. *Phys. Rev. Lett.*, 108 :175303, Apr 2012. 52
- [LK56] I. M. Lifshitz and A. M. Kosevich. *Sov. Phys. JETP*, 2 :636, 1956. 85
- [LLdS⁺09] G. Li, A. Luican, J. M. B. Lopes dos Santos, A. H. Castro Neto, A. Reina, J. Kong, and E. Y. Andrei. Observation of van hove singularities in twisted graphene layers. *Nat Phys*, 6 :109, Jun 2009. 63
- [LLR⁺11] A. Luican, G. Li, A. Reina, J. Kong, R. R. Nair, K. S. Novoselov, A. K. Geim, and E. Y. Andrei. Single-layer behavior and its breakdown in twisted graphene layers. *Phys. Rev. Lett.*, 106 :126802, Mar 2011. 60

BIBLIOGRAPHIE

- [LRB⁺11] D.S. Lee, C. Riedl, T. Beringer, A. H. Castro Neto, K. von Klitzing, U. Starke, and J. H. Smet. Quantum hall effect in twisted bilayer graphene. *Phys. Rev. Lett.*, 107 :216602, Nov 2011. 27, 103, 104, 128
- [MB72] V.P. Maslov and V.S. Buslaev. *Théorie des perturbations et méthodes asymptotiques*. Dunod, 1972. 86
- [McC57] J. W. McClure. Band structure of graphite and de haas-van alphen effect. *Phys. Rev.*, 108 :612–618, Nov 1957. 71
- [MEMK⁺11] A. S. Mayorov, D. C. Elias, M. Mucha-Kruczynski, R. V. Gorbachev, T. Tudorovskiy, A. Zhukov, S. V. Morozov, M. I. Katsnelson, V. I. Fal'ko, A. K. Geim, and K. S. Novoselov. Interaction-driven spectrum reconstruction in bilayer graphene. *Science*, 333(6044) :860–863, 2011. 71
- [MF06] E. McCann and V.I. Fal'ko. Landau-level degeneracy and quantum hall effect in a graphite bilayer. *Phys. Rev. Lett.*, 96(8) :086805, Mar 2006. 71
- [MGAS⁺13] M. Monteverde, M. O. Goerbig, P. Auban-Senzier, F. Navarin, H. Henck, C. R. Pasquier, C. Mézière, and P. Batail. Coexistence of dirac and massive carriers in α -(bedt-ttf)₂i₃ under hydrostatic pressure. *Phys. Rev. B*, 87 :245110, Jun 2013. 56
- [MnGV07] J. L. Mañes, F. Guinea, and María A. H. Vozmediano. Existence and topological stability of fermi points in multilayered graphene. *Phys. Rev. B*, 75(15) :155424, Apr 2007. 49, 72
- [MPFG09a] G. Montambaux, F. Piéchon, J.-N. Fuchs, and M. O. Goerbig. Merging of dirac points in a two-dimensional crystal. *Phys. Rev. B*, 80 :153412, Oct 2009. 51, 52, 56, 67, 92, 93
- [MPFG09b] G. Montambaux, F. Piéchon, J.-N. Fuchs, and M. O. Goerbig. A universal hamiltonian for motion and merging of dirac points in a two-dimensional crystal. *Eur. Phys. J. B*, 72(4) :509–520, 2009. 51, 52, 56, 67, 92, 93

BIBLIOGRAPHIE

- [Nab06] G.L. Naber. *Topology, Geometry, and Gauge Fields : Foundations*. Springer, 2006. 19
- [Nak03] M. Nakahara. *Geometry, Topology and Physics*. Institute of Physics Publishing, 2003. 87
- [NGM⁺05] K. S. Novoselov, A. K. Geim, S. V. Morozov, D. Jiang, M. I. Katsnelson, I. V. Grigorieva, S. V. Dubonos, and A. A. Firsov. Two-dimensional gas of massless dirac fermions in graphene. *Nature*, 438 :197, Nov 2005. 83
- [NIS95] NIST. Fundamental physical constants. October 1995. 24, 85
- [NMM⁺06] K. S. Novoselov, E. McCann, S. V. Morozov, V. I. Fal'ko, M. I. Katsnelson, U. Zeitler, D. Jiang, F. Schedin, and A. K. Geim¹. Unconventional quantum hall effect and berry's phase of 2π in bilayer graphene. *Nature Physics*, 2 :177, Feb 2006. 99, 100
- [Nov11] K. S. Novoselov. Nobel lecture : Graphene : Materials in the flatland. *Rev. Mod. Phys.*, 83 :837–849, Aug 2011. 45
- [NSCM11] T. Neupert, L. Santos, C. Chamon, and C. Mudry. Fractional quantum hall states at zero magnetic field. *Phys. Rev. Lett.*, 106 :236804, Jun 2011. 130
- [NTN⁺00] N.Tajima, M. Tamura, Y. Nishio, K. Kajita, and Y. Iye. Transport property of an organic conductor α -(bedt-ttf)₂I₃ under high pressure - discovery of a novel type of conductor -. *Journal of the Physical Society of Japan*, 69(2) :543–551, 2000. 54
- [ONF⁺12] M. Orlita, P. Neugebauer, C. Faugeras, A.-L. Barra, M. Potemski, F. M. D. Pellegrino, and D. M. Basko. Cyclotron motion in the vicinity of a lifshitz transition in graphite. *Phys. Rev. Lett.*, 108 :017602, Jan 2012. 71
- [Ons52] L. Onsager. Interpretation of the de haas-van alphen effect. *Philosophical Magazine Series 7*, 43(344) :1006–1008, 1952. 85

BIBLIOGRAPHIE

- [PCNP09] Vitor M. Pereira, A. H. Castro Neto, and N. M. R. Peres. Tight-binding approach to uniaxial strain in graphene. *Phys. Rev. B*, 80 :045401, Jul 2009. 51
- [PD05] W.-T. Pong and C. Durkan. A review and outlook for an anomaly of scanning tunnelling microscopy (stm) : superlattices on graphite. *Journal of Physics D : Applied Physics*, 38(21) :R329, 2005. 60
- [Per13] J. Perrin. *Les Atomes*. Librairie Félix Alcan, 1913. 20
- [PGN06] N.M.R. Peres, F. Guinea, and A.H. Castro Neto. Electronic properties of two-dimensional carbon. *Annals of Physics*, 321(7) :1559 – 1567, 2006. July 2006 Special Issue. 81
- [Poi95] H. Poincaré. Analysis situs. *Journal de l'Ecole Polytechnique*, 1 :1–123, 1895. 20
- [PRS13] S. A. Parameswaran, R. Roy, and S. L. Sondhi. Fractional Quantum Hall Physics in Topological Flat Bands. *ArXiv e-prints*, February 2013. 25, 129
- [RK93] Z. Y. Rong and P. Kuiper. Electronic effects in scanning tunneling microscopy : Moiré pattern on a graphite surface. *Phys. Rev. B*, 48 :17427–17431, Dec 1993. 60
- [Sch50] L. Schwartz. *Théorie des distributions*. Hermann, 1950. 20
- [Sem84] G. W. Semenoff. Condensed-matter simulation of a three-dimensional anomaly. *Phys. Rev. Lett.*, 53(26) :2449–2452, Dec 1984. 85
- [SGSS11] D.N. Sheng, Zheng-Cheng Gu, Kai Sun, and L. Sheng. Fractional quantum hall effect in the absence of landau levels. *Nat. Commun.*, 2, 2011. 130
- [Sim83] B. Simon. Holonomy, the quantum adiabatic theorem, and berry's phase. *Phys. Rev. Lett.*, 51 :2167–2170, Dec 1983. 39
- [SP13] P. San-Jose and E. Prada. Chiral networks in twisted graphene bilayers under interlayer bias. *ArXiv e-prints*, April 2013. 129

BIBLIOGRAPHIE

- [SSP08] S. Shallcross, S. Sharma, and O. A. Pankratov. Quantum interference at the twist boundary in graphene. *Phys. Rev. Lett.*, 101(5) :056803, Aug 2008. 60
- [Ste51] N.E. Steenrod. *The Topology of Fibre Bundles*. Princeton University Press, 1951. 23
- [SW58] J. C. Slonczewski and P. R. Weiss. Band structure of graphite. *Phys. Rev.*, 109 :272–279, Jan 1958. 71
- [SYTW⁺12] J. D. Sanchez-Yamagishi, T. Taychatanapat, K. Watanabe, T. Taniguchi, A. Yacoby, and P. Jarillo-Herrero. Quantum hall effect, screening, and layer-polarized insulating states in twisted bilayer graphene. *Phys. Rev. Lett.*, 108 :076601, Feb 2012. 27, 103, 128
- [TGU⁺12] L. Tarruell, D. Greif, T. Uehlinger, G. Jotzu, and T. Esslinger. Creating, moving and merging dirac points with a fermi gas in a tunable honeycomb lattice. *Nature*, 483 :302, Mar 2012. 51
- [Tho97] D.J. Thouless. *Topological Quantum Numbers in Nonrelativistic Physics*. World Scientific Publishing, 1997. 23
- [TKNdN82] D. J. Thouless, M. Kohmoto, M. P. Nightingale, and M. den Nijs. Quantized hall conductance in a two-dimensional periodic potential. *Phys. Rev. Lett.*, 49 :405–408, Aug 1982. 24, 85
- [TSG82] D. C. Tsui, H. L. Stormer, and A. C. Gossard. Two-dimensional magneto-transport in the extreme quantum limit. *Phys. Rev. Lett.*, 48 :1559–1562, May 1982. 24
- [TST⁺06] N. Tajima, S. Sugawara, M. Tamura, Y. Nishio, and K. Kajita. Electronic phases in an organic conductor α -(bedt-ttf)₂i₃ : Ultra narrow gap semiconductor, superconductor, metal, and charge-ordered insulator. *Journal of the Physical Society of Japan*, 75(5) :051010, 2006. 54
- [TST⁺07] N. Tajima, S. Sugawara, M. Tamura, R. Kato, Y. Nishio, and K. Kajita. Transport properties of massless dirac fermions in an organic conductor

BIBLIOGRAPHIE

- α -(bedt-ttf)₂i₃ under pressure. *EPL (Europhysics Letters)*, 80(4) :47002, 2007. 54
- [TTIdH⁺12] A. Tejeda, A. Taleb-Ibrahimi, W. de Heer, C. Berger, and E. H. Conrad. Electronic structure of epitaxial graphene grown on the c-face of sic and its relation to the structure. *New Journal of Physics*, 14(12) :125007, 2012. 60, 62
- [TTT⁺02] N. Tajima, Tajima, M. Tamura, Y. Nishio, and K. Kajita. Effects of uniaxial strain on transport properties of organic conductor α -(bedt-ttf)₂i₃ and discovery of superconductivity. *Journal of the Physical Society of Japan*, 71(8) :1832–1835, 2002. 54
- [vN32] J. von Neumann. *Mathematische Grundlagen der Quantenmechanik*. Springer, 1932. 20
- [Vol03] G. E. Volovik. *The Universe in a Helium Droplet*. Clarendon Press, Oxford, 2003. 44
- [Wei05] S. Weinberg. *Volume I Foundations*. Cambridge University Press, 2005. 25
- [WEN90] X. G. WEN. Topological orders in rigid states. *International Journal of Modern Physics B*, 04(02) :239–271, 1990. 25
- [WGS08] B Wunsch, F Guinea, and F Sols. Dirac-point engineering and topological phase transitions in honeycomb optical lattices. *New Journal of Physics*, 10(10) :103027, 2008. 51
- [WTVS11] X. Wan, A. M. Turner, A. Vishwanath, and S. Y. Savrasov. Topological semimetal and fermi-arc surface states in the electronic structure of pyrochlore iridates. *Phys. Rev. B*, 83 :205101, May 2011. 49
- [WYG⁺12] Y.-F. Wang, H. Yao, Z.-C. Gu, C.-D. Gong, and D. N. Sheng. Non-abelian quantum hall effect in topological flat bands. *Phys. Rev. Lett.*, 108 :126805, Mar 2012. 130

- [XCN10] D. Xiao, M.-C. Chang, and Q. Niu. Berry phase effects on electronic properties. *Rev. Mod. Phys.*, 82 :1959–2007, Jul 2010. 34
- [YM54] C. N. Yang and R. L. Mills. Conservation of isotopic spin and isotopic gauge invariance. *Phys. Rev.*, 96 :191–195, Oct 1954. 23
- [ZCZGK12] Y. Zhao, P. Cadden-Zimansky, F. Ghahari, and P. Kim. Magnetoresistance measurements of graphene at the charge neutrality point. *Phys. Rev. Lett.*, 108 :106804, Mar 2012. 85



Raphaël de GAIL

Aspects topologiques des dérivés du
graphène
Topological Aspects of Graphene
Derivatives



Résumé :

On s'intéresse aux propriétés topologiques du graphène et de ses dérivés, notamment la bicouche sous diverses contraintes.

Mots clés :

Electronique, Graphène, Topologie, Phase de Berry

Abstract :

We study various topological features of graphene and related devices, such as bilayer graphene under constraints.

Keywords :

Electronics, Graphene, Topology, Berry phase